

ENCIT 96



ENCIT 96



PROCEEDINGS OF THE

BRAZILIAN CONGRESS OF
ENGINEERING AND THERMAL SCIENCES

6th

LATIN AMERICAN CONGRESS OF
HEAT AND MASS TRANSFER

LATCYM 96



LATCYM 96



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

FLORIANÓPOLIS / SC
BRAZIL

November 11th - 14th, 1996

VOLUME II

II

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 II

Florianópolis SC, November 11th - 14th 1996



Associação Brasileira
de Ciências Mecânicas



Universidade Federal de
Santa Catarina

Promoted by



Universidade Federal
de Santa Catarina

ABCm

Associação Brasileira de Ciências Mecânicas

UFSC DEPARTAMENTO
DE
**ENGENHARIA
MECÂNICA**

Sponsors



Secretaria de Estado de Governo
FUNCITEC



Instituto Euvaldo Lodi

Embraco
aspera

finep

Financiadora de Estudos e Projetos

CNPq

Conselho Nacional de Desenvolvimento
Científico e Tecnológico

BR PETROBRAS

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 Néelson 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
 Hércio 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
 Marinho 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 Seleglim 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
Wilson 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
Sérgio 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, Guilherme 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 Aloisio 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. González-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. Odeide, 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 NO _x 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 Haghghi.	
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 TÉRMOSTATO - 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 <i>MATHEMATICA</i> ®	365
Eugênio S. Rosa, Vicente L. Scalón, 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 Hombeek.	

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
Álvaro 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, Wladimir 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. Ronzani, 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	823
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.	
EFEECTO 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.	
ANÁLISIS 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, Sérgio V. Möller.	

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

FRICITION FACTOR IN ANNULAR CONDUITS WITH TUBULAR FINNS	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 TÉRMICO 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 TENSÍMETRO	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. Zapparoli.	

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 Sodr�, 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 TRANSFER 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, Sílvio 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, Arquímides 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-ISOTÉRMICA COM REAÇÃO QUÍMICA	1239
Andréa 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.	
EFFECTO 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 Oyenyin, 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, Osvaldo 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 César 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 GÁS	1505
Luís 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. Silveiras, Paulo Yodianitskaia.	
ESTUDOS SOBRE O DESEMPENHO DE SISTEMAS DE REFRIGERAÇÃO DE PEQUENO PORTE	1533
Flávio A. S. Fiorelli, Otávio M. Silveiras.	
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
Oswaldo 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 Souza, 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, Helcio 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, Horácio 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. Rodríguez, 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, Dominique 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
SEMITRANSSPARENTES. 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
Énio 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.
- OOB 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 κ - ϵ E O MODELO ALGÉBRICO DO TENSOR DE REYNOLDS PARA ALTOS NÚMEROS 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, Atila 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
Aguir 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
Belandriá, 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 F^o, 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
Gavrilesco, 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
González-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
Odeide, 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
Oyenyin, B.	1429

P

Pacheco, P. M. C. L.	791
Pagano, A. M.	1793
Pagliari, 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
Rodríguez Filho, J.	1447
Rodrigues Jr., R.	669
Rodríguez, G.	115
Rodriguez, R.J.	1687

Rodríguez, 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



TRANSFERENCIA DE CALOR EN EL HOMOGENEIZADO DE LA MIEL

Carnero, M; Ducrós, E; Ferrari, M; Lema, A; Peiretti, A; Ziletti, M; Pramparo, M.

Departamento de Tecnología Química
Universidad Nacional de Río Cuarto
5800 - Río Cuarto - Córdoba - Argentina



RESUMEN

En el presente trabajo se obtiene una correlación para el coeficiente de transferencia de calor en el Homogeneizado de la miel. En primer lugar se realizó un análisis dimensional de las ecuaciones de transferencia de movimiento y energía que conforman el modelo del sistema, para obtener las variables de las que depende el coeficiente pelicular. En una segunda etapa se adoptó un método para la determinación del coeficiente de transferencia de calor a partir de datos experimentales en un recipiente de homogeneizado a escala piloto.

INTRODUCCION

La miel es un alimento rico en azúcares y contiene además, un conjunto de otros compuestos tales como vitaminas, aminoácidos, minerales, oligoelementos, etc. La proporción de estos componentes varía según el origen de la miel, siendo la flora del lugar de elaboración, uno de los factores más importantes en la determinación de esta composición.

Las diferentes composiciones producen mieles de distinto color, aroma y sabor que en una planta de tratamiento industrial ocasiona la necesidad de una homogeneización de las mismas. Esta homogeneización consiste en un mezclado lento durante el cual, para facilitar la operación se debe aportar calor lo que permite operar la miel en un estado de fluidez adecuada. La temperatura de trabajo no debe ser muy alta (menos de 45°C) porque ocurrirían cambios irreversibles en algunos componentes de la miel, produciéndose un deterioro de la calidad natural de la misma.

En esta operación están involucrados mecanismos de transferencia de calor, movimiento y masa. Entre las variables involucradas en el diseño del equipo está el coeficiente de transferencia de calor por convección, éste depende de un gran número de parámetros razón por la cual es necesaria su determinación específica para este tipo de geometría y para este fluido. Con este objetivo se construyó un equipo homogeneizador de miel de escala piloto que presenta similitud geométrica con el utilizado a escala industrial, trabajándose con un tipo de miel de comportamiento newtoniano y en el estado líquido.

ANÁLISIS DIMENSIONAL

Para obtener cuáles son las variables de las que depende el coeficiente pelicular de transferencia de calor se hace uso de una herramienta matemática, el análisis dimensional, aplicada a las ecuaciones de transferencia de movimiento y energía las cuales

conforman el modelo que representa el comportamiento del sistema.

Se parte de la definición del coeficiente de transferencia de calor por convección para el sistema:

$$Q = h.A.(T_w - T_M) \quad (1)$$

siendo:

T_M : temperatura de la miel en el seno del fluido, fuera de la capa límite de transferencia.

El calor intercambiado en la superficie de la camisa es:

$$Q = \int_{A^*} (-k_M \nabla T) \Big|_{\text{sup}} dA^* \quad (2)$$

De la igualación de las ecuaciones (1) y (2) y su adimensionalización queda:

$$Nu = \frac{h D_{AG}}{k} = - \left(\frac{1}{A^*} \right) \int_{A^*} (\nabla^* T^*) \Big|_{\text{sup}} dA^* \quad (3)$$

siendo, Nu, Número de Nusselt (se ha elegido como longitud característica para este número, el diámetro del agitador, D_{AG}).

En la ecuación anterior se eligen como variables adimensionales:

$$A^* = \frac{A}{D_{AG}^2} \quad \nabla^* = D_{AG} \nabla \quad T^* = \frac{T - T_M}{T_w - T_M}$$

Para encontrar $(\nabla^* T^*)$ de la Eq. (3) se plantean las ecuaciones de variación:

$$(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0 \quad \text{Ec. de continuidad} \quad (4)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 v + \rho g \quad \text{Ec. de movimiento (5)}$$

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + \mu \Phi_v \quad \text{Ec. de energía (6)}$$

A continuación se adimensionalizan estas ecuaciones. Para lo cual se definen las siguientes variables adimensionales:

$$v^* = \frac{v}{V_c} \quad v^* = \text{velocidad adimensional} \\ V_c = N D_{Ag}$$

$$p^* = \frac{p - p_0}{\rho V_c^2} \quad p^* = \text{presión adimensional}$$

$$t^* = N t \quad t^* = \text{tiempo adimensional}$$

En términos de estas variables las ecuaciones de variación son las siguientes:

$$(\nabla^* \cdot v^*) = 0 \quad (7)$$

$$\frac{Dv^*}{Dt^*} = \frac{1}{Re} \nabla^* \cdot \nabla^* v^* - \nabla^* p^* + \frac{1}{Fr} \frac{g}{g_c} \quad (8)$$

$$\frac{DT^*}{Dt^*} = \frac{1}{Re Pr} \nabla^* \cdot \nabla^* T^* + \frac{Br}{Re Pr} \Phi_v^* \quad (9)$$

donde

$$Re = \text{numero de Reynolds} = \frac{\rho V_c^2 / D_{Ag}}{\mu V_c / D_{Ag}^2}$$

$$Fr = \text{numero de Froude} = \frac{\rho V_c^3 / D_{Ag}}{\rho g}$$

$$Br = \text{numero de Brinkman} = \frac{\mu (v/D_{Ag})^2}{k (T_w - T_M) / D_{Ag}^2}$$

$$Pr = \text{numero de Prandtl} = \frac{C_p \mu}{k}$$

Por resolución de estas ecuaciones se puede obtener la distribución de T^* y de v^* como una función de x^* , y^* , z^* , t^* y de los números adimensionales o parámetros que multiplican a cada uno de los términos de las ecuaciones de variación adimensionalizadas. Al evaluar las condiciones iniciales y de borde no aparecen números adimensionales nuevos, solamente factores de forma. De esta manera las distribuciones de T^* y v^* serán

$$T^* = f(Re, Pr, Fr, Br, \text{Factores de Forma}) \quad (10)$$

$$v^* = f(Re, Pr, Fr, Br, \text{Factores de Forma}) \quad (11)$$

Al realizar la integral de la Eq. (3) previa diferenciación de T^* , aparecerán los parámetros ya encontrados en la Eq. (10) y los que provengan de los límites de integración, que solo aportan factores de forma.

Este análisis nos revela que el número adimensional Nu está correlacionado con:

$$Nu = f(Re, Pr, Fr, Br, \text{Factores de forma})$$

Para nuestro sistema los términos de las Eqs. (8) y (9), $\left(\frac{1}{Fr} \frac{g}{g_c}\right)$ y $\left(\frac{Br}{Re Pr} \Phi_v^*\right)$, son despreciables. El primero porque no se forman vórtices es decir, la superficie del fluido es plana lo que implica que los efectos de la gravedad son despreciables, y el segundo porque los efectos de la disipación viscosa no son considerables.

Debido a la similitud geométrica con los equipos utilizados a escala industrial para esta misma operación dichos factores de forma no aparecen en la correlación final. El equipo utilizado es de forma rectangular con eje horizontal el que contiene dos paletas inclinadas y fondo semicilíndrico. Un esquema del mismo se presenta en la Fig. 1 y Fig. 2.

Los factores de forma y sus valores para el equipo de prueba fueron los siguientes:

$$L/D_{Ag} = (40/19), \quad H/D_{Ag} = (20/19), \quad B/D_{Ag} = (19.5/19)$$

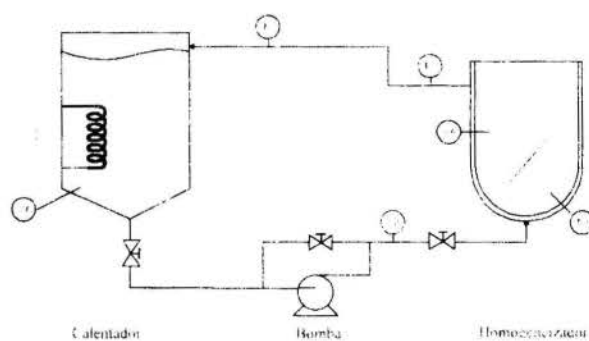


Figura 1

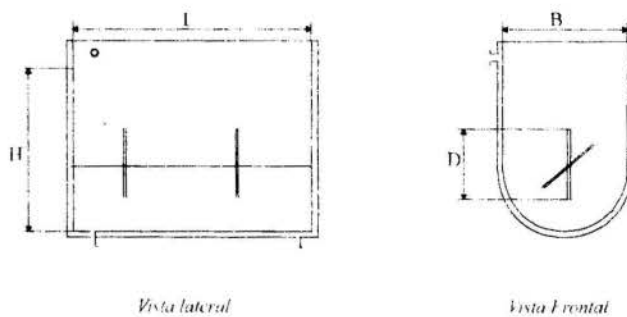


Figura 2

Respecto a las características del agitador se diseñó de modo que efectúe un mezclado uniforme y que limite la cantidad de aire que se incorpora. Luego la correlación será

$$Nu = k(Re)^a (Pr)^b \quad (12)$$

En el desarrollo anterior se ha supuesto que las propiedades físicas de la miel son constantes con la temperatura, ya que sus cambios son despreciables, sin embargo la viscosidad de la miel presenta una fuerte variación durante el transcurso de la homogeneización, la que se tendrá en cuenta incluyendo el grupo (μ/μ_w) , siendo μ la viscosidad para un cierto valor medio T de

la temperatura global del fluido y μ_w la viscosidad a la temperatura de la pared interior en contacto con la miel.

Luego la Eq. (12) queda:

$$Nu = k(Re)^a(Pr)^b(\mu/\mu_w)^c \quad (13)$$

Los valores de K, a, b y c fueron determinados a partir de los valores de Nu obtenidos experimentalmente.

PARTE EXPERIMENTAL

Descripción del Método. Para arribar a una correlación del coeficiente de transferencia de calor para la miel en función del número de Reynolds, el número de Prandtl y μ/μ_w , tal como se propone en la Eq. (13), se utilizó el siguiente procedimiento:

- Se realizó un balance de energía en el equipo utilizado en las experiencias.
- Se obtuvo una expresión que involucra el coeficiente global de transferencia de calor U, en función de magnitudes conocidas (propiedades físicas, características geométricas del equipo, etc.) y en función de magnitudes determinadas experimentalmente (temperaturas a diferentes tiempos).
- Se determinó el coeficiente pelicular de transferencia de calor para la miel h_M , para diferentes números de Reynolds, Prandtl, y μ/μ_w , asumiendo que el coeficiente pelicular para el agua, h_a , responde a alguna correlación conocida.
- Se ajustaron los datos obtenidos de h_M en función de los números adimensionales, utilizando un software adecuado.

Balance de Energía. El equipo utilizado en las experiencias es un tanque mezclador equipado con una camisa por donde circula el fluido de intercambio. La miel es calentada desde una temperatura inicial T_{M0} , mediante agua en la chaqueta, que ingresa a la misma a una temperatura T_{A1} aproximadamente constante.

En el siguiente análisis se supone mezcla perfecta tanto dentro del recipiente como en la camisa, y que la velocidad de flujo del agua de intercambio es constante. Los balances de energía para el recipiente y la camisa son los siguientes:

$$\rho_M C_{PM} V_M \frac{dT_M}{dt} = -UA [T_M(t) - T_A(t)] + Q \quad (14)$$

$$\rho_A C_{PA} V_A \frac{dT_A}{dt} = UA [T_M(t) - T_A(t)] - \rho_A C_{PA} Q \quad (15)$$

El término Q incluye la energía cinética transferida al fluido del recipiente por el impulsor y las pérdidas; en este caso particular se considera despreciable frente al término de transferencia global.

Estas ecuaciones pueden reescribirse de la siguiente forma:

$$\frac{dT_M}{dt} = -\beta_M [T_M(t) - T_A(t)] \quad (16)$$

$$\frac{dT_A}{dt} = \beta_A [T_M(t) - T_A(t)] - \Phi_A [T_A(t) - T_{A1}] \quad (17)$$

Las condiciones iniciales en $t=0$ son:

$$T_M(t) = T_{M0}$$

$$T_A(t) = T_{A0}$$

Las Eqs. (16) y (17) junto con las condiciones iniciales son resueltas utilizando el método de los vectores y valores propios para la resolución de sistemas de ODEs. Como resultado se obtiene la siguiente ecuación:

$$T_M(t) = \frac{1}{\beta_M} \left[(\beta_A + \Phi_A + \lambda_1) c_1 e^{\lambda_1 t} - (\beta_A + \Phi_A + \lambda_2) c_1 e^{\lambda_2 t} \right] + \frac{T_{A1}}{(\lambda_1 + \lambda_2)} \left[\lambda_1 (1 - e^{\lambda_1 t}) - \lambda_2 (1 - e^{\lambda_2 t}) \right] \quad (18)$$

siendo:

$$c_1 = \frac{\beta_M + \lambda_1 T_{A0} + \beta_A T_{M0}}{\lambda_1 - \lambda_2}$$

$$c_2 = \frac{\beta_M + \lambda_2 T_{A0} + \beta_A T_{M0}}{\lambda_1 - \lambda_2}$$

$$Z_1 = \beta_A + \beta_M + \Phi_A$$

$$Z_2 = \beta_M \Phi_A$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \left(-Z_1 + \sqrt{Z_1^2 - 4Z_2} \right)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} \left(-Z_1 - \sqrt{Z_1^2 - 4Z_2} \right)$$

$$\beta_A = \frac{UA}{\rho_A C_{PA} V_A}$$

$$\beta_M = \frac{UA}{\rho_M C_{PM} V_M}$$

Cálculo del Coeficiente. Para determinar el coeficiente U se debe resolver la Eq. (18); en la que el área de transferencia de calor, el volumen del recipiente mezclador y de la chaqueta son conocidos. Las temperaturas en la chaqueta y el recipiente para diferentes tiempos se obtienen a partir de las experiencias. Las propiedades físicas son evaluadas a diferentes temperaturas, utilizando las siguientes correlaciones. (Gekas, 1992)

• Densidad de la miel

$$\rho_M = 1495.086 - 0.257 T - 6.3869 \cdot 10^{-4} T^2 \quad (19)$$

$$[\rho_M] = \text{Kg}/\text{m}^3$$

$$[T] = ^\circ\text{C}$$

• Capacidad calorífica de la miel.

$$C_{PM} = 1999 + 1.06066 T - 3.9558 \cdot 10^{-3} T^2 \quad (20)$$

$$[C_{PM}] = \text{J}/\text{Kg} \cdot ^\circ\text{C}$$

$$[T] = ^\circ\text{C}$$

• Conductividad calorífica de la miel.

$$K_M = 0.2642 + 1.449 \cdot 10^{-3} T \quad (21)$$

$$[K_M] = \text{W}/\text{m} \cdot ^\circ\text{C}$$

$$[T] = ^\circ\text{C}$$

• *Viscosidad de la miel.*

La determinación de la misma se realizó experimentalmente a partir de un total de 169 datos de viscosidades que se ajustaron mediante la siguiente ecuación:

$$\mu_M = A e^{B/T} \quad (22)$$

$[\mu_M] = \text{centipoise}$
 $[T] = \text{K}$

los valores estimados para los parámetros A y B son:

$$A = 5.7620656 \cdot 10^{11} \text{ centipoise}$$

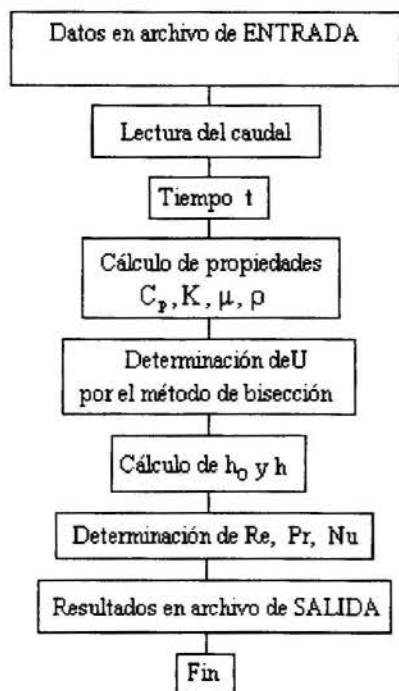
$$B = 9679,12 \text{ K}$$

• *Viscosidad del agua.*

$$\mu_A = 2.64832 \cdot 10^{-4} e^{(1710 - 557/T)} \quad (23)$$

$[\mu_M] = \text{centipoise}$
 $[T] = \text{K}$

Los términos de la Eq. (18) $\beta_A, \beta_M, \lambda_1, \lambda_2, c_1$ y c_2 son funciones de U, por lo tanto dicha ecuación debe ser resuelta usando un esquema numérico de tipo iterativo. En este caso se utilizó el método de la bisección. A continuación se muestra un diagrama de flujo del procedimiento seguido para el cálculo



Experiencias

a) Características del equipamiento utilizado. (Fig. 1 y Fig. 2) A un equipo de agitación de escala piloto de un volumen de 0.0135 m³ se le diseñó y construyó un sistema calefactor consistente en una camisa de un volumen de 0.014 m³ y un área de transferencia de calor de 0.026 m² por donde circula agua como fluido de intercambio

El calor es suministrado a este fluido mediante una resistencia eléctrica dispuesta en el recipiente T₁, que está

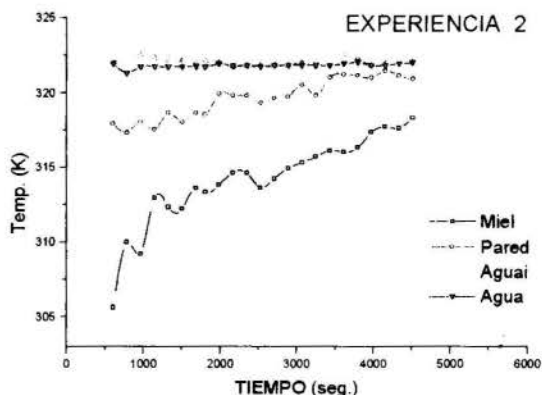
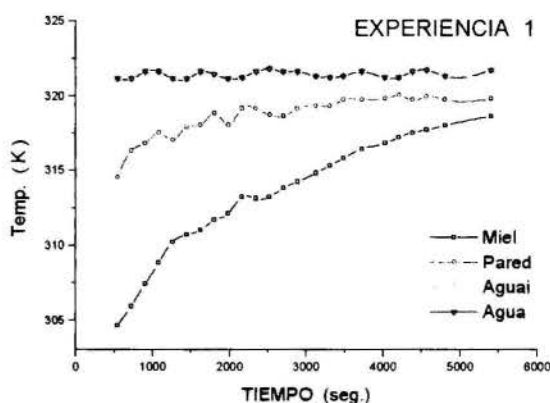
equipado con un controlador, de manera de asegurar una temperatura de ingreso a la camisa aproximadamente constante.

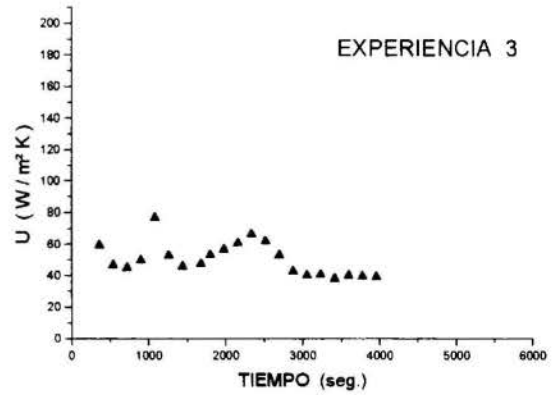
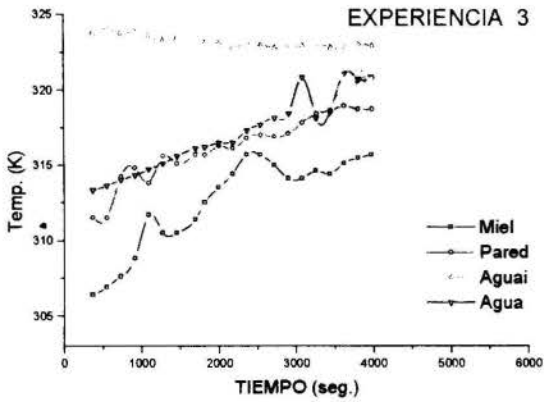
Se realizó además la selección y construcción del impulsor para el tanque mezclador (T₂) el cual consiste en dos paletas inclinadas montadas sobre un eje horizontal, con un D_{AG} = 0.19 m. La velocidad de agitación se puede variar utilizando un sistema de poleas.

Para la medición de la temperatura del agua de intercambio se instalaron termocuplas en las tuberías de entrada y de salida de la camisa, como se muestra en el diagrama de flujo de la Fig. 1. En el recipiente mezclador se dispusieron termocuplas en la pared del mismo y en el seno del fluido para obtener mediciones de T_w y T_M respectivamente.

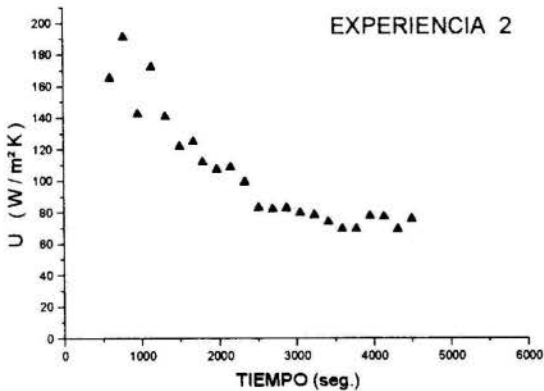
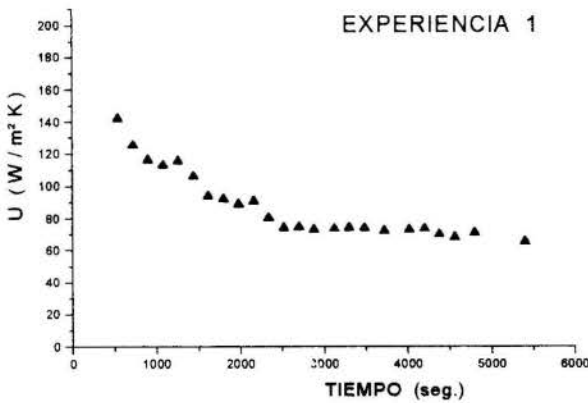
b) Datos obtenidos.

Se realizaron tres corridas identificadas como experiencias 1, 2 y 3, con velocidad del impulsor de 50 r.p.m., 39 r.p.m. y 31 r.p.m. respectivamente. En todos los casos, se comenzó con la miel en estado líquido a las temperaturas iniciales. Las lecturas de las temperaturas se tomaron a intervalos de 3 min. aproximadamente; en los gráficos siguientes se muestran los resultados obtenidos:





A continuación se muestran los valores correspondientes de U para cada experiencia.



A partir de estos datos, se calculan los valores del coeficiente pelicular para la miel, h_M , suponiendo que para el lado de la camisa puede utilizarse la siguiente correlación (Rase, 1977):

$$\frac{h_A D_e}{K} = 1,02 \text{Re}^{0,45} \text{Pr}^{0,5} \left(\frac{D_e}{L}\right)^{0,4} \left(\frac{B+2e}{L}\right)^{0,8} \quad (24)$$

siendo, e: espesor de la camisa

Para el tipo de camisa diseñada para el equipo de prueba el diámetro equivalente viene dado por:

$$D_e = e/3$$

RESULTADOS.

Los datos anteriores fueron ajustados linealizando la relación:

$$\text{Nu} = k \text{Re}^a \text{Pr}^b \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^c$$

es decir se realizó una regresión lineal múltiple, utilizando el software ORIGIN, sobre:

$$\ln \text{Nu} = \ln k + a \ln \text{Re} + b \ln \text{Pr} + c \ln \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right) \quad (25)$$

Las estimaciones para los parámetros fueron:

$$\begin{aligned} k &= 0,00899 \\ a &= 0,85605 \\ b &= 0,58523 \\ c &= 1,75405 \\ R^2 &= 0,52015 \\ \text{SD} &= 0,4316 \end{aligned}$$

CONCLUSIONES

De un análisis adimensional de las ecuaciones de transferencia de cantidad de movimiento y energía que representan al comportamiento del sistema se deduce que el Nu para un sistema geoméricamente semejante al estudiado viene dado por la siguiente expresión:

$$Nu = 0,00899 Re^{0,85} Pr^{0,58} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{1,75}$$

Los valores obtenidos de a y de b se encuentran dentro del rango de los datos por la bibliografía (Uhl, 1986) para mezclados con calefacción en equipos convencionales. El valor c es relativamente mayor, resultado causado probablemente por la alta viscosidad del fluido estudiado.

NOMENCLATURA

A [m ²]	Area de transferencia de calor
Br	Número de Brikman
C _p [J/kg.K]	Capacidad calorífica
D _{AG} [m]	Diámetro del agitador
F _r	Número de Froude
g [m/s ²]	Gravedad
h [W/m ² .K]	Coefficiente pelicular de transferencia de calor
k [W/m.K]	Conductividad térmica
N[rps]	Velocidad de rotación del agitador
Nu	Número de Nusselt
P ₀ [Pa]	Presión de referencia
P [Pa]	Presión
Q _A [m ³ /s]	Flujo volumétrico
R ²	Coefficiente de determinación
Re	Número de Reynolds
SD	Desviación estándar
t [s]	Tiempo
T [K]	Temperatura
U [W/m ² .K]	Coefficiente global de transferencia de calor
V [m ³]	Volumen
v [m/s]	Velocidad
x, y, z	Coordenadas espaciales
ρ [kg/m ³]	Densidad
μ [kg/m.s]	Viscosidad
Φ _A [1/s]	Inversa del tiempo de residencia del fluido de la chaqueta
Φ _v	Función de disipación viscosa
∇	Operador nabla

• Subíndices:

M	miel
A	agua
w	pared
i	ingreso

REFERENCIAS

- Gekas, V. (1992) "Transport Phenomena of Foods and Biological Materials", CRC. pp. 77-79.
- Rase, H. (1977) "Chemical reactor design for process plants" Vol. 1, pp. 358
- Uhl, V. (1986) "Mixing Theory and Practice" Vol 1., Academic Press, pp. 282-284.

ABSTRACT

In this paper a correlation for heat transfer coefficient was obtained for the operation of treating honey to be homogeneous.

Initially, a dimensional analysis of movement and energy transfer equations was made. These equations constitute a model which allow to get the variables on which heat transfer film coefficient depends.

Then, an experimental method was designed at a pilot scale to measure involved variables. Therefore experimental data were fitted to obtain the correlation searched.



SIMULACION DE PERDIDAS DE NUTRIENTES DURANTE EL SECADO DE PLACAS DE PAPA

Clara O. Rovedo & Pascual E. Viollaz
Departamento de Industrias
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires
1428 - Buenos Aires - Argentina



SUMMARY

La retención de nutrientes durante el proceso de secado en corriente de aire se analiza utilizando un modelo para sólidos que sufren encogimiento. Se integran numéricamente las ecuaciones de balance de masa y energía, con condiciones de contorno convectivas, para distintas temperaturas de secado. Se presentan los resultados calculando las pérdidas en función del tiempo, para distintas energías de activación, valores iniciales de la humedad y humedad del aire, tomando los datos termofísicos y termodinámicos de la papa.

INTRODUCCION

Es un hecho bien conocido que durante el procesado de alimentos se producen transformaciones que alteran la calidad del producto. Un proceso muy utilizado en la industria de alimentos es el secado en corriente de aire, el cual tiene por objeto disminuir la actividad de agua del alimento a los efectos de otorgarle estabilidad al producto. Durante dicho proceso pueden producirse reacciones de deterioro, tales como las de browning y de pérdida de nutrientes. Este es un problema importante, dado que cada vez se insiste más en los aspectos nutricionales de los alimentos. Es decir, un alimento no solo debe ser estable, sino que debe mantener sus cualidades nutricionales y organolépticas lo más parecidas a los alimentos frescos. Además, se prefiere no realizar el agregado de vitaminas o nutrientes sintéticos. La pérdida de nutrientes durante el secado de alimentos ha sido estudiada por diferentes autores, entre ellos, M. Mishkin et al. (1984), B. Shakya et al. (1986), J. Banga and R.P. Singh (1994). Otros autores tales como Y. Sakai et al. (1987), han estudiado la cinética de degradación de ácido ascórbico en presencia de oxígeno.

En este trabajo se realizará la predicción de la pérdida de un nutriente, que sigue una cinética de primer orden, con una constante de velocidad que no depende del contenido de agua. Para ello se utilizarán las ecuaciones diferenciales que describen el proceso de secado de un sólido que sufre encogimiento. Se tendrá en cuenta que la temperatura es variable a lo largo del proceso, y se usarán condiciones de contorno convectivas. La resolución se hará en forma numérica.

MODELADO DEL PROCESO

Las ecuaciones básicas que gobiernan la transferencia de calor y masa durante el secado de un sólido que sufre encogimiento, han sido reportadas recientemente por Rovedo et al. (1995). Por razones de claridad se presentan a continuación las ecuaciones utilizadas.

La ecuación de balance de materia para difusión unidireccional y encogimiento tridimensional, es la siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_z = \left[\frac{A(t)}{A_0} \right]^2 \frac{D}{\xi_0^2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(1 + \frac{\rho_s u}{\rho_w} \right)^{-2} \frac{\partial u}{\partial z} \right] - \frac{z}{A(t)} \frac{d(A(t)/A_0)}{dt} \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_t$$

(1)

donde D es el coeficiente de difusión, ξ_0 es el semiespesor seco inicial de la placa, ρ_s es la densidad esquelética del sólido y $A(t)$ representa la variación del área lateral debido al encogimiento. Para obtener la ecuación (1), se ha utilizado la transformación de Landau para fijar los límites de integración. Ello es necesario dado que al producirse encogimiento durante el secado, el problema original es de frontera móvil (problema de Stefan).

El balance de calor es:

$$(Cp_s + uCp_w) \frac{dT}{dt} = \frac{hA(t)}{m_s} (T_\infty - T) + \lambda \frac{du}{dt} \quad (2)$$

En esta expresión, h es el coeficiente de transferencia de calor y λ es el calor de vaporización, el cual varía con la temperatura según una expresión presentada por Treybal (1980) (ver Tabla 1).

Las condiciones iniciales y de contorno de las ecuaciones (1) y (2), son:

$$t = 0 ; \quad u = u_0 \quad T = T_0 \quad (3)$$

$$t > 0 \quad y \quad z = 1 ;$$

$$\frac{D\rho_B^2}{\xi_m \rho_s} \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{k_g(p_{v_i} - p_{v_\infty})}{p_{b_{ml}}} \quad (4)$$

$$t > 0 \quad y \quad z = 0 ; \quad \frac{\partial u}{\partial z} = 0 \quad (5)$$

donde ξ_m es el semiespesor seco de la placa y ρ_B es la masa de sólido por unidad de volumen total de la placa. El coeficiente de transferencia de masa, k_g , se calculó a partir de la relación que lo vincula con el coeficiente de transferencia de calor (Rovedo, 1994) (ver Tabla 1).

La integración numérica de las ecuaciones (1) y (2), permite realizar la predicción de la evolución de la

temperatura y la humedad del sólido en función del tiempo.

El modelo basado en las ecuaciones recién descritas, fue utilizado para predecir las pérdidas de nutrientes durante el secado de placas de papa. Las propiedades físicas utilizadas durante la simulación se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1 - Propiedades físicas utilizadas durante la simulación de secado de placas de papa.

$\ln p_v/p_v^* = [(405.7)^{-1} - T^{-1}] (551.7 - u_i)^{1/0.57}$	(#)
$\ln (p_v^*/1.01325 \times 10^5) = 70.4347 - 7362.69/T + 0.006952 T - 9 \ln T$	(≈)
$k_g/h = 6.44 \times 10^{-9}$	(*)
$D [m^2/s] = 3.447 \times 10^{-7} \exp(-20900/RT)$	(ó)
$A(t)/A_0 = 0.62 + (1 - 0.62) \exp(-0.00024 t)$	(f)
$\lambda(T) [kJ/kg] = 2495.5 + 1881 (T_{\infty} - 273) - 4180 (T - 273)$	(*)
$C_{ps} = 1.254 \text{ kJ/kg } ^\circ\text{C}$	(•)
$h = 71.5616 \text{ W/m } ^\circ\text{C}$	(f)
$\rho_s = 1600 \text{ kg/m}^3$	(f)

- (#) Aguerre et al. (1986)
- (≈) Prausnitz et al. (1967)
- (*) Treybal (1980)
- (ó) Arrhenius equation
- (f) Rovedo (1994)
- (•) Wang and Brennan (1993)

La simulación de la pérdida de nutrientes, suponiendo una cinética de degradación de primer orden, fue implementada utilizando la siguiente ecuación:

$$dx_A/dt = k(1 - x_A) \quad (6)$$

siendo $x_A = (N_A^0 - N_A) / N_A^0$, la conversión del nutriente. La constante de velocidad de reacción, k , varía con la temperatura según la expresión de Arrhenius:

$$k = k_0 \exp(-E_a / RT) \quad (7)$$

donde k_0 es el preexponencial independiente de la temperatura y E_a es la energía de activación.

Las ecuaciones (1) - (6) fueron resueltas numéricamente, integrando la ecuación (1) por diferencias finitas. Simultáneamente, la ecuación (2) fue integrada por un método de Runge-Kutta de segundo orden y la ecuación (6) por diferencias finitas usando un método de Runge Kutta de primer orden. Dado que se utilizó una isoterma no lineal, fue necesario realizar un proceso iterativo al utilizar la condición de contorno (4).

RESULTADOS Y DISCUSION

Los resultados obtenidos para una reacción de primer orden independiente de la concentración, se presentan en la Figura (1), donde se representa en ordenadas la conversión

x_A , (o sea, el porcentaje de nutrientes destruido), versus el tiempo, para una energía de activación de la reacción de degradación de 25 Kcal/mol. Las condiciones del aire de secado fueron: 60°C y 4.5 % de humedad relativa.

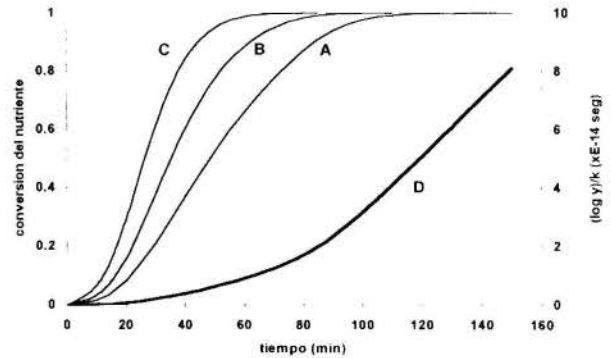


Figura 1 - Influencia del preexponencial en la fracción de nutrientes destruido.

Las curvas A, B, y C corresponden a valores crecientes del preexponencial de la reacción de deterioro: $k_{01} = 0.5 \times 10^{14}$, $k_{02} = 1 \times 10^{14}$ y $k_{03} = 2 \times 10^{14}$ (en seg^{-1}), para el mismo sistema en estudio. Como se puede observar en la Figura 1, se obtuvieron curvas de forma sigmoidea características de las reacciones de primer orden.

Con el objeto de obtener curvas independientes del valor del preexponencial k_0 , se reescribió la ecuación (6) de la siguiente forma:

$$d \ln(y) = -k_0 \cdot \exp(-E_a / RT) dt \quad (8)$$

donde la variable "y" representa a la diferencia $(1 - x_A)$, es decir la fracción de nutrientes no destruidos.

Así, si se comparan las fracciones no destruidas "y₁" e "y₂" de dos expresiones cinéticas con igual energía de activación pero con distinto k_0 , para un dado proceso de secado, se pueden plantear dos ecuaciones semejantes a la (8):

$$d \ln(y_1) = -k_{01} \cdot \exp(-E_a / RT) dt \quad (9)$$

$$d \ln(y_2) = -k_{02} \cdot \exp(-E_a / RT) dt \quad (10)$$

Finalmente, efectuando el cociente de las expresiones (9) y (10) y reordenando, se obtiene:

$$(\ln y_1) / k_{01} = (\ln y_2) / k_{02} \quad (11)$$

Según la ecuación (11), el logaritmo de la fracción no destruida dividido por k_0 , es independiente del valor de k_0 . De esta manera, si se grafican las curvas A, B y C en términos de $-(\ln y) / k_0$ en función del tiempo, se obtiene una única curva, tal como se puede observar en la Figura 1 (curva D).

En la Figura 2, se representan los valores de $-(\ln y) / k_0$ versus tiempo, para el secado de placas a tres temperaturas distintas del aire: 40°, 50° y 60°C, suponiendo una energía de activación para la reacción de deterioro de 25 Kcal/mol.

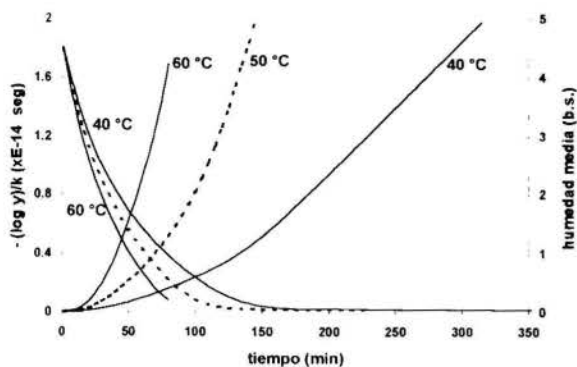


Figura 2 - Curvas de $-(\log y) / k_0$ y de contenido de humedad, durante el secado con aire de 40°, 50° and 60°C. Energía de activación para la reacción de deterioro: 25 Kcal/mol.

Durante la simulación del proceso de secado, se ha supuesto también un bajo valor de la humedad relativa del aire (4.5 %). Se puede observar en dicha figura un marcado aumento de la pérdida de nutrientes a medida que transcurre el tiempo. Además, se observa un gran incremento de las pérdidas a medida que se aumenta la temperatura del aire de secado, lo cual es de esperar, pues la energía de activación para el coeficiente de difusión que se encontró para el proceso de secado era de 5 Kcal/mol, valor muy inferior a las 25 Kcal/mol supuestas para la reacción de deterioro. Esto da como resultado un aumento mucho mayor de las reacciones de deterioro, en comparación con el aumento de la velocidad de secado.

A los efectos de poder realizar las comparaciones para iguales valores de la humedad del sólido, se representaron en el mismo gráfico las curvas de humedad del sólido versus tiempo, para las tres temperaturas del aire de secado. Se puede observar un incremento en las pérdidas de nutrientes a medida que aumenta la temperatura del aire de secado, para iguales valores de humedad residual.

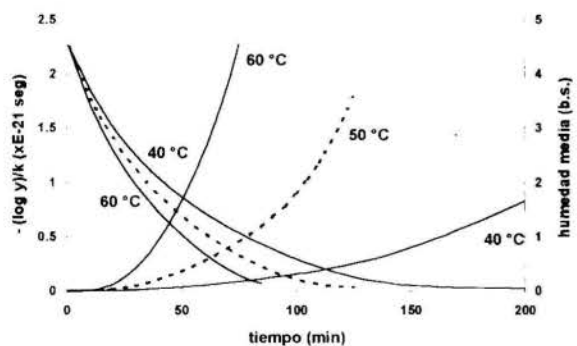


Figura 3 - Curvas de $-(\log y) / k_0$ y de humedad media, durante el secado con aire a 40°, 50° y 60°C. Energía de activación para la reacción de deterioro: 35 Kcal/mol.

El efecto de la energía de activación de la reacción de deterioro se puede observar comparando la Figura (2) con la Figura (3), obtenida con una energía de activación de 35 Kcal/mol. En dicha figura se han representado también las curvas de cinética de secado. Se puede observar nuevamente un incremento en las pérdidas de nutrientes a medida que aumenta la temperatura del aire de secado, para iguales valores de la humedad residual. Comparando ambas figuras, se observa que, para una dada temperatura de secado, la pérdida de nutrientes es menor al disminuir la energía de activación de la reacción de deterioro.

En la figura (4) se han representado los valores obtenidos de la simulación del proceso de secado, usando una energía de activación para la reacción de deterioro de 25 Kcal/mol, para tres temperaturas distintas del aire de secado 40°, 50° y 60 °C, pero utilizando en este caso aire de alta humedad relativa (30%).

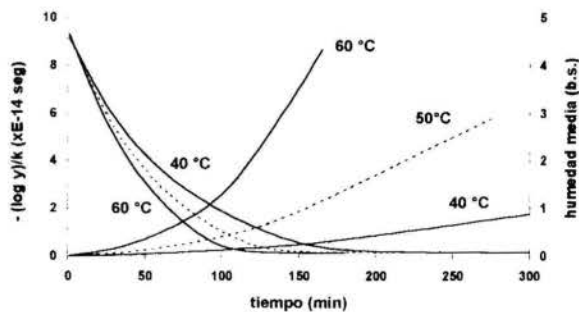


Figura 4 - Curvas de $-(\log y) / k_0$ y contenido de humedad, durante el secado con aire de alta humedad relativa (30%). Energía de activación para la reacción de deterioro: 25 Kcal/mol.

Si se comparan los valores de fracción de deterioro para un dado tiempo con los que aparecen en la Figura (1) se ve que son muy semejantes. Pero, si se hace la comparación para iguales valores de la humedad residual en el sólido, se puede ver que las pérdidas usando aire con alta humedad relativa son mayores, debido a que se tienen menores velocidades de secado, y por consiguiente mayores tiempos de secado para llegar a un dado valor de la humedad final del sólido.

Por último se analizó el efecto de la humedad inicial del sólido en la fracción de nutrientes retenidos. En la Figura (5) se presentan los resultados obtenidos por simulación utilizando placas de papa de dos contenidos iniciales de humedad diferentes, pero con un mismo valor del espesor inicial.

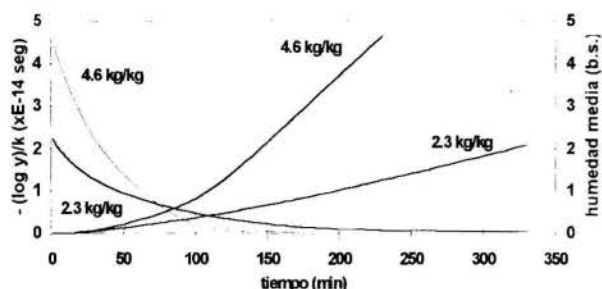


Figura 5 - Curvas de $-(\log y) / k_0$ y contenido de humedad para dos placas de diferente contenido de humedad inicial.

Nuevamente, se representan los valores de $-(\log y) / k_0$ junto con las correspondientes curvas de cinética de secado. Se puede observar que las pérdidas de nutrientes, para un dado valor de humedad final, son mayores para el caso de una menor humedad inicial. La razón de este comportamiento es que las placas con un menor contenido de humedad inicial evolucionan más rápidamente hacia la temperatura del aire de secado. En dichas muestras, la velocidad de secado es menor, debido a su mayor espesor seco, dado que la comparación se hace entre placas de igual espesor inicial.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos durante la simulación de pérdida de nutrientes, se pueden representar mediante curvas independientes del valor del preexponencial utilizado para la predicción. Dichos resultados indican un marcado aumento de las pérdidas de nutrientes a medida que transcurre el tiempo, debido al aumento de la temperatura de la muestra. Además para iguales valores de la humedad residual del sólido, se encontró un incremento en la pérdida de nutrientes al aumentar la temperatura del aire de secado y la humedad relativa del mismo, como así también al utilizar placas de menor contenido de humedad inicial. La resolución numérica se realizó para cinéticas de primer orden, pero puede hacerse sin dificultades para otros órdenes de reacción. Los resultados pueden ser de interés además para el estudio de otras reacciones de deterioro, tales como las de browning.

NOMENCLATURA

$A(t)$: área lateral de la muestra en función del tiempo, m^2
 A_0 : área lateral inicial de la muestra, m^2
 C_{ps} : calor específico del sólido seco, $J/(kg \text{ } ^\circ C)$
 C_{pw} : calor específico del agua, $J/(kg \text{ } ^\circ C)$
 D : coeficiente de difusión, m^2/s
 E_a : Energía de activación de la reacción de deterioro, J/mol
 h : coeficiente pelicular de transferencia de calor, $J/(s.m^2.^\circ C)$
 k : constante cinética de la reacción de deterioro, s^{-1}
 k_0 : preexponencial de la reacción de deterioro, s^{-1}
 k_g : coeficiente pelicular de transferencia de masa, $kg \text{ de agua}/(m^2.Pa.s)$

m_s : masa seca de la muestra, kg
 p_{vi} : presión de vapor de agua de equilibrio en la interfase del sólido, Pa
 p_{voo} : presión de vapor de agua en el seno del aire, Pa
 p_{bml} : presión de inerte media logarítmica, entre el seno del gas y la interfase, Pa
 R : constante de los gases, $J/(mol \text{ } K)$
 T : temperatura de la muestra, $^\circ C$
 T_0 : temperatura inicial de la muestra, $^\circ C$
 T_∞ : temperatura del seno del aire, $^\circ C$
 t : tiempo, s
 u : humedad de la muestra, en base seca, kg/kg
 \bar{u} : humedad media de la muestra, en base seca, kg/kg
 u_i : humedad de la interfase del sólido, base seca, kg/kg
 u_0 : humedad inicial de la muestra, base seca, kg/kg
 x_A : conversión de la reacción de deterioro
 z : coordenada adimensional medida a partir del centro de la lámina, $z = \xi/\xi_m$
 Z : variable definida en ec. (7)

Letras griegas:

λ : calor latente de vaporización, J/kg
 ρ_B : concentración de sólido seco por unidad de volumen, kg/m^3
 ξ : semiespesor seco instantáneo de la placa, m
 ξ_m : semiespesor seco máximo instantáneo de la placa, m
 ξ_0 : semiespesor seco inicial de la placa, m
 ρ_s : densidad esquelética del sólido totalmente seco, kg/m^3
 ρ_w : densidad del agua, kg/m^3

REFERENCIAS

- Aguerre, R.J., Suarez, C., Viollaz, P.E., 1986. "Enthalpy-Entropy compensation in sorption phenomena: application to the prediction of the effect of temperature on food isotherms" *J. Food Science*, Vol. 51(6), pp. 1547-1549.
- Banga, J. and Singh, R.P., 1994, "Optimization of air drying of foods", *J. of Food Engineering*, vol. 23, pp. 189-211.
- Mishkin, M., Saguy, I. Karel, M., 1984. "Optimization of nutrient retention during processing: Ascorbic acid in potato dehydration" *J. of Food Science*, vol. 49, pp. 1262-1266.
- Prausnitz, J.M., Eckert, C.A., Orye, R.V. and O'Connell, J.P., 1967, "Computer calculations for multicomponent vapor-liquid equilibria". Prentice Hall Int. Series in The Physical and Chemical Eng. Sci. Englewood Cliffs N.J. p 219.
- Rovedo, C.O., 1994, Transferencia simultánea de calor y materia en sistemas con cambio de volumen: aplicación al secado de placas de papa. PhD Thesis, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Argentina.
- Rovedo, C.O., Suarez, C., Viollaz, P.E., 1995. "Drying simulation of a solid slab with three dimensional shrinkage". *Drying Technology*, vol. 13, pp 371-393.
- Shakya, B., Moledina, K., Flink, J., 1986, "Dehydration of potato: 4. Influence of process parameters on ascorbic acid

retention for natural convection solar drying conditions". J. of Food Processing and Preservation, vol. 10, pp.145-159.

Sakai, Y., Watanabe, H. Takai, R., 1987. "A kinetic model for oxidation of ascorbic acid and beta-carotene", J. of Food Processing and Preservation, vol. 11, pp. 197-207.

Treybal, R.E., 1980, "Operaciones de Transferencia de Masa", 2da. Ed., McGraw-Hill Book Co.

Wang, N. and Brennan, J.G., 1992, "Thermal conductivity of potato as a function of moisture content". J. Food Engineering, vol 17, pp. 153-160.

SUMMARY

Nutrient loss during the air drying process is analyzed using a model for shrinking solids. Mass and energy balance equations are integrated numerically, using convective boundary conditions, for different drying temperatures. Nutrient loss was determined, as a function of time, for different values of activation energy, initial moisture content and relative humidity of the air, using the thermophysical and thermodynamical data for potato drying.



EXTRACCION DE ACEITE DE GIRASOL USANDO CO₂ SUPERCRITICO

Ambrogi, A. ⁽¹⁾; Mattea, M. ⁽¹⁾; Eggers, R. ⁽²⁾

(1) Departamento de Tecnología Química
Universidad Nacional de Río Cuarto
5800 - Río Cuarto - Córdoba - Argentina

(2) Verfahrenstechnik II
Technische Universität Harburg-Hamburg
D-2100 Hamburg 90 - Deutschland



Oil extraction from sunflower seeds using supercritical carbon dioxide (SC-CO₂) was tested in a laboratory scale. The influence of different parameters and oilseed pretreatment on mass transfer kinetics was analyzed. Best results were obtained with flaked seeds working at 70 MPa and 80 °C during the extraction. Solubilities have been calculated from linear portions of extraction curves. Differences on operating parameters influence on extraction kinetics were observed with hulled and dehulled seeds. A model to fit experimental data was formulated. It takes into account mass transfer resistance in both, solvent and solid phase.

INTRODUCCION

El uso del dióxido de carbono como solvente para la extracción de sustancias naturales ha sido motivo de numerosos estudios durante las últimas dos décadas (King & Bott, 1993; Brunner, 1994), en particular debido al carácter inocuo del CO₂ y la facilidad con la cual se lo puede separar de los productos obtenidos. Se presenta como una alternativa al hexano, solvente orgánico universalmente utilizado en la obtención de aceites vegetales, el cual posee cierta toxicidad y problemas de explosividad. Esto ha motivado el desarrollo de frecuentes estudios relativos al comportamiento del CO₂ utilizado como solvente para la extracción de aceites de origen vegetal (ver Brunner, 1994; Stahl et al., 1984), tratando de valorar las ventajas y desventajas de su uso.

Dentro de las primeras se destaca la facilidad con la que el CO₂ es separado tanto del aceite como de la harina una vez que éste ha sido extraído; las etapas de destilación y desolventización del proceso convencional aplicado actualmente en la industria son reemplazados por etapas de descompresión permitiendo al CO₂ recuperar su estado gaseoso y dejar rápidamente al líquido y sólido. Se han observado además, mejoras en la calidad del aceite extraído, especialmente en lo referido a la disminución en el contenido de fosfátidos, lo cual favorece el posterior refinamiento (Friederich & List, 1982). Por el contrario, la extracción de aceites vegetales con CO₂ requiere utilizar presiones elevadas para obtener valores adecuados de solubilidad. Resultados obtenidos con aceite de soja (Quirin, 1982) muestran que a 70 MPa y 80°C, la solubilidad alcanza el valor de 0.08. El empleo de altas presiones exige el uso de equipamiento de alto costo, los requerimientos energéticos son mas altos respecto de la extracción convencional (Eggers y Sievers, 1989) y dificulta el procesamiento continuo de semillas. Este último aspecto aún no ha podido ser resuelto (Eggers, 1981).

Favati et al. (1994) han estudiado la extracción de aceite de girasol. Sus resultados arrojan valores de solubilidad y cinéticas de extracción considerablemente mas altos que los obtenidos para el caso de otras semillas [Quirin, 1982; Stahl et al., 1980].

Por otro lado, diferentes modelos matemáticos han sido propuestos para tratar de representar el proceso de extracción a partir de semillas vegetales [Sovova, 1994; Catchpole et al., 1994; Goto et al., 1994; Brunner, 1994; Lee et al., 1986].

Dichos modelos son construidos a partir de las ecuaciones de balance de masa para cada una de las fases que participan del proceso y difieren fundamentalmente en la forma de evaluar el flujo de soluto, aceite en este caso, que deja la partícula sólida hacia la fase fluida.

En el presente trabajo se presentan resultados experimentales obtenidos durante la extracción de aceite de girasol utilizando CO₂ en condiciones supercríticas. Se estudia el efecto de la presión y temperatura sobre el proceso de extracción en muestras de semillas sometidas a diferentes pre-tratamientos. Se calculan valores de solubilidad del aceite obtenidos a partir de las curvas de extracción.

Se presenta además, un modelo matemático que permite seguir el proceso de extracción a partir del planteo y solución de las ecuaciones de balance de masa para cada una de las fases involucradas.

TRANSFERENCIA DE MASA

Materiales y métodos

Las experiencias tendientes a determinar la influencia de la presión, temperatura y pre-tratamiento sobre la cinética de transferencia de masa durante la extracción se llevaron a cabo en las instalaciones existentes en la Technische Universität Harburg-Hamburg. El equipamiento utilizado en la experiencia se indica esquemáticamente en la Figura 1.

La metodología empleada en cada ensayo es la que se describe a continuación:

- La muestra sólida a extraer se coloca en una canasta dentro del extractor (E1).
- El CO₂ se introduce al extractor mediante la bomba P1, previo paso a través el intercambiador de calor H1 para llevar el solvente a la temperatura de extracción.
- Una vez alcanzada la presión de extracción, la válvula V3 se abre en forma manual hasta que la presión en todo el sistema alcanza el valor de régimen. Luego el sistema es controlado automáticamente.
- El CO₂ con el aceite disuelto, proveniente del extractor, pasa a través de la válvula VA con el fin de reducir su presión a

la del separador (S2). Este proceso de descompresión brusca requiere de un aporte de energía para mantener la temperatura del fluido en el valor seleccionado para el separador S2. Ello se hace mediante el intercambiador de calor H2.

- Las condiciones de presión y temperatura establecidas en el separador S2 aseguran que la solubilidad del aceite en el CO₂ es despreciable. Por tal motivo, el aceite arrastrado por el solvente precipita y se recoge a intervalos regulares de tiempo, en el fondo de S2.
- El CO₂, libre de aceite, abandona el separador por la parte superior y se introduce nuevamente al extractor a través de la bomba P1. El flujo de CO₂ se determina con el medidor de flujo másico acumulativo FI.
- Al finalizar la experiencia, la bomba se detiene, la presión en el sistema se alivia totalmente y la muestra se extrae del extractor.

Todas las temperaturas, presiones y flujos se registraron en una PC conectada al sistema.

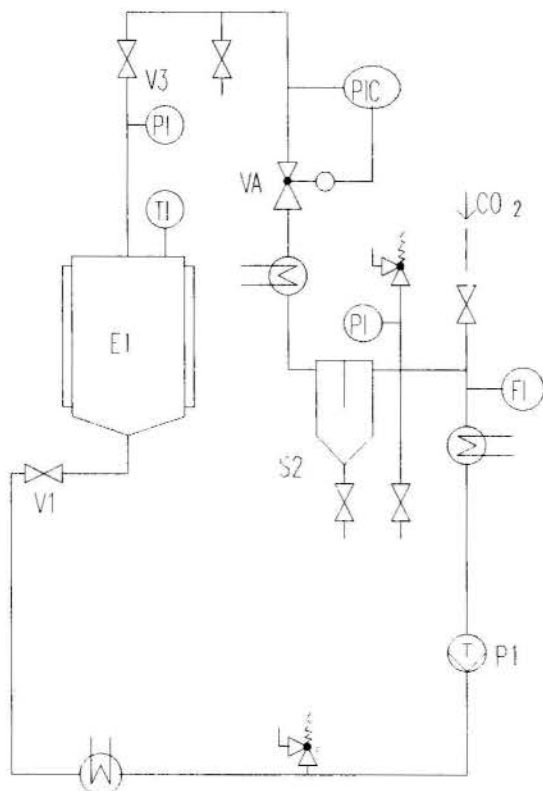


Figura 1: Esquema del equipamiento utilizado

Las condiciones generales mantenidas durante las experiencias son:

Fujo CO₂: 6 - 7 Kg / h

Presión en el extractor : 50 y 70 MPa

Temperatura en el extractor : 60 y 80 °C

Presión en el separador : 6.5 - 7.0 MPa

Temperatura en el separador : 60 - 70 °C

Volumen del extractor : 1.3 l

Vol. real de extracción : 0.2 l

Peso de las muestras : 58 - 60 g, excepto en UDHP (82 g)

Las muestras a extraer, se obtuvieron a partir de semillas de girasol sometidas a distintos pre-tratamientos, los cuales se indican a continuación:

- Descascarado y laminado (DHF)
- Descascarado y molido (DHM)
- Con cáscara y molido (UDHM)
- Con cáscara, prensado y luego molido (UDHP)

En la Tabla I se indican los valores de humedad, densidad y contenido de grasa inicial para cada material. Este último fue determinado según las normas AOCS (Ai 3-75).

Tabla I - Composición de las muestras extraídas

material	humedad (%)	grasa (%)	ρ_s (Kg/m ³)	ρ_b (Kg/m ³)
DHF	5.4	54.5	1110,6	361,28
DHM	5,4	54,5	1095,8	416,06
UDHM	6,1	37,4	1216,8	368,51
UDHP	7,5	11,15	(*)	(*)

(*) no determinado

Efecto del pre-tratamiento

En la Figura 2 se muestran las curvas de extracción, i.e masa de aceite extraído vs. masa de solvente utilizado, para las muestras DHF y DHM bajo las mismas condiciones de presión y temperatura. Como se observa, en el comienzo de la extracción las curvas presentan una porción lineal. Durante este período, la cantidad de aceite recuperada es solamente limitada por su solubilidad en CO₂ bajo las condiciones de operación (Eggers y Sievers, 1989). El comportamiento lineal es mas prolongado en el caso del DHF como consecuencia de una destrucción celular mas intensa, dejando una mayor cantidad de aceite facilmente accesible al solvente.

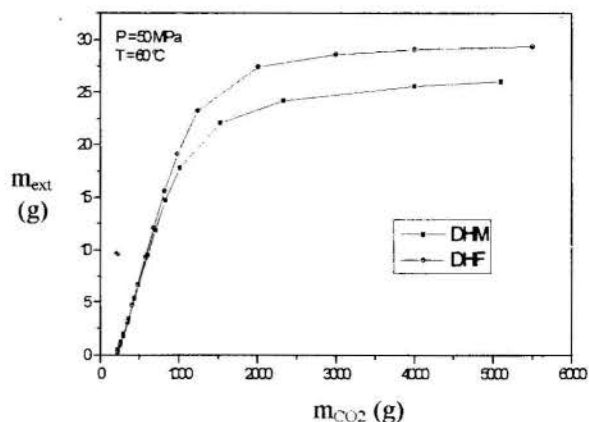


Figura 2: Extracción de las muestras DHF y DHM

La Figura 3 muestra las curvas de extracción para el material DHF y las muestras con cáscara (UDHM y UDHP). La masa de extracto estan referidas a la masa inicial ($m_{ext,0}$) para poder compararlas. Se observa de estos resultados que el material prensado presenta un mejor comportamiento frente a la extracción que el UDHM, ello como consecuencia de una mayor

destrucción celular lo que acelera el proceso difusivo a través de la estructura sólida.

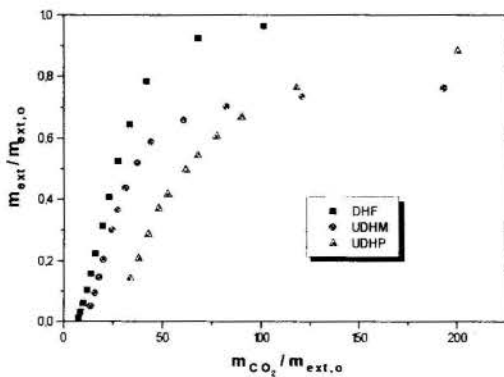


Figura 3: Extracción de muestras DHF, UDHM y UDHP.

Efectos de la presión y la temperatura.

Las muestras DHF y UDHM fueron extraídas a presiones de 50 y 70 MPa y temperaturas de 60 y 80 °C

En la figura 4 se presentan los resultados obtenidos para el caso de la muestra DHF. Las pendientes correspondientes a las porciones lineales de las curvas se hallan más juntas a 50 que a 70 MPa, lo cual demuestra que el efecto de la temperatura sobre la solubilidad del aceite en CO₂ es mayor a medida que la presión aumenta. En todos los casos aquí estudiados, la solubilidad aumenta con la temperatura. Resultados similares fueron informados para aceite de soja (Quirin, 1982)

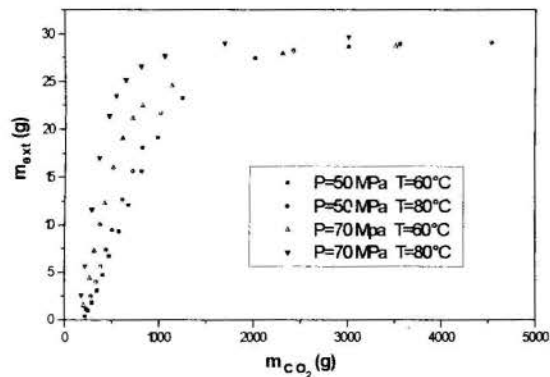


Figura 4: Efecto de la temperatura y presión Muestra DHF

La figura 5 muestra las curvas de extracción para el material UDHM. Se observa un comportamiento diferente al explicado anteriormente; el efecto de la presión sobre la solubilidad del aceite no es tan pronunciado como el que se muestra en la Figura 4. Esta diferencia tiene su origen en las distintas composiciones de las muestras extraídas, producto de la presencia de la cáscara en la UDHM. Como es conocido, la cáscara de la semilla de girasol es rica en ceras (Rivarola et al., 1990), las cuales son extraídas junto con el aceite. La solubilidad de dichas ceras en CO₂ es fuertemente dependiente de la temperatura en el rango de presiones aquí analizado, tal lo determinado por Stahl et al. (1987) para ceras provenientes de la soja. Cuando se extraen semillas con cáscara (UDHM), tanto

triglicéridos (aceite) como ceras son extraídas y por lo tanto las curvas reflejan la extracción de ambos componentes. Se espera que resultados similares se obtengan en los casos de DHM y UDHP (sin y con cáscara respectivamente), lo cual será verificado experimentalmente.

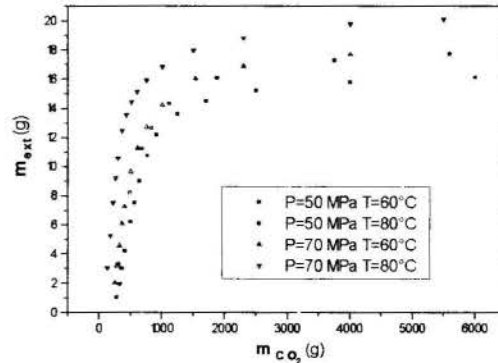


Figura 5: Efecto de la Temperatura y presión Muestra UDHM

Solubilidad.

Una regresión lineal fue realizada para ajustar los valores obtenidos en la parte lineal de la curva correspondiente a la muestra DHF. No menos de 5 puntos fueron tomados en cuenta, provenientes de *n* ensayos bajo las mismas condiciones. El coeficiente de correlación en todos los casos fue mayor a 0.99. Las pendientes de las rectas correspondientes a distintas condiciones operativas fueron calculadas y tomadas como el valor de solubilidad en cada caso. En la Figura 6 se muestran los resultados obtenidos con aquellos informados previamente para aceite de soja (Quirin, 1982)

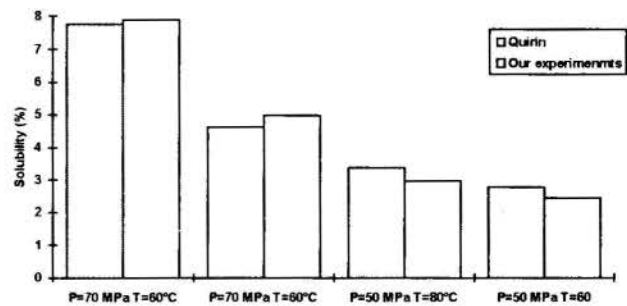


Figura 6: Valores de solubilidad

MODELADO DEL PROCESO DE EXTRACCION

Con el fin de obtener una representación del proceso de extracción, se plantea a continuación la aplicación de un modelo uni-dimensional, en estado no estacionario con dispersión axial, basado en el desarrollo propuesto por Sovová (1994).

Durante la extracción se distinguen dos períodos. Inicialmente, el aceite liberado por la ruptura de las células es disuelto en el CO₂ (período 1). Este proceso es controlado por la difusión del soluto en el solvente y ocurre rápidamente teniendo en cuenta los altos valores de difusividades en fluidos supercríticos. Una vez que este aceite es agotado, se produce una extracción muy lenta del soluto contenido en la estructura

celular original, controlada por la difusión del aceite a través de la membrana celular (período 2).

El modelo resulta de plantear las ecuaciones de balance de masa para la fase fluida (solvente) y sólida (partículas):

$$\text{fase fluida} \quad \rho \varepsilon \frac{\partial Y}{\partial t} + \rho u_o \frac{\partial Y}{\partial z} = \rho \varepsilon D_z \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} + J \quad (1)$$

$$\text{fase sólida} \quad \rho_s (1-\varepsilon) \frac{\partial X}{\partial t} = -J \quad (2)$$

sujetas a las siguientes condiciones de borde e iniciales:

$$X(z,t=0) = X_o \quad ; \quad Y(z,t=0) = Y^* \quad ; \quad Y(z=0,t) = 0 \quad (3)$$

En este trabajo se propone la siguiente expresión para evaluar el flujo de aceite que deja la fase sólida hacia la fase fluida (término J en las ecuaciones anteriores), teniendo en cuenta la existencia de los dos periodos ya mencionados:

$$\text{período 1:} \quad J = k_f a \rho (Y^* - Y) \quad ; \quad X \geq X_k \quad (4)$$

$$\text{período 2:} \quad J = k_s a \rho_s (Y^* - Y) \left(\frac{X}{X_k} \right) \quad ; \quad X < X_k \quad (5)$$

Usando las variables adimensionales:

$$\zeta = \frac{z}{H} \quad ; \quad \tau = \frac{t u_o}{\varepsilon H} \quad ; \quad y = \left(1 - \frac{Y}{Y^*} \right) \quad ; \quad x = \frac{X}{X_k} \quad (6)$$

las Eqs (1)-(3), combinadas con las Eqs (5)-(6), dan lugar a:

Período 1 ($x \geq 1$):

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} + \frac{\partial y}{\partial \zeta} = \left(\frac{\varepsilon D_z}{u_o H} \right) \frac{\partial^2 y}{\partial \zeta^2} - \left(\frac{k_f a H}{u_o} \right) y \quad (7)$$

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = - \left(\frac{k_f a H}{u_o} \right) \left(\frac{\rho \varepsilon Y^*}{\rho_s (1-\varepsilon) X_k} \right) y \quad (8)$$

Período 2 ($x < 1$):

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} + \frac{\partial y}{\partial \zeta} = \left(\frac{\varepsilon D_z}{u_o H} \right) \frac{\partial^2 y}{\partial \zeta^2} - \left(\frac{k_s a H}{u_o} \right) \left(\frac{\rho_s}{\rho} \right) y \quad (9)$$

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = - \left(\frac{k_s a H}{u_o} \right) \left(\frac{\varepsilon Y^*}{(1-\varepsilon) X_k} \right) y \quad (10)$$

con las siguientes condiciones:

$$x(\zeta, \tau=0) = x_o \quad ; \quad y(\zeta, \tau=0) = 0 \quad ; \quad y(\zeta=0, \tau) = 1 \quad (11)$$

La cantidad de soluto extraído por unidad de masa de sólido, e, durante la extracción se evalúa según la siguiente expresión:

$$e = X_o - X_k \int_0^1 x(\zeta, \tau) d\zeta \quad (12)$$

Las ecuaciones (7)-(11) fueron resueltas aplicando el método de diferencias finitas (Hofman, 1993). La integración indicada en la Eq. (12) se realizó en forma numérica usando el método de Simpson. Los términos ($k_f a$), ($k_s a$) y X_k son parámetros del modelo, cuyos valores fueron ajustados con los datos experimentales. En la Figura 7 se muestran los resultados obtenidos para las muestras DIII' y DIIM.

NOMENCLATURA

- a área interfasial específica, m^{-1}
- D_z coeficiente de dispersión axial, $m^2 s^{-1}$
- H altura de la muestra a extraer, m
- J flujo de soluto desde la fase sólida a la fluida, $kg m^{-3} s^{-1}$
- k_f coeficiente de transferencia de masa en la fase fluida, ms^{-1}
- k_s coeficiente de transferencia de masa en la fase sólida, ms^{-1}
- m masa, kg
- P presión, Pa
- t tiempo, s
- T temperatura, °C
- u_o velocidad superficial del solvente, ms^{-1}
- x concentración en la fase sólida, adimensional. Eq (6)
- X concentración en la fase sólida (base: sólido libre de soluto)
- X_k concentración de soluto fácilmente accesible en la fase sólida (base: sólido libre de soluto)
- y concentración en la fase fluida, adimensional. Eq (6)
- Y concentración en la fase fluida (base: solvente libre de soluto)
- Y^* solubilidad
- z coordenada espacial, m
- τ tiempo adimensional. Eq (6)
- ρ densidad del fluido, $kg m^{-3}$
- ρ_s densidad del sólido, $kg m^{-3}$
- ρ_b densidad del lecho, $kg m^{-3}$
- ε porosidad del lecho
- ζ coordenada espacial adimensional. Eq (6)

REFERENCIAS

- 1- Brunner G., 1994, "Gas extraction", Springer, New York
- 2- Catchpole O.J., Andrews E.W., Toikka G.N. & Wilkinson G.T., 1994, "Mathematical models for the extraction of oils from plant matrices using a near-critical solvent", 3rd. Symposium on Supercritical Fluids, Strasburg.
- 2- Eggers, R. und U.J. Sievers, 1989, "Processing of oilseed with supercritical carbon dioxide", J. Chem. Eng. Japan; **22**(6):641-649
- 3- Eggers R., 1981, Chem.-Ing.-Tech., **53**:551
- 4- Favatti F., R. Fiorentini & V. de Vitis, 1994, "Supercritical fluid extraction of sunflower oil: extraction dynamics and process optimization", 3rd. Symposium on Supercritical Fluids, Strasburg.
- 5- Friederich, J. P. and List, G. R.: J. Agric. Food Chem.; **30**, 192; 1982.
- 6- Goto M., B.C. Roy, Y. Nomura & T. Hirose, 1994, "Kinetic studies of supercritical fluid extraction from natural solid materials", 3rd. Symposium on Supercritical Fluids, Strasburg.
- 7- Hoffman J.D., 1992, "Numerical methods for engineers and scientists", McGraw-Hill
- 8- King M.B & Bott T.R., 1993, "Extraction of natural

- products using near critical solvents*", Blackie Academic & Professional, Glasgow
- 9- Lee A.K.K, N.R.T.Bulley, M.Fattori & A. Meisen, 1986, "Modelling of supercritical carbon dioxide extraction of canola oilseed in fixed beds", *JAOCS*, **63**(7):921-925
 - 10- List G.R., J.P. Friedrich & D.D. Christianson, 1984, "Properties and processing of corn oil obtained by extraction by supercritical carbon dioxide", *JAOCS*, **61**(12): 1849-1851
 - 11- Quirin K.W., 1982, *Fette-Seifen Anstrichmittel*; **84**, 460
 - 12- Sovová H., 1994, "Rate of the vegetable oil extraction with supercritical CO₂ - I. Modelling of extraction curves", *Chem. Eng. Sci.*, **49**(3):409-414
 - 13- Sthal, Quirin und Gerard: "*Dense Gases for Extraction and Refining* "; Springer-Verlag: 1987.
 - 14- Stahl E., E. Schutz & H. Mangold, 1980, "Extraction of seed oils with liquid and supercritical carbon dioxide", *J. Agric. Food Chem.*, **28**:1153-1157



VARIACION DE LAS CONCENTRACIONES PUNTUALES Y PROMEDIO DE ACIDO LACTICO Y NaCl DURANTE EL PROCESO DE SALADO DE QUESO PATEGRAS



Patricia E. Gerla* y Amelia C. Rubiolo**

* Instituto de Ingeniería Química, Universidad de la República-CSIC, 1300, Montevideo, Uruguay. ** Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, Universidad Nacional del Litoral-CONICET, 3000, Santa Fe, Argentina.

SUMARIO

Utilizando modelos de transporte difusivo de materia, se obtuvieron ecuaciones para la predicción de las concentraciones de ácido láctico, NaCl y agua durante el salado de quesos. Las concentraciones puntuales experimentales y calculadas, a las 12 horas, con un modelo ternario dan una desviación de 2,8% para el ácido láctico, 4% para el NaCl y 4,6% para el agua, mientras que con un modelo pseudobinario resultan desviaciones de 119%, 8,7% y 5,7% respectivamente. En el cálculo de las concentraciones promedio las desviaciones fueron inferiores al 5% con ambos modelos, debido a que la variación en los gradientes de concentración es pequeña. El modelo ternario permitió una mejor evaluación del proceso y puede ser aplicado a otros sistemas similares.

INTRODUCCION

El proceso de salado por inmersión en salmuera es una etapa de la elaboración del queso durante la que se producen variaciones importantes en las concentraciones de agua y sal (NaCl) y en el pH que han sido vinculados con cambios fisicoquímicos y microbiológicos determinantes de la calidad del producto (Fox, 1987). Durante este proceso, además de la reducción de la actividad de agua e ingreso de NaCl en el queso, se modifica la concentración de ácido láctico, lo que presenta particular interés por su influencia en el desarrollo de procesos bioquímicos del producto.

El pH de los quesos recién elaborados es considerado un indicador de la producción de ácido láctico y las variaciones más importantes en su concentración ocurren en las etapas de formación del queso (coagulación y prensado de la cuajada) y en el salado por inmersión (Thomas y Pearce, 1981, Lawrence y Gilles, 1982).

Durante las etapas de formación del queso Pategras, este ácido se produce por reacción homofermentativa de los azúcares presente en la masa sólida proveniente de la hidrólisis de la lactosa. Estas reacciones se completan hacia el final de la etapa de prensado previa al salado por lo que se incrementa la concentración de ácido láctico en el queso hasta la etapa de inmersión en salmuera (Gerla, 1994). La concentración de ácido láctico en el queso es relativamente baja (aproximadamente 1% p/p), por lo que no se considera normalmente durante el proceso de salado para la determinación de la concentración de NaCl que sufre los mayores cambios conjuntamente con el agua (Geurts et al., 1980; Luna and Bressan, 1986; Turhan and Kaletunç, 1992). Sin embargo, existe evidencia de que la concentración de este ácido se modifica durante el salado, tanto por el decrecimiento de su concentración en el queso entre el inicio y el final de este proceso (Lawrence y Gilles, 1982) como por su aparición en la salmuera (Yaigin, 1979) y que el transporte de este ácido es mayor al correspondiente a su concentración (Chu et al., 1992; Gerla, 1994).

Nuestro objetivo fue el desarrollo de ecuaciones predictivas de las concentraciones de ácido láctico, NaCl y agua en el queso Pategras, que representen los cambios simultáneos de la concentración de cada soluto en función del tiempo de salado y otros procesos de elaboración de quesos y alimentos que presentan variaciones de concentración de más de un soluto.

TEORIA

Modelo ternario. El queso se considera como un sólido constituido por una matriz proteica que ocluye una solución acuosa, en la que ocurre el transporte de los solutos (ácido láctico, NaCl) y del solvente (agua) bajo gradientes de concentración entre un sólido y la solución de inmersión. La tortuosidad y porosidad de la matriz proteica introduce dificultad para la difusión de los solutos en la solución ocluida pero que se incluyen en el denominado coeficiente de difusión efectivo a fin de considerar un sólido homogéneo e isotrópico. Se considera la difusión de varios solutos (ácido láctico, NaCl y agua), en un sólido (queso), de densidad y volumen constante, sumergido en una solución concentrada bien agitada, despreciable la resistencia a la transferencia convectiva de materia entre el queso y la solución de inmersión (Cussler, 1976) y con condiciones de equilibrio en la interfase queso-salmuera, por lo que los flujos máscicos unidireccionales de los solutos en el queso (Crank, 1975; Schwartzberg and Chao, 1982) son:

$$J_i = - \sum_{j=1}^2 D_{ij} \nabla x_j \quad i=1,2 \quad (1)$$

La Ec.(1) es la expresión de los flujos según la forma generalizada de la segunda ley de Fick para un sistema ternario, donde J_i es el flujo del soluto i , ∇x_i es el gradiente de concentraciones del mismo soluto y los coeficientes son constantes e independientes de las concentraciones (x_1 , x_2) de los solutos presentes en el sistema, siendo D_{ii} los coeficientes de difusión efectivos propios y D_{ij} los coeficientes efectivos cruzados o de interacción entre solutos. La variación de los flujos utilizando la Ec. (1) para las condiciones indicadas es:

$$\partial x_i / \partial \theta = \sum_{j=1}^2 D_{ij} \partial^2 x_j / \partial r^2 \quad -L < r < L, \quad \theta > 0, \quad i=1,2 \quad (2)$$

que es válida para difusión unidireccional según r , en una placa plana que ocupa el espacio comprendido entre $-L < r < L$ con las condiciones iniciales y de contorno:

$$x_i = x_{i0} \quad -L < r < L, \quad \theta = 0, \quad i=1,2 \quad (3)$$

$$x_i = x_{i\infty} \quad r = \pm L, \quad \theta > 0, \quad i=1,2 \quad (4)$$

donde x_{i0} y $x_{i\infty}$ son las concentraciones del soluto i en condiciones

iniciales y de equilibrio respectivamente. La Ec. (2) constituye un sistema de ecuaciones diferenciales parciales que pueden ser desacoplado por una transformación similar, utilizando el método de autovalores y autovectores desarrollado por Toor (1964) y resuelto en las variables transformadas como un conjunto de dos problemas binarios, realizándose luego de obtenidas las soluciones su antitransformación para expresarlas en las variables originales (Gerla, 1994).

Concentraciones puntuales. La solución de la Ec. (2) con las condiciones Ecs. (3) y (4) en las variables originales es:

$$\frac{x_i - x_{i_0}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} = a_i \left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \operatorname{erfc} \frac{nL-r}{2\sqrt{\lambda_i \theta}} \operatorname{erfc} \frac{(n-1)L+r}{2\sqrt{\lambda_i \theta}} \right] + (1-a_i) \left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \operatorname{erfc} \frac{nL-r}{2\sqrt{\lambda_j \theta}} + \operatorname{erfc} \frac{(n-1)L+r}{2\sqrt{\lambda_j \theta}} \right] \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (5)$$

que resulta simétrica respecto a $r=0$ y donde los parámetros a_i y κ_{ji} están definidos por:

$$a_i = \frac{D_{ii} - \lambda_j + \kappa_{ji} D_{ij}}{\lambda_i - \lambda_j} \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (6)$$

$$\kappa_{ji} = \frac{x_{j_0} - x_{j_\infty}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (7)$$

y λ_1, λ_2 son las raíces de la ecuación de la matriz de diagonalización:

$$(D_{11} - \lambda_i)(D_{22} - \lambda_i) - D_{11} D_{22} = 0 \quad i=1,2 \quad (8)$$

La expresión teórica para el cálculo de las concentraciones del solvente (x_3) que se obtiene mediante el balance de materia del sistema de volumen y densidad constante y utilizando las concentraciones de los solutos dadas por la Ec. (5), es:

$$\frac{x_3 - x_{3_0}}{x_{3_0} - x_{3_\infty}} = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{x_i - x_{i_0}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} \frac{1}{(1 + \kappa_{ji})} \right] \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (9)$$

Las Ecs. (5) y (9) constituyen un modelo para el cálculo de las concentraciones puntuales de cada soluto y el solvente a cualquier tiempo de inmersión y posición en el sólido, sujeto a flujos unidireccionales. Sin embargo la determinación de los valores experimentales de las concentraciones no resulta posible y las mismas deben ser realizadas en elementos del volumen del sólido, obteniéndose valores experimentales promedio de las concentraciones en fracciones de espesor ΔL del volumen total, localizadas a determinada distancia de la superficie del sólido según la dirección de difusión. Por consiguiente para obtener una ecuación que permita calcular valores teóricos que se puedan comparar con los valores de la muestras experimentales, se integra en un elemento de volumen de espesor ΔL situado a una distancia r del centro del sólido en la dirección de difusión, según:

$$\frac{x_i - x_{i_0}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} \Big|_{r,r-\Delta L} = \frac{1}{\Delta L} \int_{r-\Delta L}^r \frac{x_i - x_{i_0}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} dr \quad i=1,2,3 \quad (10)$$

donde para los solutos ($i=1,2$) el integrando está dado por la Ec. (5) y por la Ec. (9) para el caso del solvente ($i=3$), resultando:

$$\frac{x_i - x_{i_0}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} \Big|_{r,r-\Delta L} = a_i \left[2 \frac{\sqrt{\lambda_i \theta}}{\Delta L} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \varphi_{n,r} \right] + (1-a_i) \left[2 \frac{\sqrt{\lambda_j \theta}}{\Delta L} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \varphi_{n,r} \right] \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (11)$$

$$\frac{x_3 - x_{3_0}}{x_{3_0} - x_{3_\infty}} \Big|_{r,r-\Delta L} = \sum_{i=1}^2 \left[\left[a_i \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \varphi_{n,r} \right] \frac{1}{1 + \kappa_{ji}} \right] \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (12)$$

donde:

$$\varphi_{n,r} = \operatorname{ierfc} \left(\frac{nL-r}{2\sqrt{\lambda_i \theta}} \right) - \operatorname{ierfc} \left(\frac{nL-(r-\Delta L)}{2\sqrt{\lambda_i \theta}} \right) - \operatorname{ierfc} \left(\frac{(n-1)L+r}{2\sqrt{\lambda_i \theta}} \right) + \operatorname{ierfc} \left(\frac{(n-1)L+(r-\Delta L)}{2\sqrt{\lambda_i \theta}} \right) \quad i=1,2 \quad (13)$$

Las Ec. (11) a (13) obtenidas por Zorrilla y Rubiolo (1995) son la forma explícita de las ecuaciones predictivas del valor teórico de las concentraciones promedio en cada elemento de volumen situado a distintas posiciones relativas a la interfase sólido-líquido en función del tiempo de inmersión.

Concentraciones promedio. Para calcular las concentraciones teóricas promedio de cada soluto y del solvente en todo el sólido, sujeto a flujos unidireccionales, se integra la Ec. (10) en todo el semiespesor del sólido ($r-\Delta L=0$) con las Ecs. (5) y (9) como integrandos para los solutos y el solvente respectivamente, resultando las siguientes expresiones para tiempos moderadamente cortos (Schwartzberg and Chao, 1982):

$$\frac{x_i - x_{i_0}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} = a_i \left(1 - \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\lambda_i \theta}{\pi}} \right) + (1-a_i) \left(1 - \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\lambda_j \theta}{\pi}} \right) \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (14)$$

$$\frac{x_3 - x_{3_0}}{x_{3_0} - x_{3_\infty}} = \sum_{i=1}^2 \left[\left[a_i \left(1 - \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\lambda_i \theta}{\pi}} \right) + (1-a_i) \left(1 - \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\lambda_j \theta}{\pi}} \right) \right] \frac{1}{1 + \kappa_{ji}} \right] \quad i,j=1,2 ; i \neq j \quad (15)$$

Para ampliar las soluciones unidimensionales de las concentraciones teóricas promedio Ecs. (14) y (15) a los casos de sólidos sometidos a flujos bi o tridimensionales, el modelo matemático se formula bajo idénticas condiciones y supuestos que los establecidos en las Ec. (1) a Ec. (4), pero considerando que el sólido es un paralelepípedo rectangular, homogéneo e isotrópico, cuyas dimensiones, ($2L_1, 2L_2, 2L_3$), según los tres ejes coordenados (z_1, z_2, z_3) son del mismo orden y en el cual la concentración de solutos cambia según las tres direcciones.

La transformación similar utilizada para linealizar el problema ternario unidimensional, es válida independientemente de que el proceso difusivo sea uni, bi o tridimensional. Para la geometría prismática regular de base cuadrada que tiene el queso estudiado, la solución para las concentraciones promedio de los solutos en el sólido puede obtenerse como el producto de las tres soluciones desacopladas en la variable transformada, para placas planas infinitas de semiespesores $L_1, L_2 = L_3$, tales que su intersección define la geometría y dimensiones del sólido (Carslaw, H. & Jaeger, J., 1959; Bressan, J. et al. 1981; Schwartzberg, H. y Chao, R., 1982). La ecuación que resulta de realizar estas operaciones y antitransformar para obtener la expresión en las variables originales

que son las concentraciones promedio de cada soluto es:

$$\frac{\bar{x}_i - x_{i_0}}{x_{i_0} - x_{i_\infty}} = a_i \left(1 - \frac{2}{L_1} \sqrt{\frac{\lambda_i \theta}{\pi}}\right) \left(1 - \frac{2}{L_2} \sqrt{\frac{\lambda_i \theta}{\pi}}\right)^2 + (1 - a_i) \left(1 - \frac{2}{L_1} \sqrt{\frac{\lambda_j \theta}{\pi}}\right) \left(1 - \frac{2}{L_2} \sqrt{\frac{\lambda_j \theta}{\pi}}\right)^2 \quad i, j = 1, 2; i \neq j \quad (16)$$

y para el solvente resulta de aplicar la sumatoria de esta ecuación para los compuestos 1 y 2 como se indica en la Ec (9).

Como caso particular, para una sección transversal interior de la barra de queso que puede considerarse sometida a flujos bidimensionales, la solución del problema para esa zona del queso se reduce al caso de difusión bidimensional en un prisma de base cuadrada ($L_2=L_3$) y altura infinita, sujeto a las mismas condiciones iniciales y de contorno, resultando la Ec. (16) eliminando el termino para L_1 .

Modelo pseudo binario. Cuando se utiliza este modelo para la descripción de fenómeno de transporte de los dos solutos y el solvente en el sistema, se considera que cada soluto difunde exclusivamente bajo su propio gradiente asociado a un coeficiente de difusión efectivo pseudo binario, D_{ipb} , que además del efecto de la matriz sólida engloba los efectos de las interacciones debida a la existencia de flujos de otros solutos presentes en el sistema. En la medida en que estas interacciones sean importantes el coeficiente pseudo binario diferirá de aquel que el soluto tendría en ausencia de los otros solutos presentes en el sistema. Las siguientes ecuaciones representan el flujo y el transporte de materia en el sistema considerado como pseudo binario:

$$J_i = -D_{ipb} \nabla x_i \quad i=1, 2 \quad (17)$$

$$\partial x_i / \partial t = D_{ipb} \partial^2 x_i / \partial r^2 \quad -L < r < L, \quad \theta > 0, \quad i=1, 2 \quad (18)$$

La Ec. (18) es válida en las mismas condiciones que la Ec. (2) y está sujeta a las condiciones dadas por las Ec. (3) y (4). Este problema ya ha sido resuelto dado que resulta formalmente igual a las ecuaciones para el modelo ternario en las variables transformadas. Las soluciones explícitas para el cálculo de las concentraciones teóricas puntuales y promedio de solutos y solvente según el modelo pseudo binario pueden obtenerse directamente sustituyendo $a_i=1$ y $\lambda_i=D_{ipb}$ en la Ec. (5) para el cálculo de las concentraciones teóricas puntuales, en las Ecs. (11) y (12) para las concentraciones teóricas promedio por elementos de volumen y en la Ec. (16) para el cálculo de las concentraciones teóricas promedio en todo el sólido, sujeto a flujos tri o bi dimensionales de solutos y solvente.

MATERIALES Y METODOS

Se utilizó un queso Pategras Argentino que utiliza fermentos lácticos formados por streptococos termófilos y lactobacilus bulgaricus, que se retiró de la fábrica en una etapa intermedia de su elaboración, inmediatamente cuando la masa coagulada se colocó en moldes cribados de 33 cm x 12 cm x 12 cm. Se dejaron durante 24 horas en una cámara termostatizada a 20°C y saturada de humedad, para reproducir las condiciones industriales de temperatura, humedad y tiempo de la etapa previa al salado, durante la cual se compacta y se uniformiza la humedad en la masa y se completan las reacciones de hidrólisis de la lactosa y de fermentación láctica (Gerla, 1994). Los bloques de queso se sumergieron en una solución acuosa de NaCl de composición similar a la utilizada industrialmente (20% p/p de NaCl, pH 5.3 ajustado con ácido clorhídrico), agregando un 0.5% de $CaCl_2$ (p/p) a la salmuera para mantener la rigidez superficial de la estructura proteica del queso durante la inmersión (Geurts *et al.*, 1980). La solución se mantuvo agitada y se utilizó un volumen de solución tal que la variación de la concentración de la salmuera fuera despreciable durante el

salado. Todo el sistema se dispuso dentro en una cámara (Tabai Chamber-Modelo PR-4GM) termostatizada a 13°C (temperatura del salado industrial) y con humedad controlada para evitar variaciones de concentración por evaporación o condensación. El muestreo se hizo retirando el bloque de queso del baño a tiempos prefijados (0.5, 1, 3, 6, 12, 24 y 48 horas) y cortando de uno de sus extremos dos placas transversales de 1.9 cm de espesor (dimensiones de cada plancha: $L_1=1.9$ cm, $L_2=L_3=11$ cm) y volviendo a sumergir inmediatamente el resto del bloque en el baño, según se esquematiza en la figura 1a.

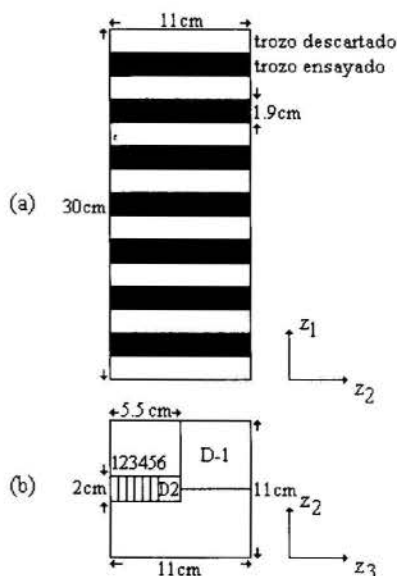


Figura 1 - Forma de extracción de las muestras de sólido.

Sobre la placa se tomaron las muestras para hacer las determinaciones experimentales. Se cortó una cuarta parte de la placa de queso según se indica en figura 1b (zona D-1) ya que existe simetría respecto a $z_2=0$ y $z_3=0$. Se molió la muestra y sobre el producto molido se determinaron las concentraciones de NaCl, ácido láctico y humedad. Los datos obtenidos de esta experiencia con la forma de muestreo indicada, se identifican como "D-1" y corresponden a valores de concentraciones promedio en toda la sección transversal del queso, sometido a flujos bidimensionales según z_2 y z_3 , para distintos tiempos de inmersión. De la misma placa se cortó otra parte, identificada como "D-2" en la figura 1b, de 2 cm de ancho por 5.5 cm de largo y del espesor de la placa (1.9 cm), de la que se cortaron seis trozos de 0.5 cm. Cada uno de estos trozos se molió y analizó separadamente y sobre cada una de las muestra numeradas de 1 a 6 desde la superficie del queso hacia adentro (Fig. 1b) y se determinaron las concentraciones promedio de los solutos. Las concentraciones determinadas en los distintos elementos (1 a 6), que representan la variación de concentraciones de solutos y solvente debidos a flujos de materia unidimensionales según z_3 .

La concentración de NaCl se determinó por el método de Fox, J. (1963), usando un titulador automático METTLER DC 40 RC de acuerdo a las especificaciones del fabricante. El contenido de humedad se determinó usando un horno microondas para determinación de humedad CEM AVC 80 según especificaciones del equipo. La determinación del contenido de ácido láctico y la posible presencia de lactosa, galactosa y glucosa se determinó por cromatografía líquida de alta performance (HPLC) modificando la técnica de Marsili (1985), (Gerla, 1994). Todas las experiencias y determinaciones fueron hechas por duplicado. Dos de las muestras se dejaron sumergidas durante 96 horas para determinar las concentraciones en condiciones de equilibrio. Para la caracteriza-

ción del queso se determinó a tiempo inicial (Tabla 1) el contenido de grasas mediante el método indicado en STANDARD F.I.L.-I.D.F. 5A: 1961 y el contenido de proteínas se determinó con un equipo BUCHI 430-322 según las especificaciones del fabricante (N x 6,38).

Los coeficientes de difusión propios y los de interacción del sistema ternario así como los coeficientes pseudobinarios en queso Pategras fueron determinados en un trabajo previo por Gerla (1994) determinando además los coeficientes de partición $\alpha=K.(V_L/V_S)$ donde K es la constante de equilibrio del soluto entre las fases, V_L es el volumen de la fase líquida y V_S es el volumen de las muestras consideradas.

Tabla 1 - Composición inicial del queso

Componente	% (p/p)	Desviación standard
Humedad	45.58	0.01
Proteínas	27.50	0.36
Grasas	23.60	0.15
NaCl	0.14	0.01
Acido láctico	1.31	0.04
Lactosa	<L.D.	-
Galactosa	<L.D.	-
Glucosa	<L.D.	-

L.D.: límite de detección; % (p/p): g/100g de queso

Los coeficientes de difusión se determinaron correlacionando los valores experimentales de las concentraciones promedio de solutos en el espesor de placas del sólido, a distintos tiempos de inmersión, con las soluciones de los modelos teóricos del sistema integradas para el volumen de las muestras consideradas. Estas presentan como variable dependiente las concentraciones promedio de solutos en el sólido y como única variable independiente el tiempo de inmersión, apareciendo los coeficientes de difusión como parámetros. Los datos experimentales, necesarios para la determinación de los coeficientes de difusión por este método, pueden obtenerse en tiempos de experimentación relativamente cortos, seleccionando adecuadamente la geometría y el tamaño de la muestra, a la vez que se reduce el error introducido por la heterogeneidad característica del producto al trabajar con valores promedio de las concentraciones de solutos en el sólido. Los coeficientes de difusión determinados con los modelos propuestos se presentan en la tabla 2.

Tabla 2 - Coeficientes de difusión en el queso

	Coefficientes de difusión (10^{10} m ² /s)	Coefficiente de reparto (α)
Modelo ternario	$D_{11}=3.51$ $D_{22}=0.99$ $D_{12}=0.00$ $D_{21}=1.26$	13.9
Modelo pseudo binario	$D_{1pb}=3.51$ $D_{2pb}=12.9$	13.9

$D_{12} = -1 \times 10^{-20}$ (m²/s)

α (g soluto en solución de inmersión/g soluto en el sólido).

Subíndices: 1:NaCl; 2:ácido láctico

Cálculos. Los cálculos se hicieron desarrollando un programa computacional en lenguaje para PC-MATLAB con el que se calcularon los valores teóricos de las concentraciones y sus porcentajes de desviación de los valores experimentales. Los valores teóricos de las concentraciones promedio de cada soluto y del solvente en toda la sección del queso con los distintos modelos, se calcularon con la Ec. (16) para L_1 igual a infinito y la Ec. (9) luego de reemplazar los valores de las concentraciones de los compuestos 1 y 2 y los porcentajes de desviación con los valores

experimentales (D-1), se calcularon por:

$$\%d_i = 100 \sqrt{\sum_{k=1}^n \left[\left(\frac{x_{i,calc.} - x_{i,exp.}}{x_{i,exp.}} \right)_k^2 \right] \frac{1}{n-1}} \quad i=1,2,3 \quad (19)$$

donde n es el número de datos experimentales, i son los solutos. Para los perfiles teóricos de concentraciones calculados por valores promedio de concentración en elementos de volumen a distancias crecientes de la superficie del queso (Ec. 11 a 13) los porcentajes de desviación con los valores experimentales (D-2) para un determinado tiempo de inmersión (θ), $\%d_{i,\theta}$ se calcularon con la Ec. (19) donde cada término elevado al cuadrado es identificada como $It_{i,k,\theta}$, k es la posición empleada y n es el número de posiciones consideradas a un mismo tiempo. El porcentaje de desviación para todas las posiciones y tiempos se calculó como:

$$\%d_i = 100 \sqrt{\sum_{\theta=1}^m \sum_{k=1}^n [It_{i,k,\theta}]^2 \frac{1}{(n-1)(m-1)}} \quad i=1,2,3 \quad (20)$$

donde m es la cantidad de veces que se determinaron valores durante el tiempo de inmersión.

RESULTADOS Y DISCUSION

En la tabla 3 se presentan los valores teóricos y experimentales de las concentraciones promedio en secciones transversales del queso (D-1), cuya variación en función del tiempo de inmersión se representan en la figura 2. En la figura 3 se indican los porcentajes de desviación correspondientes, calculados con la Ec. (19).

Tabla 3 - Concentraciones experimentales y teóricas promedio (g/l) en secciones transversales del queso.

tiempo (h)	Concentración experimental			Concentración teórica					
				ternaria			pseudobinaria		
	NaCl	ácido láct.	agua	NaCl	ácido láct.	agua	NaCl	ácido láct.	agua
0.50	4.24	14.70	520.6	4.29	14.27	517.1	4.28	14.31	517.0
1.00	5.70	13.87	519.6	5.34	13.93	515.0	5.34	13.96	515.0
3.00	7.76	13.00	507.0	7.97	13.07	509.9	7.97	13.10	510.0
6.00	10.41	12.44	499.2	10.50	12.26	505.0	10.50	12.29	505.1
12.00	14.25	11.04	490.7	14.01	11.14	498.2	14.01	11.19	498.3
24.00	18.47	9.65	491.3	18.81	9.61	488.8	18.81	9.73	488.9
48.00	25.45	7.88	484.8	25.31	7.57	476.1	25.31	7.86	475.8

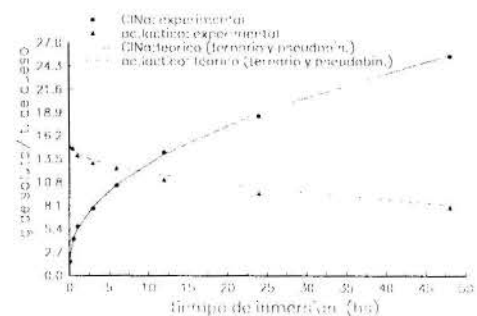


Figura 2 - Variación de las concentraciones experimentales y teóricas promedio de NaCl y ác. láctico en secciones transversales del queso (D-1).

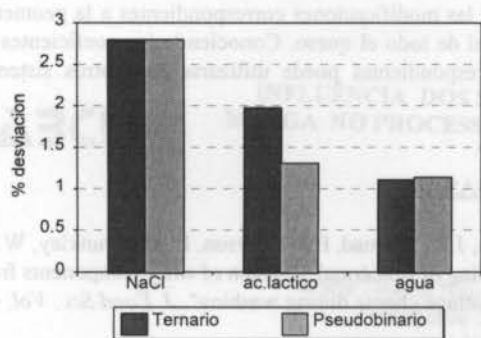


Figura 3 - Porcentajes de desviación de las concentraciones promedio teóricas y experimentales en una sección transversal.

tiempo, unidimensionales según z_3 , se muestran en las figuras 4 y 5. Los porcentajes de desviación entre valores teóricos y experimentales correspondientes a cada tiempo de inmersión calculados con la Ec. (19) se indican en la tabla 5 y los porcentajes de desviación totales, Ec. (20), se muestran en la figura 6.

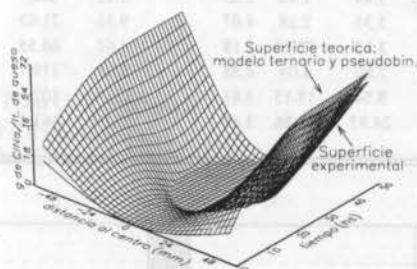


Figura 4 - Perfil de concentraciones teóricas y experimentales de NaCl en función del tiempo de salado (D-2).

Tabla 4 - Concentraciones experimentales y teóricas promedio (g/l) en elementos de volumen del queso (D-2).

tiempo (h)	fracción del sólido	Concentración experimental			Concentración teórica					
		NaCl	ácido láct.	agua	ternario			pseudobinario		
					NaCl	ácido láct.	agua	NaCl	ácido láct.	agua
0.50	1	16.41	11.51	519.6	16.26	10.36	493.9	16.08	10.38	494.7
0.50	2	1.98	14.85	520.6	1.68	15.12	522.0	1.67	15.13	522.0
0.50	3	<L.D.	14.85	513.8	1.68	15.12	522.0	1.67	15.18	521.9
0.50	4	<L.D.	14.91	518.0	1.68	15.12	522.0	1.67	15.18	521.9
0.50	5	<L.D.	14.91	518.0	1.68	15.12	522.0	1.67	15.18	521.9
0.50	6	<L.D.	14.91	518.0	1.68	15.12	522.0	1.67	15.18	521.9
1.00	1	24.10	8.27	487.2	22.28	8.39	482.3	22.04	8.68	482.6
1.00	2	1.67	14.75	515.3	1.70	15.11	522.0	1.68	14.82	522.9
1.00	3	<L.D.	14.85	509.2	1.68	15.12	522.0	1.68	15.18	521.9
1.00	4	<L.D.	14.90	505.6	1.68	15.12	522.0	1.68	15.18	521.9
1.00	5	<L.D.	14.90	505.6	1.68	15.12	522.0	1.68	15.18	521.9
1.00	6	<L.D.	14.90	505.6	1.68	15.12	522.0	1.68	15.18	521.9
3.00	1	33.00	4.11	487.8	35.80	4.11	455.9	35.76	6.03	451.3
3.00	2	3.56	14.34	519.9	3.26	14.46	519.3	2.88	12.78	525.3
3.00	3	1.71	14.85	513.9	1.69	15.12	522.0	1.67	14.86	521.9
3.00	4	<L.D.	14.85	502.8	1.68	15.12	522.0	1.67	15.16	521.9
3.00	5	<L.D.	14.96	505.2	1.68	15.12	522.0	1.67	15.18	521.9
3.00	6	<L.D.	14.88	504.7	1.68	15.12	522.0	1.67	15.18	521.9
6.00	1	43.80	2.01	482.5	45.32	1.47	436.2	45.70	4.61	426.9
6.00	2	7.76	12.89	515.2	8.22	12.40	511.0	7.37	10.61	518.7
6.00	3	2.03	14.85	510.8	2.04	14.98	521.4	1.87	13.76	525.3
6.00	4	<L.D.	14.50	505.4	1.68	15.12	522.0	1.67	14.88	522.7
6.00	5	<L.D.	14.89	503.9	1.68	15.12	522.0	1.67	15.14	522.5
6.00	6	<L.D.	14.91	503.4	1.68	15.12	522.0	1.67	15.17	521.9
12.00	1	53.10	1.01	418.5	53.98	1.07	416.5	54.76	3.68	404.2
12.00	2	17.20	8.03	487.5	17.62	8.53	495.2	16.77	8.38	498.4
12.00	3	4.81	13.84	501.7	4.57	13.92	517.2	3.92	11.78	525.1
12.00	4	1.92	14.87	503.6	1.96	15.00	521.5	1.83	13.75	525.4
12.00	5	<L.D.	14.91	502.2	1.69	15.11	522.0	1.67	14.65	523.4
12.00	6	<L.D.	14.82	499.7	1.68	15.12	522.0	1.67	14.90	522.6
24.00	1	57.12	0.99	418.5	61.19	1.07	397.9	62.11	2.92	385.5
24.00	2	29.45	3.01	487.5	29.44	3.97	474.5	29.29	6.45	468.4
24.00	3	12.67	10.10	501.7	11.93	10.85	504.8	10.89	9.40	512.2
24.00	4	5.08	13.77	503.6	4.51	13.94	517.2	3.85	11.57	525.9
24.00	5	2.09	14.79	502.2	2.25	14.88	521.0	2.03	12.86	527.4
24.00	6	<L.D.	14.82	499.7	1.84	15.05	521.7	1.74	13.29	527.0
48.00	1	61.50	<L.D.	394.3	66.85	1.07	381.7	67.71	2.30	371.5
48.00	2	42.08	<L.D.	480.2	41.12	1.07	451.3	41.81	4.66	438.0
48.00	3	24.30	5.07	501.1	23.25	6.23	485.7	22.61	6.74	486.5
48.00	4	18.43	10.20	502.4	12.13	10.78	504.5	10.99	8.34	514.8
48.00	5	6.55	13.44	503.1	6.40	13.16	514.1	5.39	9.36	527.8
48.00	6	3.03	14.67	503.5	4.69	13.87	517.0	3.81	9.71	531.3

L.D.:límite de detección

La comparación experimental y teórica de los valores concentración - posición para distintos tiempos de inmersión se presentan en la tabla 4 y de los perfiles concentración-posición-

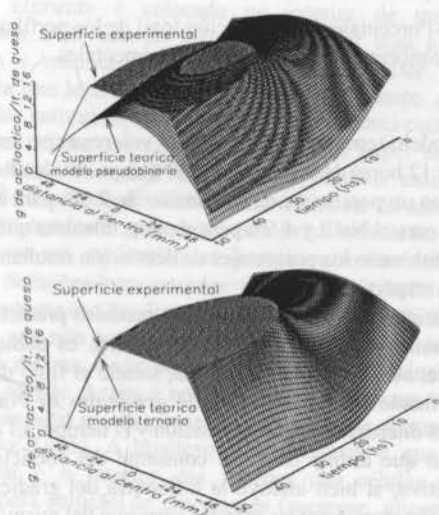


Figura 5 - Perfil de concentraciones teóricas y experimentales de ác. láctico en función del tiempo de salado (D-2).

El análisis de los resultados obtenidos indica que, para la predicción de las concentraciones promedio tanto el modelo ternario como el pseudobinario, con los coeficientes efectivos de difusión teniendo en cuenta la interacción existente, resultan adecuados para la determinación de los tres compuestos considerados en el sistema, dando porcentajes de desviación inferiores al 5% para todo el período de inmersión.

En el caso de los perfiles de concentración, en el periodo de salado la penetración y egreso de solutos tuvo lugar hasta una distancia de 2.5 cm desde la superficie del queso, donde se establecieron importantes gradientes de concentración que varían con la posición y el tiempo. El cambio de concentración del ácido láctico con la posición, para los distintos tiempos, pudo ser estimado por el modelo ternario pero no por el modelo pseudobinario, en cambio para el NaCl resultan adecuados cualquiera de los modelos ya que su velocidad de difusión depende exclusivamente de su propio gradiente de concentración. Las ecuaciones predictivas correspon-

Tabla 5 -Porcentajes de desviación de los perfiles de concentración teóricos y experimentales a distintos tiempos de inmersión.

tiempo (h)	% desviación					
	ternaria			pseudobinaria		
	NaCl	ácido láct.	agua	NaCl	ácido láct.	agua
0.50	6.79	4.75	2.40	7.06	4.83	2.33
1.00	3.49	1.90	2.85	3.82	2.83	2.84
3.00	5.35	2.28	4.07	9.35	21.63	4.41
6.00	3.13	12.16	5.18	4.62	60.55	5.99
12.00	2.80	4.04	4.58	8.61	118.7	5.67
24.00	8.54	15.15	3.81	13.31	102.1	5.59
48.00	24.97	10.86	3.67	15.84	161.1	6.00

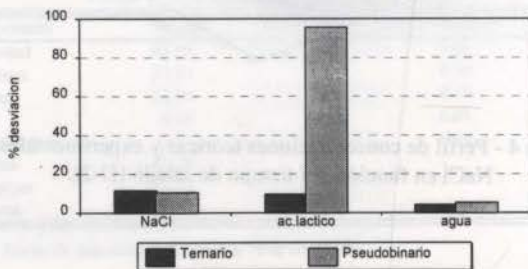


Figura 6 -Porcentajes de desviación total de los perfiles de concentración teóricos y experimentales.

dientes al modelo ternario reproducen los valores experimentales medidos a las 12 horas de salado, que es el tiempo empleado industrialmente, con un porcentaje de desviación de 2.8% para el ácido láctico, 4.0% para el NaCl y 4.6% para el agua, mientras que con el modelo pseudobinario los porcentajes de desviación resultan 119%, 8.7% y 5.7% respectivamente.

Este distinto comportamiento de los modelos predictivos de las concentraciones puntuales de ácido láctico, es debido a la interacción del otro soluto en el sistema, siendo el flujo de ácido láctico modificado por la presencia de gradientes de NaCl que tienen grandes diferencias según la posición y el tiempo. El modelo pseudobinario que asume un valor constante del coeficiente de difusión efectivo, si bien incluye la influencia del gradientes de NaCl al no poder considerar las grandes variación del mismo con la posición no permite calcular con bajo error la variación del flujo del ácido láctico y el perfil de concentraciones en las zonas cercanas a la superficie. El efecto que a nivel de los valores medios en el bloque de queso no es necesario considerar por separado debido a que el rango de variación de los gradientes de NaCl es chico, es importante individualizarlo cuando se analizan los perfiles de concentraciones por elementos de volumen, donde el rango de variación del gradiente de NaCl para elementos situados en distintas posiciones es grande.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos muestran la importancia de utilizar modelos ternarios o en general multicomponente para la predicción de las concentraciones, consiguiendo disminuir los errores derivados de la variación de la interacción entre solutos particularmente para la predicción de concentraciones puntuales de solutos minoritarios y la posibilidad de utilizar modelos mas simples, pseudobinarios, en cálculos donde aún existiendo interacción entre solutos la misma no tiene grandes variaciones.

El modelo ternario permitió considerar matematicamente mejor los fenómenos involucrados. El mismo, verificado para

muestras sometidas a difusión uni y bidimensional puede ser aplicado con las modificaciones correspondientes a la geometría tridimensional de todo el queso. Conociendo los coeficientes de difusión correspondientes puede utilizarse para otros sistemas similares.

REFERENCIAS

- Bressan, J.A., Carroad, P.A., Merson, L. and Dunkley, W.L., 1981, "Modeling of isothermal diffusion of whey components from small curd Cottage cheese during washing", *J. Food Sci.*, Vol. 47, pp. 84-88.
- Carlsaw, H.S. and Jaeger, J.C., 1959, "Conduction of Heat in Solids", Clarendon Press, London.
- Crank, J., 1975, "The Mathematics of Diffusion", Oxford University Press, London.
- Cussler, E.L., 1976, "Multicomponent Diffusion", Elsevier, Amsterdam
- Chu, C.L., Speiss, W.E. and Wolf, E., 1992, "Diffusion of lactic acid in gels", *Lebensmittel Wissenschaft und Technologie*, Vol. 25, pp. 470-475.
- Fox, J., 1963, "Potentiometric determination of salt in chesse", *J. Dairy Sci.*, Vol. 46, pp. 744-745.
- Gerla, P., 1994, "Modelado del cambio de concentraciones en el salado de quesos", Tesis de Doctorado en Ingeniería Química. Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Rep. Argentina.
- Geurts, T.J.; Walstra, P. and Mulder, H., 1980, "Transport of salt and water during salting of cheese. 2. Quantitie of salt taken up and of moisture lost", *Neth. Milk Dairy J.*, Vol. 34, pp. 229-254.
- Lawrence, R.C. and Gilles, J., 1982, "Factors that determine the pH of young Cheddar cheese", *N.Z. J. Dairy Sci. Technol.*, Vol. 17, pp. 1-14.
- Luna, J. and Bressan, J., 1986, "Mass transfer during brining of cuartirolo argentino chesse", *J. Food Sci.*, Vol. 51, pp. 829-831.
- Marsili, R., Ostapenko, H., Simmons, R.E. and Green, D.E., 1985, "High performance liquid chromatographic determination of organic acids in dairy products", *J. Food Sci.*, Vol. 46, pp. 52-57.
- Schwartzberg, H.G. and Chao, R.Y., 1982, "Solute diffusivities in leaching processes", *Food Technol.*, Vol. 36, pp. 73-86.
- Thomas, T.D. and Pearce, K.N., 1981, "Influence of salt on lactose fermentation an proteolysis in Cheddar cheese", *N.Z. J. Dairy Technol.*, Vol. 16, pp. 253-259.
- Toor, H.L., 1964, "Solution of the linerized equations of multicomponent mass transfer: II. Matrix methods", *A.I.Ch.E. J.*, Vol. 10, pp. 460-465.
- Yaygin, H., 1979, "Changes in brine during cheese brining", ZiraatFak Ege Univ., Bornova, Izmir, Turkey
- Zorrilla, S.E. and Rubiolo, A.C., 1995, "Estimation of the average concentration in partial volums", *Int. J. of food Sci. and Technology*, Enviado

ABSTRACT

Equations for predicting lactic acid, NaCl and water concentrations during salting were obtained using diffusive mass transfer models. After 12 hours, the deviation between experimental local concentration and predicted values with a ternary model were 2.8% for lactic acid, 4.0% for NaCl and 4.6% for water, while these deviations were 119%, 8.7% and 5.7% respectively when a pseudo-binary model was used. The average concentrations calculated showed deviations less than 5% with both models, due to the small variation of concentration gradients. The ternary model allowed a better evaluation of the process and could be applied to other food systems.



INFLUÊNCIA DOS SOLUTOS NA CONSERVAÇÃO DE FATIAS DE MANGA NO PROCESSO COMBINADO DESIDRATAÇÃO OSMÓTICA E CONGELAMENTO.



Maria Helena Nunes, Maria Helena Miguel e Theo G. Kieckbusch
Faculdade de Engenharia Química-DTF/UNICAMP
13083-970 - Campinas - SP - Brasil

RESUMO

O efeito crioprotetor da concentração de solutos foi avaliado em fatias de manga (1 cm de espessura) submetidas a desidratação osmótica com misturas aquosas de sacarose e glicerol e posterior congelamento/descongelamento, medindo-se a massa exsudada. Os resultados indicam que 1 hora de tratamento osmótico reduz a exsudação em cerca de 70%, evidenciando-se a influência positiva da impregnação com glicerol

INTRODUÇÃO

A água é o constituinte predominante em muitos alimentos, sendo um meio para reações químicas e um reagente direto em processos hidrolíticos. Dessa forma, a remoção da água retarda muitas reações e inibe o crescimento de microorganismos, aumentando a vida de prateleira de inúmeros alimentos (Belitz e Grosch, 1987). Para evitar deteriorações microbiológicas, químicas e/ou físicas, que afetariam a aceitação do alimento pelo consumidor, a moderna tecnologia utiliza, basicamente, dois princípios: a eliminação da água disponível (congelamento, desidratação) ou a inativação dos microorganismos pelo calor (esterilização, pasteurização) (Bobbio e Bobbio, 1992).

Scott (1957) propôs que é a atividade da água (a_w), e não o conteúdo de água, que determina o crescimento microbiano e a textura física de alimentos processados. Células microbianas de diferentes tipos variam muito quanto à habilidade de crescer e metabolizar sob a_w reduzidas. Portanto, da mesma forma que o pH e a temperatura, a a_w tem se constituído em um determinante útil do funcionamento celular. Muitos produtos alimentícios de importância nutricional, tais como sucos de frutas, leite, ovos e vegetais são desidratados na indústria alimentícia. Durante a desidratação o produto está geralmente acima da temperatura ambiente, mas bem abaixo da temperatura de esterilização. O calor adicionado e o tempo de exposição do produto a elevadas temperaturas afetam sua qualidade nutricional.

O congelamento é uma técnica de conservação que visa principalmente o retardamento das velocidades de diversas transformações de deterioração que ocorrem em alimentos pela redução de sua temperatura a níveis compatíveis com o tempo de estocagem pretendido, e principalmente, com a labilidade do próprio produto (Hense, 1990). A apreciação da qualidade de produtos congelados implica notadamente no exame das características organolépticas tais como: aparência geral, cor, odor, sabor e textura. Um fator importante que deve ser considerado é a avaliação da firmeza após o descongelamento.

O amolecimento resultante do tratamento congelamento/descongelamento é geralmente acompanhado de uma liberação de exsudado (suco celular) e conseqüente arraste de sólidos solúveis com sensíveis alterações na textura das frutas. No caso de frutas, as alterações de firmeza estão associadas com modificações na estrutura celular (resistência mecânica no gel da parede, coesão das células, espaços intercelulares e composição química) (Phan e Mimault, 1980).

Desidratação osmótica é um processo de remoção de água onde o alimento é colocado no interior de uma solução hipertônica. Pelo fato da solução apresentar uma alta pressão osmótica e uma baixa atividade de água, existe uma força impulsora que leva à remoção de água do alimento. As paredes das células naturais atuam como membranas semi-permeáveis. A membrana celular parece desempenhar um papel seletivo que torna o fluxo de saída de água do produto maior quando comparado à entrada de sólidos para o interior do mesmo. Além da solução osmótica apresentar uma baixa atividade de água, o soluto deve ser inofensivo ao homem e apresentar um bom paladar. Soluções concentradas de sacarose (50-70°Brix) são freqüentemente usadas. Entretanto, como a molécula de sacarose é grande, ela não consegue atravessar a parede celular, ficando aderida à mesma, onde interage com certas substâncias, dando rigidez à parede. Assim é possível um processo com substancial remoção de água e com pouca incorporação de açúcar (Finzer e Limaverde, 1985). A hipótese mais aceitável é que o espaço intercelular e o interior das paredes das células possa ser ocupado pela solução de umectantes (sacarose, glicerol), o que promoveria uma proteção estrutural das células durante o processo de desidratação. A quantidade de açúcar que difunde para o alimento é maior nos materiais submetidos ao branqueamento (Kieckbusch, 1992).

A desidratação utilizando temperaturas altas não é adequada para materiais sensíveis, como é o caso das frutas, pois pode causar enrijecimento do tecido e alterações no sabor, no aroma e na aparência do alimento. A desidratação osmótica surge, então, como uma alternativa mais suave de remoção da água desses alimentos.

A osmose é uma das formas energeticamente mais eficientes de desidratar um alimento, visto que a água deixa o produto sem sofrer mudança de fase (Kieckbusch et al., 1992).

Neste trabalho procurou-se estudar a influência de dois solutos, sacarose e glicerol, durante a desidratação osmótica e o congelamento de fatias de mangas. Esses aditivos são conhecidos como umectantes pela alta capacidade de se ligarem à água. A elevada concentração de açúcares resulta em uma diminuição da atividade de água devido às pontes de hidrogênio formadas entre essas substâncias e a água (Bobbio e Bobbio, 1992). O glicerol também é conhecido pelas suas propriedades de crioprotetor: substâncias adicionadas aos alimentos com o objetivo de protegê-los durante o congelamento. O efeito do glicerol é simplesmente reduzir a quantidade de gelo formada em qualquer temperatura e, dessa forma, a concentração de sal

extracelular e a extensão da perda osmótica de água (Kartha, 1985).

Entre as variedades de manga cultivadas no Brasil, podemos destacar as seguintes: Haden, Bourbon, Tommy Atkins, Carlota, Itamaracá, Ubá, Coração-de-boi, Sabina, Taú, Espada e Rosa. De origem asiática, da região do sudoeste da Índia e da região indobirmanesa, a manga difundiu-se por todas as regiões tropicais e subtropicais, devido à sua capacidade de adaptação. Ela é rica em vitamina A (β -caroteno), C e em açúcares. O período de colheita da manga no estado de São Paulo é de aproximadamente 2 meses: dezembro e janeiro. Por ser um fruto tropical, a manga é muito susceptível à injúrias pelo frio e desta forma sua estocagem por longos períodos se torna inviável. O congelamento rápido pode preservar a qualidade do flavor e estender seu curto período comercial por, no mínimo, 4 meses adicionais (Gorgatti Netto et al., 1971).

O branqueamento é apontado como o responsável pela destruição da membrana celular, o que ocasiona mudança no comportamento do tecido vegetal (Kieckbusch et al., 1992). No processo de desidratação osmótica o efeito do branqueamento pode ser ainda mais acentuado por interferir sobre a perda de água e o ganho de sólidos do produto durante o processo de transferência de massa que ocorre entre ele e a solução desidratante. Os autores estudaram a influência do branqueamento nas taxas de transferência de massa durante a desidratação osmótica de banana nanica. A perda de água pelo produto aumentou com a concentração da solução desidratante e com a ausência do branqueamento. O ganho de sólidos foi reduzido drasticamente para as amostras desidratadas osmoticamente, não submetidas previamente ao branqueamento. Em termos absolutos as amostras não branqueadas também apresentaram os conteúdos mais baixos de umidade.

MATERIAIS E MÉTODOS

Foram utilizadas mangas da variedade Tommy Atkins, produzidas no Sítio Ipê, localizado em Indaiatuba, Estado de São Paulo. As mangas eram armazenadas em geladeira à 7°C logo que adquiridas. O armazenamento foi feito com a fruta verde, de modo a aumentar o seu tempo de estocagem. As frutas eram lavadas, descascadas e fatiadas na direção longitudinal ao sentido do caroço em fatias de 1 cm de espessura utilizando-se um fatiador manual. A área superficial das fatias foi mantida fixa em cerca de 15,75 cm² visando a posterior modelagem do fenômeno. A etapa de branqueamento das amostras, necessária para a inativação das enzimas, não foi realizada. Foram utilizadas soluções de sacarose (40 e 50%) e uma mistura de sacarose e glicerol (40:10 e 50:10) na desidratação osmótica. Os tempos de desidratação osmótica foram de 15, 30 e 60 minutos, enquanto a temperatura manteve-se constante em 30°C. A proporção massa da amostra: massa da solução foi mantida em 1:8, garantindo-se, dessa forma, não haver alteração significativa da concentração da solução durante a desidratação. Após a desidratação as fatias eram drenadas, enxugadas suavemente, pesadas, embaladas com um filme laminado e congeladas em freezer à -18°C. As embalagens foram vedadas por meio de uma seladora elétrica (Lorenzetti) para evitar o contato direto com o meio refrigerante. O tempo de congelamento foi de 12 horas (o suficiente para se atingir o equilíbrio) e o de descongelamento de 4 horas (o suficiente para que toda a fatia fosse descongelada). A proteção crioscópica do glicerol foi estudada avaliando-se a perda de peso e a quantidade de exsudado ("dripping") após o descongelamento das amostras. Durante o descongelamento as amostras eram colocadas no interior de funis plásticos, em uma posição fixa e de forma a permitir o fácil escoamento do material exsudado. Este era recolhido para posterior pesagem e análise da quantidade dos sólidos solúveis, utilizando um refratômetro (Carl Zeiss). Os resultados foram

expressos em °Brix a 20°C. Para evitar a condensação de vapor durante o descongelamento das fatias, optou-se por colocá-las no interior de um dessecador fechado, sem carga de dessecante. Após o descongelamento as fatias foram secas e pesadas em balança analítica. A umidade foi determinada em estufa a 50°C. As fatias desidratadas com sacarose permaneceram na estufa por 4 dias, enquanto as desidratadas com sacarose e glicerol por 8 dias. Em todas as análises o controle foi feito com a fatia de manga *in natura*.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Segundo Miguel (1996) as curvas típicas de desidratação osmótica de fatias de manga com tempos de imersão de até 48 horas possuem três etapas bem definidas:

- No início da desidratação (tempos curtos) ocorre acentuada perda de água das amostras, que ultrapassa o ganho de sólidos.
- Com o aumento do tempo de imersão atinge-se o equilíbrio termodinâmico, caracterizado por um platô bem definido nas curvas de desidratação.
- Após o equilíbrio o ganho de sólidos passa a ser mais significativo que a perda de água, e a curva de desidratação apresenta uma queda acentuada (tempos longos).

A Figura 1 mostra as curvas de desidratação osmótica das fatias de manga obtidas usando as quatro soluções de sacarose e/ou glicerol estudadas. A ordenada (perda de peso) foi obtida pela Eq. (1):

$$P.P.(%) = [(M_i - M_f) / M_i] \cdot 100 \quad (1)$$

onde: M_i = Massa da fatia antes da desidratação osmótica, g
 M_f = Massa da fatia após a desidratação osmótica, g

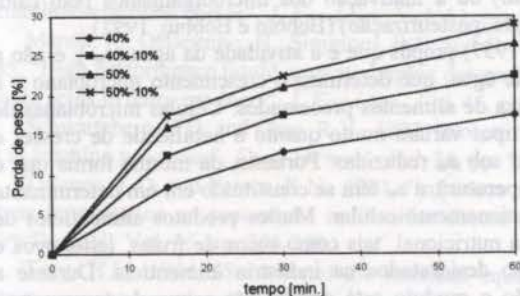


Figura 1 - Influência da concentração do soluto durante a desidratação osmótica de fatias de manga.

O formato das curvas confirma tendências esperadas: a perda de peso das amostras aumenta com o aumento da concentração (ou atividade de água) e com o tempo de imersão. Preferiu-se trabalhar com tempos curtos de desidratação, onde o fluxo de água do alimento para a solução é mais significativo. Isto pode ser verificado na Tabela 1, onde é feita uma comparação entre a perda de peso e a perda de água das amostras. A perda de água foi obtida por um balanço de massa e é dada pela Eq. (2):

$$P.A.(%) = [(M_i \cdot u_{b.u.,i} - M_f \cdot u_{b.u.,f}) / M_i] \times 100 \quad (2)$$

onde: $u_{b.u.,i}$ = Umidade (base úmida) da fatia antes da desidratação osmótica, %

$u_{b.u.,f}$ = Umidade (base úmida) da fatia após a desidratação osmótica, %

Tabela 1- Variação da perda de água e da perda de peso de fatias de manga desidratadas osmoticamente (em % sobre a massa inicial).

Tempo (min.)		Solução (concentração)			
		40%	50%	40:10	50:10
15	P.P.	8,99	12,72	15,46	16,72
	P.A.	10,52	15,64	15,72	15,86
30	P.P.	13,50	17,89	20,78	22,08
	P.A.	15,20	18,84	22,34	25,63
60	P.P.	19,28	23,79	26,63	29,49
	P.A.	21,18	24,87	28,74	34,09

Observa-se na Tabela 1 que não existe a relação 1:1 entre a perda de peso e a perda de água. Os valores de perda de água são maiores que os obtidos para perda de peso, garantindo-se, dessa forma, que um tempo de imersão de 1 hora ainda é considerado curto para a desidratação de fatias de manga em todas as concentrações estudadas.

Uma vez que durante o descongelamento ocorre exsudação ("dripping") de suco celular e conseqüente arraste de sólidos solúveis (Tomasichio e Andreotti, 1990), utilizou-se a quantidade de exsudado como critério de avaliação da qualidade das fatias congeladas após o pré-tratamento de desidratação osmótica.

A Tabela 2 resume os dados de quantidade de exsudado obtido após o descongelamento das amostras. Para facilitar a comparação dos resultados foi feita uma adimensionalização utilizando-se a quantidade de exsudado no produto não tratado osmoticamente como referência. O tempo 0 de imersão corresponde a fatias de manga que não sofreram tratamento osmótico, ou seja, as fatias *in natura*.

Tabela 2- Razão entre a quantidade de exsudado de fatias de manga tratadas osmoticamente e de fatias *in natura*, após o descongelamento.

Tempo (min.)	Solução (concentração)			
	40%	50%	40:10	50:10
0	1	1	1	1
15	0,736	0,632	0,463	0,480
30	0,554	0,587	0,265	0,218
60	0,378	0,482	0,109	0,048

Como já foi visto, durante a etapa de descongelamento das amostras ocorrem perdas de peso por "dripping". A Tabela 3 resume os resultados de perda de peso obtidos durante o descongelamento de fatias de manga. A adimensionalização dos resultados foi feita como na Tabela 2. Os dados experimentais permitem verificar que existe diferença entre os valores de perda de peso e os de quantidade de exsudado. Uma possível explicação seria o enxugamento das fatias, necessário para a determinação da perda de peso das amostras. Durante esta etapa costumam ocorrer perdas de material devido a pouca consistência dessas fatias.

Tabela 3- Razão entre a perda de peso de fatias de manga tratadas osmoticamente e de fatias *in natura*, após o descongelamento.

Tempo (min.)	Solução (concentração)			
	40%	50%	40:10	50:10
0	1	1	1	1
15	0,753	0,778	0,356	0,469
30	0,400	0,673	0,218	0,399
60	0,274	0,481	0,241	0,337

Os resultados experimentais indicam que a desidratação osmótica é um pré-tratamento eficiente para a redução da perda de peso e da quantidade de exsudado durante o descongelamento. Segundo Resende (1994) a pré-secagem de fatias de manga com ar quente até níveis de 30% de água evaporada (relativo ao peso total) foi suficiente para reduzir drasticamente a quantidade de exsudado durante o descongelamento das amostras. Bolin e Huxsoll (1993) acreditam que a remoção da umidade durante um pré-tratamento de desidratação, provoca a compactação das células e a concentração de conteúdo celular. Estes efeitos poderiam ser correlacionados com um aumento de compressão das células, tornando-as mais resistentes aos efeitos do rompimento das estruturas. Estes fatores poderiam também provocar uma redução na tendência da água migrar para fora da célula, reduzindo os efeitos danosos de formação dos cristais de gelo durante o congelamento. Acredita-se que quando o pré-tratamento é feito através da desidratação osmótica sempre haverá presença de material exsudado, não exatamente devido à desestruturação da célula, mas em alguns casos pela liberação da solução osmótica impregnada na superfície da fatia.

As soluções estudadas não possuem as mesmas atividades de água, o que implica em níveis de desidratação diferentes, que poderiam estar mascarando o efeito de crioproteção do glicerol, visto que as fatias tratadas com soluções de sacarose e glicerol tiveram perdas de água maiores do que as tratadas somente com sacarose. Contudo, pela observação da Figura 1, nota-se que a diferença entre as curvas se mantém praticamente constante. Era de se esperar, portanto, que os valores das Tabelas 2 e 3 mantivessem o mesmo comportamento, fato que não aconteceu. O que se pode concluir desses resultados é a formação de dois grupos, que diferem na presença ou não de glicerol nas amostras. Embora os dados não sejam conclusivos, eles são um indicativo de que a presença de glicerol é um fator a mais de proteção para as amostras congeladas.

Infelizmente o glicerol não conseguiu diminuir o amolecimento da matriz celular que ocorre após o descongelamento. A maior parte das amostras apresentou alterações na firmeza e perda de consistência, dificultando, inclusive, o próprio manuseio das mesmas.

Para os ensaios de congelamento utilizou-se de 5 a 7 fatias de manga para cada tempo de imersão. Verificou-se que existe grande variação nos valores de perda de peso e de quantidade de exsudado após o descongelamento das amostras. A dispersão desses valores é bastante acentuada até mesmo entre fatias cortadas de uma mesma fruta. Este comportamento também foi observado por Resende (1994) durante um pré-tratamento de secagem de fatias de manga com ar quente e posterior congelamento em freezer (-18°C). Segundo o autor o comportamento fisiológico da manga durante a maturação mostra que se pode encontrar variações nas condições físico-químicas da fruta, não havendo um padrão uniforme até mesmo em frutas procedentes de uma mesma safra e de mesmo ponto de colheita.

A determinação da quantidade de sólidos solúveis do material exsudado das amostras não ofereceu resultados

satisfatórios, que pudessem ser relacionados à concentração de solução osmótica utilizada ou ao tempo de imersão. Sabe-se, entretanto, que ela diminui com o pré-tratamento de desidratação. Ao contrário do esperado, houve um aumento na quantidade de sólidos solúveis das amostras desidratadas osmoticamente em relação às amostras frescas (sem tratamento). Acredita-se que esse aumento seja devido a concentração de material celular e a entrada de solutos no interior das fatias. Como já foi dito, uma outra possibilidade seria a liberação, durante o descongelamento, da própria solução osmótica que ficou impregnada na superfície das fatias.

CONCLUSÕES

A desidratação osmótica foi um pré-tratamento inicial eficiente na diminuição da perda de peso e da quantidade de exsudado após o descongelamento. Os dados experimentais comprovam que com tempos de imersão de 15 minutos já é possível notar diferença nos valores de quantidade de exsudado e de perda de peso para as fatias *in natura* e as tratadas osmoticamente. A presença de glicerol nas soluções também se mostrou eficiente na redução do “dripping” das amostras, mas ainda é cedo para atribuir essa melhoria ao efeito crio-protetor do glicerol. Isto só poderia ser feito de forma mais segura utilizando-se soluções osmóticas de mesma atividade de água. O amolecimento resultante do processo de congelamento/descongelamento não foi evitado pelo uso do glicerol, como se esperava.

REFERÊNCIAS

Belitz, H.D. e Grosch, W., 1987, “Food Chemistry”, Springer-Verlag, Berlin, 774p.
 Bobbio, P.A. e Bobbio, F.O., 1992, Química do Processamento de Alimentos. 2ª edição revista e atualizada, São Paulo, 306p.
 Bolin, H. R. e Huxsoll, C.C., 1993, “Partial Drying of Cut Pears to Improve Freeze/Thaw Texture”, Journal of Food Science, Vol. 58, n.2, pp. 357-360.
 Finzer, J.R.D. e Limaverde, J.R., 1985, “Tecnologia de Desidratação de Milho Verde”, Universidade Federal de Uberlândia, CNPq, Departamento de Engenharia Química, Uberlândia, Minas Gerais.
 Gorgatti Netto, A., Bleinroth, E.W., Lazzarini, L.C., 1971, “Quality Evaluation of Frozen Sliced Mangoes in Syrup”, Proceedings 8th International Congress of Refrigeration, Washington, Vol. 3.
 Hense, H., 1990, “Avaliação dos Parâmetros Termofísicos e Cinética de Congelamento de Cação”, Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP, SP, Brasil.
 Kartha, K.K., 1985, “Cryopreservation of Plant Cells and Organs”, CRC Press, Inc. Boca Raton, Florida, 276 p.
 Kieckbusch, T.G., Miguel, M.H. e Fernandez, M.G.V., 1992, “Influência do Branqueamento nas Taxas de Transferência de Massa na Desidratação Osmótica”, 8th Congresso Brasileiro de Ciência e Tecnologia de Alimentos, Resumos, São Paulo, p.p. 12.
 Miguel, M.H., 1996, “Parâmetros Biológicos Envolvidos na Transferência de Massa Durante a Desidratação Osmótica de Mangas”, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP, SP, Brasil, em andamento.
 Phan, P.A. e Mimault, J., 1980, “Effects of Freezing and Thawing on Fruits. Evaluation of Some Texture Parameters and Exsudate. Relation to Fruit Quality”, International Journal of Refrigeration, Vol. 3, pp. 5.

Resende, E. D., 1994, “Estudo da Conservação de Fatias de Manga Utilizando Técnicas Combinadas: Pré-Secagem e Congelamento”, Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, Brasil.

Scott, W.J., 1957, “Water Relations of Food Spoilage Microorganisms”, Advanced Food Research, Vol.7, pp.83-127.

Tomasichio, M. e Andreotti, R., 1990, “Studio Sul Deidrocongelo Del Mango”, Industria Conserve, Vol. 65, pp. 127-130.

ABSTRACT

The cryo-protective action of solutes concentration was evaluated with mango slices (1 cm thick), submitted to osmotic dehydration with aqueous mixtures of sucrose and glicerol, followed by freeze/thawing and weighting the exsudate mass. The results indicate that the osmotic pretreatment reduces exsudate by about 70%, with markedly influence of glicerol impregnation.

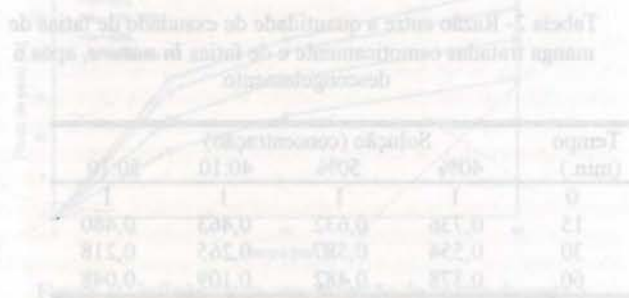


Gráfico 2 - Quantidade de exsudado (g) versus tempo (min) para diferentes tratamentos de desidratação osmótica.

Como se pode observar, a quantidade de exsudado liberado durante o descongelamento das fatias de manga tratadas osmoticamente com soluções de sacarose e glicerol em diferentes concentrações e tempos de imersão, foi significativamente menor em relação às fatias de manga não tratadas osmoticamente. Isso indica que o tratamento osmótico prévio reduz a perda de água durante o descongelamento, o que é desejável para a conservação da qualidade da fruta.

ABCN

DIFUSION DE CO₂ EN QUESOS

Susana E. Zorrilla y Amelia C. Rubiolo
 Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
 Universidad Nacional del Litoral - CONICET
 Güemes 3450 - (3000) Santa Fe - Rep. Argentina



RESUMEN

Se propuso un modelo difusivo para estudiar el movimiento del dióxido de carbono (CO₂) en quesos. Se consideró la presencia de ojos de geometría esférica uniformemente distribuidos y de concentración de CO₂ constante. Se calcularon concentraciones individuales considerando la difusión desde una esfera de volumen finito hacia un medio infinito. Para un dado número de Fourier, la concentración fuera de un radio mínimo se consideró despreciable por lo que las concentraciones globales y los flujos totales a través de la superficie del queso se calcularon como la sumatoria de los aportes individuales de los ojos.

INTRODUCCION

La formación de agujeros u ojos es uno de los procesos que se desarrollan durante la maduración de ciertos quesos. Aunque los agujeros no son esenciales en la calidad, estos se consideran deseables en algunas variedades. La formación de los ojos de un queso de buena calidad es consecuencia de las sucesivas fermentaciones responsables de la producción de dióxido de carbono (CO₂). En los quesos tipo suizo ocurre una fermentación ácido-láctica completada casi a las 24 horas, en la que el 90 % de la lactosa se convierte en ácido láctico. Este ácido láctico es el sustrato para la fermentación ácido-propiónica en la que se transforma el lactato a acetato, propionato y CO₂. En este caso, la temperatura debe elevarse a 18 - 25 °C y la fermentación se lleva a cabo durante 20 - 30 días. Cuando se han producido suficientes ojos, la fermentación del ácido propiónico se retarda por una disminución en la temperatura. Los quesos tipo suizo más conocidos son los quesos Emmentaler y Gruyère de forma cilíndrica (Fox, 1987). En quesos tipo holanda, los fermentos utilizados metabolizan el citrato residual de la leche a compuestos como diacetil y CO₂ (Akkerman et al., 1989). Los quesos tipo holanda más conocidos son los quesos Edam, de forma esférica y los quesos Gouda, de forma cilíndrica (Fox, 1987).

La pérdida difusional de CO₂ al medio impide que se desarrolle la presión de gas total necesaria. La baja producción de CO₂ y/o las pérdidas no permiten que los ojos persistan con las características deseadas. Por lo tanto, es útil contar con un modelo para predecir la cantidad de gas perdida que la producción debe superar y en consecuencia determinar las posibilidades de formación de ojos. Los trabajos que se han realizado hasta el momento están relacionados con la determinación de CO₂ en quesos y con el seguimiento del cambio de concentración considerando diversos parámetros tecnológicos que pueden influir en su producción (Bosset et al., 1980; Crow y Martley, 1991; Robertson, 1957). Asimismo, se ha desarrollado un modelo matemático para predecir el fenómeno difusivo del CO₂ al medio considerando la presencia de un agujero (Akkerman et al. 1989). Sin embargo, aún no se cuenta con un modelo que considere situaciones tales como un mayor número de agujeros o varias geometrías de quesos.

En el presente trabajo se propone un modelo matemático en el que el movimiento de CO₂ es estudiado por soluciones de la segunda ley de Fick. El objetivo del mismo es predecir el cambio de la concentración de CO₂ con la posición en el queso y el tiempo de maduración y la pérdida de CO₂ al medio para quesos de geometrías cilíndrica y esférica.

TEORIA

Predicción de la concentración puntual. La velocidad de transferencia de materia por difusión en estado no estacionario en alimentos, básicamente se ha modelado utilizando soluciones adecuadas de la segunda ley de Fick (Schwartzberg y Chao, 1982). Para estudiar el movimiento del CO₂ en el queso se supone un medio sólido homogéneo de densidad constante con ojos asociados a una geometría esférica. Cuando se considera un coeficiente de difusión del soluto (D) constante y solamente difusión radial, la ecuación de difusión en términos de la concentración del soluto (C) en el sólido en coordenadas polares es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (1)$$

Utilizando el siguiente cambio de variable

$$u = C r \quad (2)$$

la ecuación (1) resulta

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \quad (3)$$

En este caso, se estudia una región limitada internamente por una esfera de radio $r = a$. Es decir, se considera la difusión desde una esfera de volumen finito hacia un medio infinito. Por lo tanto, se resuelve la ecuación (3) en la región $r > a$ con las siguientes condiciones inicial y de contorno,

$$u=0 \quad t=0 \quad r > a \quad (4)$$

$$u = a C_1 \quad r = a \quad t > 0 \quad (5)$$

$$u=0 \quad r \rightarrow \infty \quad t > 0 \quad (6)$$

donde C_1 es la concentración de CO_2 sobre la superficie del ojo. En las ecuaciones (4), (5) y (6) se asume que la concentración inicial de CO_2 en la masa del queso es cero, que la concentración de CO_2 en el ojo permanece constante y que lejos del ojo la concentración es nula, respectivamente. Según Akkerman et al. (1989), la producción de CO_2 por los starters asegura una concentración constante a partir del segundo día de maduración aproximadamente. La solución del sistema (3) - (6) es (Carslaw y Jaeger, 1957),

$$C = \frac{a C_1}{r} \operatorname{erfc} \left(\frac{r-a}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (7)$$

La ecuación (7) permite estimar la concentración de CO_2 en la región $r > a$ para el caso de un único ojo. Cuando se considera más de un ojo, la condición (6) no se verifica. Sin embargo, analizando el comportamiento de la concentración para un único ojo, se puede observar en la Figura 1 que las mayores

variaciones de la concentración para diferentes valores de $\frac{Dt}{a^2}$ (número de Fourier) ocurren en un radio mínimo, a partir del cual se puede suponer válida la condición (6). Particularmente, teniendo en cuenta los valores de concentración que las técnicas experimentales permiten determinar, se puede calcular dicho

radio con el límite de $\frac{C}{C_1} \leq 0.1$. A partir del radio mínimo, el

comportamiento de cada ojo en dicho tiempo no se modificaría por la presencia de otros ojos. Para estas condiciones, en el caso de más de un ojo, se propone calcular una concentración global (C_g) para una posición y un tiempo determinados como la sumatoria de los aportes individuales de los ojos considerados.

$$C_g = \sum_{n=1}^N C_n(r_n, t) \quad (8)$$

donde N es el número de ojos y C_n es la concentración calculada con la ecuación (7) en la que la distancia r_n al punto donde se desea calcular la concentración, varía de acuerdo a la posición de cada ojo. En este caso, se consideran los aportes de todas las fuentes afectados por un mismo factor de ponderación. Si bien es un cálculo por exceso, es el criterio más sencillo para una estimación preliminar.

Dado que las geometrías más usuales en quesos con ojos son la cilíndrica y la esférica, se han realizado las distribuciones de los ojos considerando las respectivas coordenadas. Además, se considera una distribución uniforme de ojos en la masa del queso.

Predicción del flujo en la superficie. Se propone calcular la cantidad de CO_2 que atraviesa la superficie del queso en un tiempo t cuando se considera un ojo, según:

$$M = A \int_0^t \left(-D \frac{\partial C}{\partial r} \right)_{\text{sup}} dt \quad (9)$$

donde A es el área de flujo y el integrando se evalúa sobre la superficie del queso. Cuando se considera más de un ojo,

$$M_g = A \sum_{n=1}^N \int_0^t \left(-D \frac{\partial C_n}{\partial r} \right)_{\text{sup}} dt \quad (10)$$

Sustituyendo la ecuación (7) en la (10) resulta,

$$M_g = A \sum_{n=1}^N \int_0^t \left\{ D a C_1 \left[\frac{1}{r_n^2} \operatorname{erfc} \left(\frac{r_n - a}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] + \frac{1}{r_n \sqrt{\pi Dt}} \exp \left(-\frac{(r_n - a)^2}{4Dt} \right) \right\}_{\text{sup}} dt \quad (11)$$

Esta integral se resolvió por el método de aproximación que utiliza la fórmula recursiva de Newton, el cual es adecuado para trabajar funciones con singularidades.

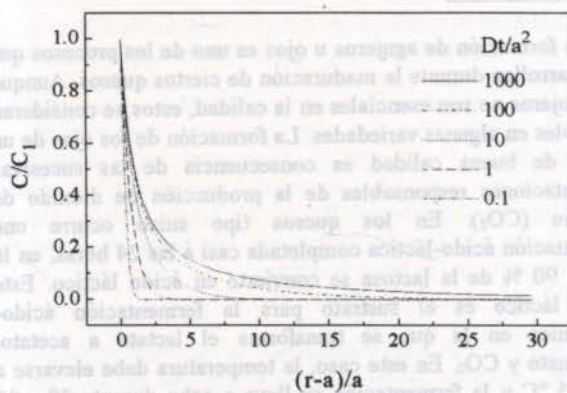


Figura 1 - Variación de la concentración cuando se considera un único ojo

MATERIALES Y METODOS

Distribución de los ojos. Una distancia mínima entre los agujeros fue usada en la distribución uniforme de los ojos en la masa del queso.

Para quesos de geometría esférica se ubicó el sistema de coordenadas en el centro del queso como se muestra en la Figura 2. Los pasos para la distribución uniforme de los agujeros fueron los siguientes: primero, se determinaron radios característicos considerando la distancia mínima entre los ojos; luego, para cada radio se realizó una distribución de los ojos sobre la longitud de la circunferencia en la dirección θ y finalmente, para cada θ se realizó una distribución de los ojos sobre la longitud de la circunferencia en la dirección ϕ .

En la Figura 3 se muestra el sistema de coordenadas para quesos de geometría cilíndrica. Los pasos para la distribución uniforme de los agujeros fueron los siguientes: primero, se determinaron alturas características considerando la distancia mínima entre los ojos; luego, para cada altura se realizó una distribución de los ojos sobre el radio y finalmente, para cada radio se realizó una distribución de los ojos sobre la longitud de la circunferencia en la dirección ϕ .

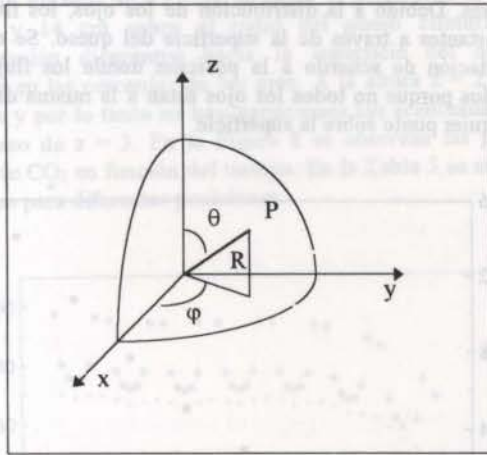


Figura 2 - Sistema de ejes de coordenadas en un queso de geometría esférica y coordenadas polares de un punto P

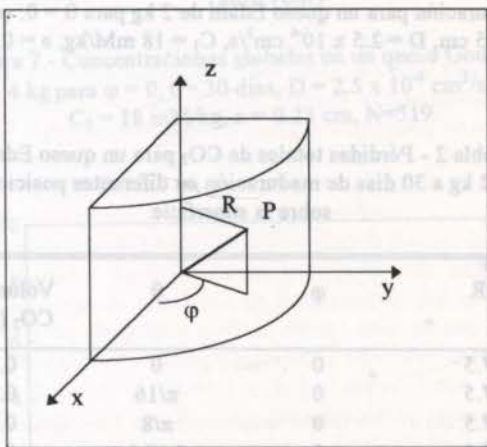


Figura 3 - Sistema de ejes de coordenadas en un queso de geometría cilíndrica y coordenadas de un punto P

La Figura 4 muestra el diagrama de flujo para el cálculo de las concentraciones puntuales y del flujo en la superficie para las geometrías estudiadas.

Datos de la literatura. Los datos utilizados en los cálculos computacionales han sido extraídos de la bibliografía relacionada con el tema de quesos con ojos. En la Tabla 1 se muestran los valores usados y la fuente bibliográfica correspondiente. En cada caso se calcularon los números de Fourier y se verificaron los respectivos radios mínimos que permiten aplicar la Ecuación (8).

RESULTADOS Y DISCUSION

Se calcularon las concentraciones globales y los flujos totales a través de la superficie para quesos con ojos usando los datos de la Tabla 1.

Queso Edam. Para la densidad considerada, un queso de 2 kg tiene aproximadamente un radio de 7.5 cm. Se calcularon las concentraciones globales variando con el radio del queso para $\theta = 0$, $\varphi = 0$ y $t = 30$ días. Para el tiempo de maduración seleccionado, el radio medio de los ojos es 0.23 cm (Akkerman et al., 1989).

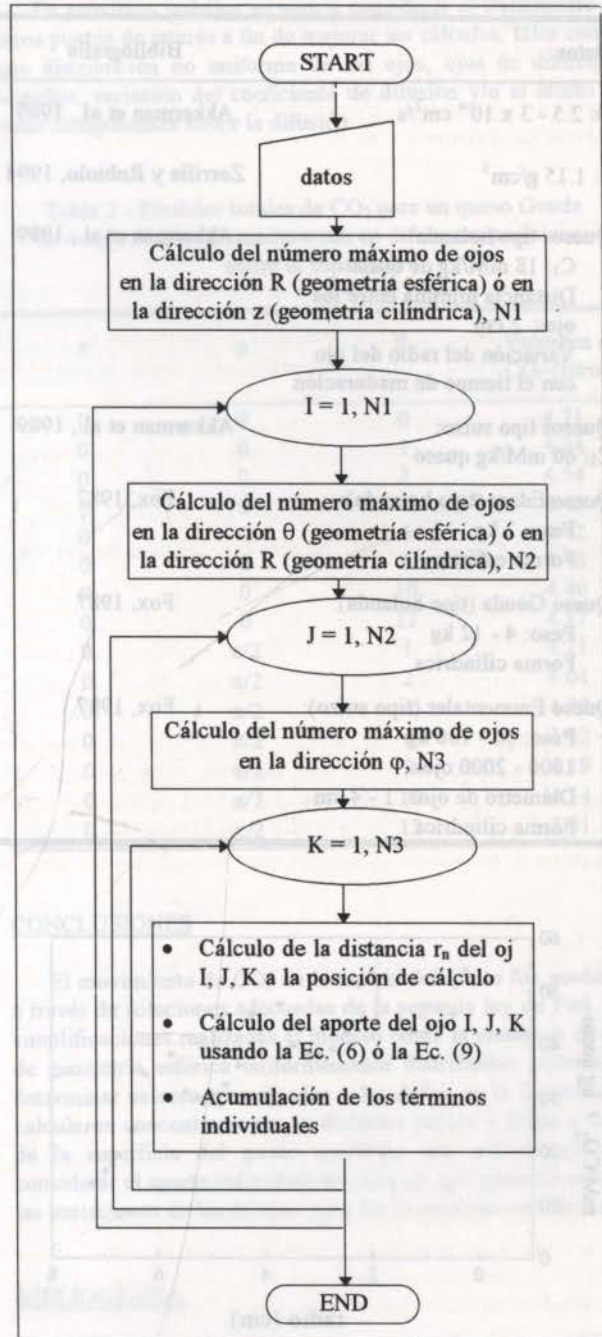


Figura 4 - Diagrama de bloques para los cálculos en geometría esférica o cilíndrica

En la Figura 5 se muestra la variación de la concentración global de CO_2 en el queso con la dirección radial. En $\theta = 0$, $\varphi = 0$ se inicia la distribución de los ojos. Se ubica un ojo en el centro del queso y luego en la dirección radial, un agujero cada

2 cm (distancia de centro a centro de los ojos). En este caso, los ojos de 0.23 cm de radio se ubicaron a 2, 4 y 6 cm sobre el radio del queso esférico. Se observa que la concentración global disminuye hacia la superficie del queso y que aumenta al acercarse a un ojo.

Tabla 1 - Datos bibliográficos

Datos	Bibliografía
D: $2.5 - 3 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$	Akkerman et al., 1989
ρ : 1.15 g/cm^3	Zorrilla y Rubiolo, 1994
Quesos tipo holandesa:	Akkerman et al., 1989
<ul style="list-style-type: none"> C_1: 18 mM/kg de queso Distancia mínima entre los ojos: 2 cm Variación del radio del ojo con el tiempo de maduración 	
Quesos tipo suizo:	Akkerman et al., 1989
C_1 : 60 mM/kg queso	
Queso Edam (tipo holandesa):	Fox, 1987
<ul style="list-style-type: none"> Peso: 2 kg Forma esférica 	
Queso Gouda (tipo holandesa):	Fox, 1987
<ul style="list-style-type: none"> Peso: 4 - 12 kg Forma cilíndrica 	
Queso Emmentaler (tipo suizo):	Fox, 1987
<ul style="list-style-type: none"> Peso: 60 - 130 kg 1000 - 2000 ojos Diámetro de ojos: 1 - 4 cm Forma cilíndrica 	

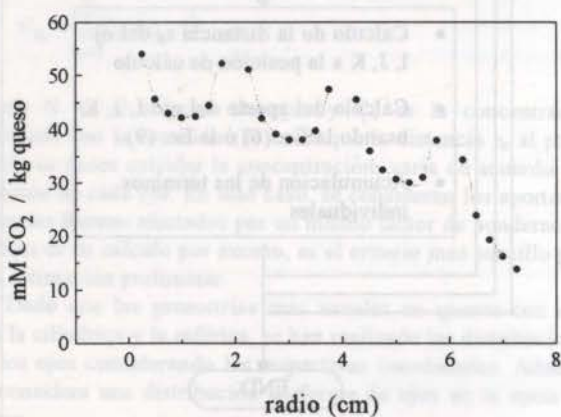


Figura 5 - Concentraciones globales en un queso Edam de 2 kg para $\theta = 0$, $\varphi = 0$, $t = 30$ días, $D = 2.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, $C_1 = 18 \text{ mM/kg}$, $a = 0.23 \text{ cm}$, $N=165$

En la Figura 6 se observan las pérdidas totales de CO_2 en función del tiempo. Para el cálculo del volumen se consideró al CO_2 como un gas ideal. De manera que a 25°C y 1 atm de presión, 1 mol de CO_2 ocupa 24.466 litros (24466 cm^3). Se informan los flujos para una posición dada en la superficie.

En la Tabla 2 se muestran los flujos para diferentes posiciones. Debido a la distribución de los ojos, los flujos no son constantes a través de la superficie del queso. Se observa una variación de acuerdo a la posición donde los flujos son calculados porque no todos los ojos están a la misma distancia de cualquier punto sobre la superficie.

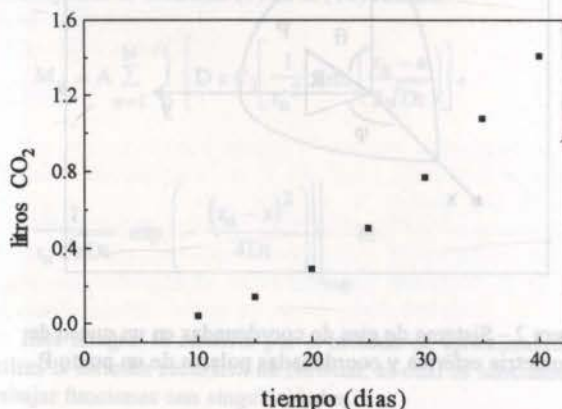


Figura 6 - Pérdidas totales de CO_2 en función del tiempo de maduración para un queso Edam de 2 kg para $\theta = 0$, $\varphi = 0$, $R = 7.5 \text{ cm}$, $D = 2.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, $C_1 = 18 \text{ mM/kg}$, $a = 0.23 \text{ cm}$

Tabla 2 - Pérdidas totales de CO_2 para un queso Edam de 2 kg a 30 días de maduración en diferentes posiciones sobre la superficie

R	φ	θ	Volumen de CO_2 (litros)
7.5	0	0	0.77
7.5	0	$\pi/16$	0.72
7.5	0	$\pi/8$	0.73
7.5	0	$3\pi/16$	0.70
7.5	0	$\pi/4$	0.71
7.5	0	$5\pi/16$	0.71
7.5	0	$3\pi/8$	0.69
7.5	0	$7\pi/16$	0.72
7.5	0	$\pi/2$	0.68
7.5	1	$\pi/16$	0.72
7.5	1	$\pi/8$	0.73
7.5	1	$3\pi/16$	0.70
7.5	1	$\pi/4$	0.70
7.5	1	$5\pi/16$	0.68
7.5	1	$3\pi/8$	0.67
7.5	1	$7\pi/16$	0.71
7.5	1	$\pi/2$	0.67

Queso Gouda. Para la densidad considerada, un queso de 4 kg tiene aproximadamente un radio de 15 cm y una altura de 6 cm. Se calcularon las concentraciones globales variando con el radio del queso para $\varphi = 0$ y $t = 30$ días. Para el tiempo de maduración seleccionado, el radio medio de los ojos es 0.23 cm (Akkerman et al., 1989).

En la Figura 7 se muestra la variación de la concentración global de CO_2 en el queso con la dirección radial para dos valores de z . En $z = 3$, $\varphi = 0$ se ubicaron un ojo en el centro del

queso y luego en la dirección radial, un agujero cada 2 cm. En este caso, los ojos de 0.23 cm de radio se ubicaron a 2, 4, 6, 8, 10, 12 y 14 cm sobre el radio del queso cilíndrico. La concentración disminuye hacia la superficie del queso y aumenta en las cercanías de los ojos. A la altura $z = 2$ no hay agujeros y por lo tanto no hay variaciones tan acentuadas como en el caso de $z = 3$. En la Figura 8 se observan las pérdidas totales de CO_2 en función del tiempo. En la Tabla 3 se muestran los flujos para diferentes posiciones.

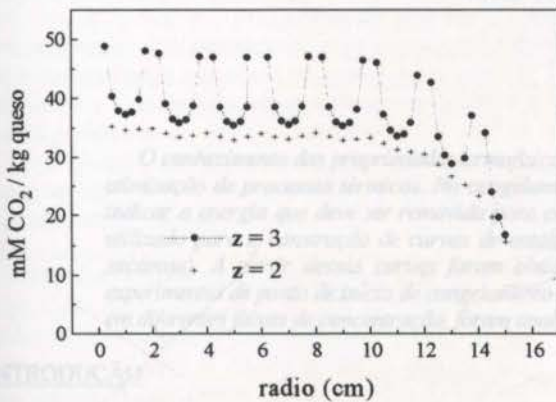


Figura 7 - Concentraciones globales en un queso Gouda de 4 kg para $\phi = 0$, $t = 30$ días, $D = 2.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, $C_1 = 18 \text{ mM/kg}$, $a = 0.23 \text{ cm}$, $N=519$

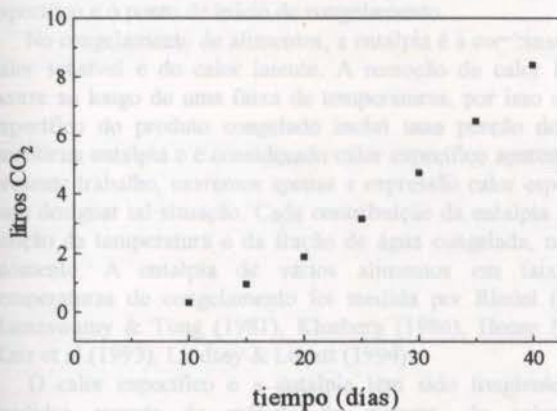


Figura 8 - Pérdidas totales de CO_2 en función del tiempo de maduración para un queso Gouda de 4 kg para $\phi = 0$, $z = 0$, $R = 0$, $D = 2.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, $C_1 = 18 \text{ mM/kg}$, $a = 0.23 \text{ cm}$

modelo propuesto es un primer paso para el cálculo de las concentraciones promediadas en un volumen definido.

Por otra parte, el cálculo de la pérdida de CO_2 al medio es importante desde el punto de vista tecnológico. En consecuencia, la predicción de las concentraciones puntuales fue usada para el cálculo del flujo de CO_2 indicados en la literatura a través de la superficie del queso. El modelo planteado permite estimar los volúmenes perdidos de CO_2 con buena aproximación.

En próximos trabajos se podría considerar el tratamiento de otros puntos de interés a fin de mejorar los cálculos, tales como: una distribución no uniforme de los ojos, ojos de diferentes tamaños, variación del coeficiente de difusión y/o el efecto de otros componentes sobre la difusión.

Tabla 3 - Pérdidas totales de CO_2 para un queso Gouda de 4 kg a 30 días de maduración en diferentes posiciones sobre la superficie

z	ϕ	R	Volumen de CO_2 (litros)
0	0	0	4.71
0	0	1	4.24
0	0	2	4.54
0	0	4	4.42
0	0	6	4.42
0	0	8	4.46
0	0	10	4.40
0	0	12	4.17
0	$\pi/2$	1	4.21
0	$\pi/2$	2	4.04
0	$\pi/2$	4	4.39
0	$\pi/2$	6	3.92
0	$\pi/2$	8	4.19
0	$\pi/2$	10	4.14
0	$\pi/2$	12	3.91

CONCLUSIONES

El movimiento de CO_2 en la matriz del queso fue modelado a través de soluciones adecuadas de la segunda ley de Fick. Las simplificaciones realizadas al modelo como la presencia de ojos de geometría esférica uniformemente distribuidos permitieron determinar valores aproximados a los dados en la literatura. Se calcularon concentraciones en distintos puntos y flujos a través de la superficie del queso mediante una metodología para considerar el aporte individual de cada ojo que permitió estudiar las variaciones de las mismas para las geometrías estudiadas.

BIBLIOGRAFIA

Akkerman, J.C., Walstra, P. y van Dijk, H.J.M., 1989, "Holes in Dutch-Type Cheese. 1. Conditions Allowing Eye Formation", *Netherlands Milk and Dairy Journal*, Vol. 43, pp. 453-476.

Bosset, J.O., Pauchard, J.P., Flueckiger, E. y Blanc, B., 1980, "Nouvelle Methode de Dosage du Gaz Carbonique dans les Produits Alimentaires et Application au Fromage", *Analytica Chimica Acta*, Vol. 115, pp. 315-321.

Carlsaw, H.S. y Jaeger, J.C., 1959, "Conduction of Heat in Solids", Clarendon Press, London.

Crow, V.L. y Martley, F.G., 1991, "An Enzymic Assay for CO₂ en Cheese", *Journal of Dairy Research*, Vol. 58, pp. 521-525.

Fox, P.F., 1987, "Cheese: Chemistry, Physics and Microbiology. V.2. Major Cheese Groups", Elsevier Applied Science, London and New York.

Robertson, P.S., 1957, "The Carbon Dioxide Content of New Zealand Cheddar Cheese", *Journal of Dairy Research*, Vol. 24, pp. 235-241.

Schwartzberg, H.G. y Chao, R.Y., 1982, "Solute Diffusivities in Leaching Processes", *Food Technology*, Vol. 36, pp. 73-86.

Zorrilla, S.E. y Rubiolo, A.C., 1994, "Fynbo Cheese NaCl and KCl Changes during Ripening", *Journal of Food Science*, Vol. 59, pp. 972-975.

ABSTRACT

A diffusional model was proposed to study the carbon dioxide (CO₂) movement in the cheese matrix. Eyes uniformly distributed were associated to spherical geometry and constant CO₂ concentration in holes was assumed. Diffusion from a sphere of finite volume to an infinite medium was considered to calculate individual concentrations related to each eye. For a given Fourier number, concentrations in a radius larger than a critical one were considered negligible. Therefore, global concentrations and total flux through the surface of the cheese were calculated considering individual contributions for each eye position.

Conc. CO ₂ (ppm)	Flux (g/m ² h)
0	0
10	0
20	0
30	0
40	0
50	0
60	0
70	0
80	0
90	0
100	0

CONCLUSIONES

El movimiento de CO₂ en la matriz del queso fue modelado a través de soluciones adiabáticas de la ecuación de Fick. Las simplificaciones realizadas al modelar consistieron en considerar la geometría esférica uniformemente distribuida de los ojos, la constante concentración de CO₂ en los ojos y la hipótesis de que los ojos de mayor tamaño contribuyen más a la concentración global de CO₂ que los de menor tamaño. Se calcularon las concentraciones globales y el flujo total a través de la superficie del queso considerando las contribuciones individuales de cada ojo que poseen diferentes posiciones de los ojos en la matriz del queso.

BIBLIOGRAFIA

Alkerman, J.C., Walster, P. y van Dijk, H.J.M., 1989. "The Diffusion of CO₂ in Cheese with Spherical Eyes". *Journal of Dairy Research*, Vol. 56, pp. 1-10.

Robertson, P.S., 1957. "The Carbon Dioxide Content of New Zealand Cheddar Cheese". *Journal of Dairy Research*, Vol. 24, pp. 235-241.

Schwartzberg, H.G. y Chao, R.Y., 1982. "Solute Diffusivities in Leaching Processes". *Food Technology*, Vol. 36, pp. 73-86.

Zorrilla, S.E. y Rubiolo, A.C., 1994. "Fynbo Cheese NaCl and KCl Changes during Ripening". *Journal of Food Science*, Vol. 59, pp. 972-975.

El movimiento de CO₂ en la matriz del queso fue modelado a través de soluciones adiabáticas de la ecuación de Fick. Las simplificaciones realizadas al modelar consistieron en considerar la geometría esférica uniformemente distribuida de los ojos, la constante concentración de CO₂ en los ojos y la hipótesis de que los ojos de mayor tamaño contribuyen más a la concentración global de CO₂ que los de menor tamaño. Se calcularon las concentraciones globales y el flujo total a través de la superficie del queso considerando las contribuciones individuales de cada ojo que poseen diferentes posiciones de los ojos en la matriz del queso.



Figura 1 - Evolución de la concentración de CO₂ (mg/kg) y el flujo (g/m²h) en queso Fynbo durante el tiempo de maduración. Condiciones: D = 1.2 x 10⁻² cm²/s, C₀ = 18 mM, r = 0.25 cm, N = 10.

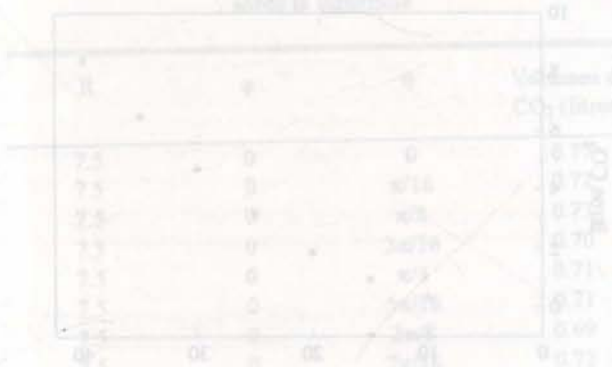


Figura 2 - Evolución de la concentración de CO₂ (mg/kg) en queso Fynbo durante el tiempo de maduración. Condiciones: D = 1.2 x 10⁻² cm²/s, C₀ = 18 mM, r = 0.25 cm.

El movimiento de CO₂ en la matriz del queso fue modelado a través de soluciones adiabáticas de la ecuación de Fick. Las simplificaciones realizadas al modelar consistieron en considerar la geometría esférica uniformemente distribuida de los ojos, la constante concentración de CO₂ en los ojos y la hipótesis de que los ojos de mayor tamaño contribuyen más a la concentración global de CO₂ que los de menor tamaño. Se calcularon las concentraciones globales y el flujo total a través de la superficie del queso considerando las contribuciones individuales de cada ojo que poseen diferentes posiciones de los ojos en la matriz del queso.



ENTALPIA DE POLPA DE ABACAXI E SOLUÇÃO DE SACAROSE

Suse B. Silva, Lincoln C. Neves F^o & Miriam D. Hubinger

Departamento de Engenharia de Alimentos

Faculdade de Engenharia de Alimentos - UNICAMP

13083-970 - Campinas - SP - Brasil



RESUMO

O conhecimento das propriedades termofísicas dos alimentos é de especial importância nos estudos de projeto e otimização de processos térmicos. No congelamento de alimentos, a entalpia é uma propriedade fundamental por indicar a energia que deve ser removida para congelar o produto. Neste trabalho, um calorímetro de mistura foi utilizado para a construção de curvas de entalpia-temperatura de dois sistemas (polpa de abacaxi e solução de sacarose). A partir dessas curvas foram obtidas curvas de calor específico-temperatura. Uma determinação experimental de ponto de início de congelamento também foi realizada. Os resultados obtidos para os dois sistemas, em diferentes faixas de concentração, foram analisados e algumas conclusões foram estabelecidas.

INTRODUÇÃO

O comportamento dos alimentos submetidos a processos térmicos é determinado, em grande parte, por suas propriedades termofísicas. O conhecimento dessas propriedades torna possível o projeto de equipamentos e a otimização de operações de processamento de alimentos. Entre as propriedades termofísicas de maior interesse encontramos a entalpia, o calor específico e o ponto de início de congelamento.

No congelamento de alimentos, a entalpia é a combinação do calor sensível e do calor latente. A remoção do calor latente ocorre ao longo de uma faixa de temperaturas, por isso o calor específico do produto congelado inclui uma porção de calor latente na entalpia e é considerado calor específico aparente. No presente trabalho, usaremos apenas a expressão calor específico para designar tal situação. Cada contribuição da entalpia total é função da temperatura e da fração de água congelada, naquele momento. A entalpia de vários alimentos em faixas de temperaturas de congelamento foi medida por Riedel (1951), Ramaswamy & Tung (1981), Kleeberg (1986), Hense (1990), Kerr et al. (1993), Lindsay & Lovatt (1994).

O calor específico e a entalpia têm sido frequentemente medidos através do método de mistura, do calorímetro adiabático ou do calorímetro diferencial de varredura (DSC). Às vezes, a medida é feita utilizando aparatos bem simples, como os usados por Hwang & Hayakawa (1979), Kleeberg (1986) e Hense (1990). Outros métodos, como o da placa condutora (Mohsenin, 1980), análise térmica, análise térmica diferencial e espectroscopia de ressonância nuclear magnética (Lind, 1991) também são citados.

O método calorimétrico de mistura tem sido utilizado com sucesso por muitos pesquisadores, entre eles: Vagenas & Marinou-Kouris (1990); López-Ramos et al. (1993); Rapusas & Driscoll (1995). As razões pelas quais esse método se encontra amplamente difundido são a sua simplicidade de execução e a possibilidade de ser utilizado com quantidades de amostras relativamente grandes. Esse último aspecto é importante, uma vez que muitos alimentos possuem estrutura heterogênea.

Estudos teóricos sobre a relação entalpia-temperatura têm sido conduzidos por vários pesquisadores, entre eles: Heldman (1974), Schwartzberg (1976, 1977, 1981), Chen (1985), Pham (1987), Pham et al. (1994), Lindsay & Lovatt (1994). A maioria dos estudos recentes têm seguido Schwartzberg (1976, 1977),

que desenvolve expressões para predição de calor específico e entalpia baseadas em relações termodinâmicas, com correções para a água ligada.

Neste trabalho são determinados a entalpia, o calor específico e o ponto de início de congelamento para polpa de abacaxi e um sistema modelo. Os sistemas modelos são extremamente úteis quando se deseja estudar processos ou propriedades termofísicas ou ainda verificar a exatidão de modelos de predição (Albin et al., 1979; Bakshi et al., 1985; Larkin & Steffe, 1987; Hegedusic et al. 1993; Lin, 1994; Miyawaki & Pongsawatmanit, 1994). O sistema modelo utilizado é constituído por solução aquosa de sacarose. Justifica-se a composição desse sistema, por ser o abacaxi constituído, aproximadamente, por 85% de água e apresentar 90% da massa seca composta por açúcares, principalmente sacarose (Bleinroth, 1987).

ASPECTOS TEÓRICOS

Schwartzberg (1976), partindo da equação de depressão do ponto de congelamento,

$$\frac{d(\ln a_w)}{dT} = \frac{M_w \cdot \lambda}{R \cdot T^2} \quad (1)$$

considerando a atividade de água, a_w , igual à fração molar de água, para alimentos com alto teor de umidade, chega à equação de predição de calor específico, c_p :

$$c_p = c_{pu} + (X_b - X_{wo}) \Delta c_p + E \cdot X_s \left[\frac{R \cdot T_o^2}{M_w \cdot t^2} - 0,8 \cdot \Delta c_p \right] \quad (2)$$

onde:

a_w Atividade de água

λ Calor latente de congelamento (J/kg)

Δc_p Diferença entre os calores específicos da água e do gelo (J/kg K)

c_{pu} Calor específico do alimento não congelado (J/kg K)

X_b Fração mássica de água ligada

X_{wo} Fração mássica de água antes do congelamento

X_s Fração mássica de sólidos solúveis

M_w	Peso molecular da água (kg/kgmol)
M_s	Peso molecular dos sólidos solúveis
E	M_s/M_w
R	Constante dos Gases (J/kmol K)
T_o	Temperatura absoluta do ponto de fusão da água (K)
t	Temperatura (°C)

A integração da Eq. (2) conduz a uma equação do tipo:

$$H = A + c_{pf} \cdot t + \frac{B}{t} \quad (3)$$

Na Eq. (3), $c_{pf} \cdot t$ é o componente de calor sensível, B/t o componente de calor latente e A uma constante de integração dependente da temperatura de referência utilizada. Neste trabalho, considera-se para entalpia de referência (entalpia igual a zero), a amostra congelada com temperatura igual a -40 °C. O valor de B é apresentado na Eq. (4):

$$B = \frac{E \cdot X_s \cdot R \cdot T_o^2}{M_w} \quad (4)$$

Os coeficientes A , c_{pf} e B podem ser obtidos por regressão das curvas de entalpia, enquanto o valor de $E \cdot X_s$, através da aplicação da Eq. (1) na temperatura de início de congelamento do alimento, t_{ic} (Schwartzberg, 1977):

$$E \cdot X_s \cong - \frac{M_w \cdot (X_{wo} - X_b) \cdot \lambda_{wo} \cdot t_{ic}}{R \cdot T_o^2} \quad (5)$$

Para temperaturas acima do ponto inicial de congelamento, t_{ic} , a entalpia pode ser aproximada por uma relação linear da temperatura:

$$H = H_o + c_{pu} \cdot t \quad (6)$$

O valor de t_{ic} pode ser obtido pela intersecção das curvas descritas pelas Eq. (3) e Eq. (6), que predizem a entalpia para temperaturas abaixo e acima do ponto inicial de congelamento, respectivamente. No ponto de início de congelamento as duas equações devem ser satisfeitas:

$$H_o + c_{pu} \cdot t = A + c_{pf} \cdot t + \frac{B}{t} \quad (7)$$

As curvas de calor específico podem ser obtidas a partir da derivação das curvas de entalpia.

MATERIAIS E MÉTODOS

Na etapa experimental foram utilizados dois sistemas básicos para determinação das propriedades termofísicas: um sistema real constituído de polpa de abacaxi e um sistema modelo constituído por uma solução aquosa de sacarose.

Os dois sistemas tiveram suas propriedades determinadas a duas concentrações: 15 e 25 °Brix. Esses valores representam a polpa de abacaxi congelada sem e com adição de açúcar, respectivamente. O valor de °Brix da polpa foi ajustado com o

auxílio de um xarope de sacarose à 65 °Brix. O abacaxi utilizado foi da variedade *Smooth Cayenne*, adquirido no CEASA-Campinas.

A polpa de abacaxi foi obtida submetendo-se a matéria-prima à lavagem com água clorada seguida de descascamento manual. Na seqüência a fruta passou por um triturador de facas e por um despolpador com peneira de 0,5 mm, foi pasteurizada (70 °C por 3 minutos) e refrigerada.

As propriedades termofísicas determinadas experimentalmente foram a entalpia e o ponto de início de congelamento. Os métodos e materiais necessários serão apresentados a seguir. A polpa de abacaxi foi caracterizada através da determinação de umidade, concentração de sólidos solúveis (°Brix), fibras, cinzas, açúcares totais e redutores. As soluções de sacarose tiveram apenas umidade, sólidos solúveis e açúcares determinados.

Ponto de Início de Congelamento. Para esta determinação, as amostras foram colocadas em tubos de capacidade de 5 ml, contendo um termopar conectado a um indicador de temperatura da marca Cole-Parmer, modelo 8536-25. O tubo foi imerso em um banho refrigerado (Optherm), com temperatura constante.

A temperatura do banho para determinação do ponto de início de congelamento foi selecionada a partir de ensaios preliminares. Após a imersão da amostra, sua temperatura era registrada a intervalos regulares de 5 segundos. O ponto de início de congelamento é caracterizado por um platô na curva temperatura versus tempo. Dessa forma a temperatura do banho era ajustada em torno de 5 a 10 °C abaixo da t_{ic} , de maneira que o platô ficasse melhor definido. Todas as medidas foram feitas em triplicata. O procedimento utilizado foi semelhante ao descrito por Telis (1996).

Entalpia. A entalpia foi determinada pelo método calorimétrico de mistura. O método baseia-se no balanço de energia após o equilíbrio térmico, entre uma amostra de massa e temperatura conhecidas e uma quantidade de água de massa e temperatura também conhecidas, colocadas no interior de um recipiente isolado termicamente (calorímetro).

O calorímetro utilizado consistia de uma garrafa térmica (frasco Dewar) com um termopar inserido num orifício na tampa e conectado a um indicador de temperatura (Cole-Parmer modelo 8536-25).

As amostras utilizadas no experimento foram embaladas, pesadas e congeladas. As embalagens mediam 8x4 cm e eram constituídas por um filme flexível de poliéster, alumínio e polietileno (gramatura igual a 66g/m²), com as bordas termosseladas.

Antes de iniciar o experimento, as amostras tinham sua temperatura estabilizada em banho, durante aproximadamente três horas. A temperatura da amostra, ao início do experimento, era considerada igual à temperatura do banho, t .

Depois de transcorrido o tempo de estabilização das amostras, uma massa conhecida de água, m_w , com calor específico também conhecido, c_{pw} , era colocada no calorímetro e sua temperatura inicial era medida, t_{wo} . A seguir, uma amostra de massa m_s e temperatura inicial t era colocada no calorímetro e todo o conteúdo era agitado até que o equilíbrio fosse atingido. Este era evidenciado, após algum tempo de agitação, quando a temperatura medida no interior do calorímetro não mais variava, ou seja, alcançava-se a temperatura de equilíbrio, t_e . A variação de entalpia total da amostra, ΔH_s , foi calculada através da Eq. (8), obtida a partir do balanço de energia no equilíbrio.

$$\Delta H_a = \frac{m_w \cdot c_{pw} \cdot (t_c - t_{wo}) + q_{cal}}{m_a} \quad (8)$$

O valor de q_{cal} na Eq. (8) refere-se à capacidade térmica do calorímetro e da embalagem da amostra, na faixa de temperaturas em que foi realizado o experimento. Esse valor foi determinado através da calibração do calorímetro (contendo uma embalagem de amostra vazia) com água destilada congelada. O procedimento utilizado é semelhante àquele empregado para as amostras e se encontra descrito em Kleeberg (1986) e Hense (1990).

Para a construção das curvas de entalpia, os valores de ΔH_a foram plotados em um gráfico Entalpia versus Temperatura e ajustados. O procedimento para o ajuste e obtenção do ponto de início de congelamento segue o sugerido por Pham (1987).

Os pontos acima da temperatura de início de congelamento foram ajustados para uma reta, Eq. (6), e os pontos situados abaixo, foram ajustados para uma curva do tipo da Eq. (3). Os coeficientes H_o , c_{pu} , A , c_{pl} e B foram obtidos por regressão dos dados de entalpia.

As curvas de entalpia foram ajustadas pelo método dos mínimos quadrados e o ponto de início de congelamento foi obtido pela intersecção das duas curvas descritas pelas Eq. (3) e Eq. (6). Esses cálculos foram conseguidos com o auxílio do aplicativo Matlab 4.0. for Windows.

Calor Específico. As curvas de calor específico foram obtidas por derivação numérica das curvas de entalpia. Como auxiliar no cálculo foi usado o aplicativo Matlab 4.0. for Windows.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os dados experimentais de entalpia (-40 a +20 °C) foram ajustados utilizando o modelo de Schwartzberg (1976), usando o método dos mínimos quadrados.

Tabela 1 - Parâmetros de ajuste da Eq.(3)

Sistema	A (kJ/kg)	c_{pl} (kJ/kgK)	B (kJK/kg)	R^2 *
Sol. sacarose 15 °Brix	54,5	1,54	-285	0,998
Sol. sacarose 25 °Brix	109	2,99	-411	0,982
Polpa de abacaxi 15 °Brix	45,2	1,34	-338	0,995
Polpa de abacaxi 25 °Brix	85,7	2,43	-456	0,981

* R^2 representa o coeficiente de correlação entre os dados experimentais de entalpia e os valores previstos pelo modelo ajustado.

Tabela 2 - Parâmetros de ajuste da Eq. (6)

Sistema	H_o (kJ/kg)	c_{pu} (kJ/kgK)	R^2
Sol. sacarose 15 °Brix	309	3,22	0,996
Sol. sacarose 25 °Brix	326	2,88	0,993
Polpa de abacaxi 15 °Brix	313	3,78	0,988
Polpa de abacaxi 25 °Brix	311	2,18	0,990

Pode-se notar pelas Tabela 1 e 2, que houve um bom ajuste das curvas aos dados experimentais. Provavelmente, uma correlação ainda melhor poderia ser obtida se um maior número de pontos experimentais tivesse sido coletado.

As Figuras 1 e 2 apresentam as curvas de entalpia para os dois sistemas estudados. Há uma semelhança entre os valores de entalpia para os dois sistemas à mesma concentração, no entanto apenas isso não assegura que a curva ajustada de entalpia para a solução de sacarose possa representar os valores de entalpia para a polpa de abacaxi. Para verificar se o modelo de entalpia para a solução de sacarose pode representar dados de polpa de abacaxi, procedeu-se a uma avaliação visual do gráfico de resíduos. Embora essa análise seja um procedimento subjetivo, não deve ser menosprezada (Barros Neto et al., 1985). Como forma de padronizar os resíduos, seus valores foram divididos pela média dos valores observados.

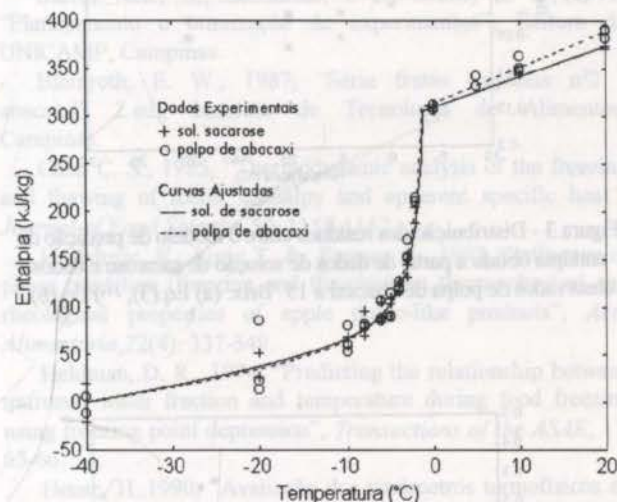


Figura 1 - Curvas de entalpia ajustadas e dados experimentais de sistemas a 15 °Brix

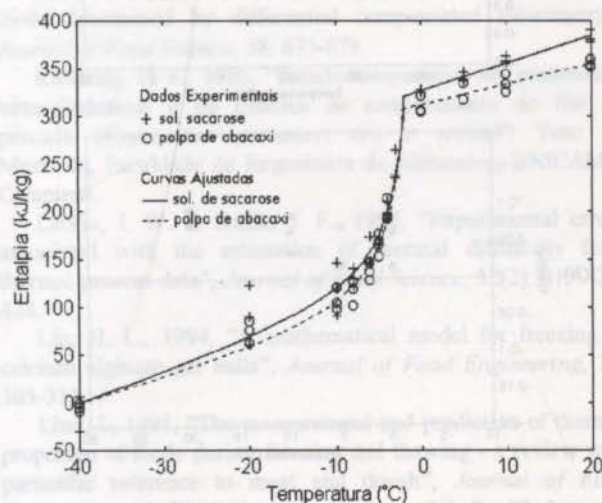


Figura 2 - Curvas de entalpia ajustadas e dados experimentais de sistemas a 25 °Brix

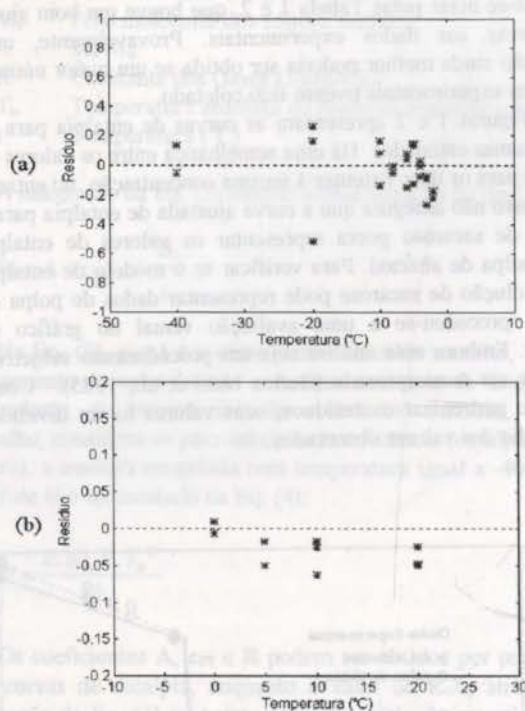


Figura 3 - Distribuição dos resíduos entre o modelo de predição de entalpia obtido a partir de dados de solução de sacarose e dados observados de polpa de abacaxi a 15 °Brix. (a) Eq.(3), (b) Eq.(6).

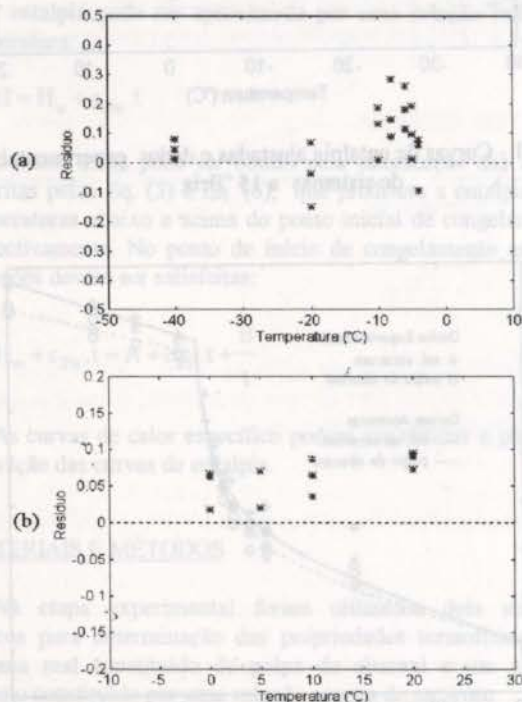


Figura 4 - Distribuição dos resíduos entre o modelo de predição de entalpia obtido a partir de dados de solução de sacarose e dados observados de polpa de abacaxi a 25 °Brix. (a) Eq.(3), (b) Eq.(6).

Nas Figuras 3.(b), 4.(a) e 4.(b) os resíduos tendem a se deslocar para cima ou para baixo da linha pontilhada, enquanto que na Figura 3.(a), parece haver uma distribuição aleatória dos mesmos, em torno da linha de resíduo igual a zero. Pode-se considerar o modelo satisfatório quando a distribuição dos resíduos é aleatória.

Assim, com base nessa análise, conclui-se que apenas o modelo de predição obtido a partir da solução de sacarose, a 15 °Brix, abaixo do ponto de congelamento, pode ser usado para calcular a entalpia da polpa de abacaxi, nessa mesma concentração e faixa de temperaturas. A diferença observada entre as duas curvas da Figura 2 indica que a entalpia de polpa de abacaxi a 25 °Brix não pode ser representada pelo modelo obtido a partir de solução de sacarose à mesma concentração. A distribuição não aleatória dos resíduos, observada na Figura 4, confirma esse fato. Parece haver uma influência maior da composição do soluto no comportamento dos sistemas, à medida que a concentração aumenta. Soluções mais diluídas provavelmente sejam mais semelhantes entre si e portanto apresentam comportamento físicos similares. Talvez isto explique o fato de se conseguir, abaixo do ponto de congelamento, prever dados de entalpia de polpa de abacaxi a 15 °Brix usando um modelo obtido a partir de uma solução de sacarose nessa mesma concentração.

A intersecção das curvas descritas pelas Eq.(3) e Eq.(6) define o ponto de início de congelamento, t_{ic} , como dito anteriormente. Os pontos de início de congelamento obtidos por este método e aqueles obtidos experimentalmente são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3 - Ponto de Início de Congelamento

Sistema	t_{ic} experimental (°C)	t_{ic} calculado (°C)
Sol. sacarose 15 °Brix	-1,3 ± 0,1	-1,2
Sol. sacarose 25 °Brix	-2,3 ± 0,1	-2,0
Polpa de abacaxi 15 °Brix	-2,1 ± 0,1	-1,4
Polpa de abacaxi 25 °Brix	-3,3 ± 0,1	-2,2

Schwartzberg (1976) considera os sistemas alimentícios de alto conteúdo de umidade como soluções ideais e baseado nisso desenvolve seu modelo. Pham (1987), quando propõe o método para cálculo do ponto de início de congelamento com base nas curvas de entalpia, também faz uso dessa aproximação. Soluções de sacarose de alto conteúdo de umidade podem ser mais facilmente aproximadas a sistemas ideais, do que a polpa de abacaxi. Isso provavelmente explique a boa concordância entre os valores experimentais e calculados para o ponto de início de congelamento obtidos para o sistema modelo.

O valor encontrado para o ponto de início de congelamento da polpa de abacaxi a 15 °Brix é próximo ao apresentado por ASHRAE (1967 citado por Polley et al. 1980) para abacaxi maduro com 85% de umidade, que é -1,0 °C. A variedade do abacaxi não é citada. Para polpa de abacaxi com adição de açúcar (25 °Brix) nenhuma referência foi encontrada.

Na Tabela 2, também são apresentados os valores de calor específico, acima do ponto de congelamento. Como indica o coeficiente de correlação, o calor específico (0 a 20 °C) pode ser

considerado constante em relação à temperatura. Os valores obtidos para $c_{p,u}$ de soluções de sacarose foram ligeiramente menores aos referenciados por Short (1955 citado por Okos, 1986).

Valores de calor específico para polpa de abacaxi não foram encontrados na literatura, no entanto podemos comparar o calor específico de polpa de abacaxi sem adição de açúcar (15 °Brix) com sucos de frutas. O calor específico de sucos de fruta apresentado por Okos (1986), situa-se entre 3 a 4 kJ/kg K, para temperaturas acima do ponto de início de congelamento, bastante próximo ao mostrado na Tabela 2.

As curvas de calor específico, obtidas a partir da derivação das curvas de entalpia, apresentaram um comportamento satisfatório, semelhante ao encontrado em bibliografia. Um exemplo pode ser observado na Figura 5, referente à polpa de abacaxi a 15 °Brix. Abaixo do ponto de início de congelamento o calor específico é nitidamente dependente da temperatura, enquanto que para temperaturas acima desse ponto, é constante.

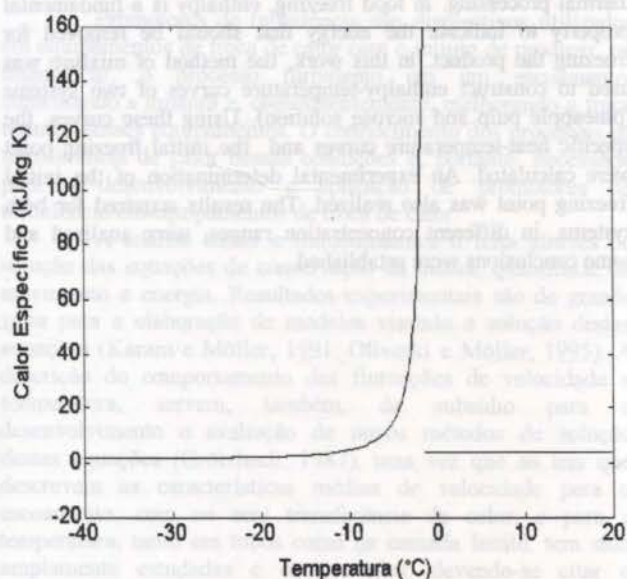


Figura 5 - Calor específico de polpa de abacaxi a 15 °Brix

CONCLUSÕES

O modelo de Schwartzberg (1976) descreveu bem a relação entalpia-temperatura para todos os sistemas testados e forneceu curvas de calor específico coerentes. Na bibliografia pesquisada, não foram encontrados valores de entalpia para soluções de sacarose e polpa de abacaxi, o que nos leva a concluir que este trabalho é uma primeira fonte de dados dessa propriedade para esses materiais.

A tentativa de propor um sistema modelo que representasse a polpa de abacaxi apenas produziu resultados satisfatórios numa concentração de 15 °Brix, abaixo do ponto de congelamento. Em sistemas um pouco mais concentrados parece haver influência da composição do soluto. Outras tentativas poderiam ser realizadas com sistemas modelo de composição mais próxima à polpa de abacaxi, como por exemplo com

adição de ácido cítrico, gomas e outros açúcares, além da sacarose.

As diferenças entre os valores experimentais e os preditos para o ponto de início de congelamento foram pequenas para o caso de soluções de sacarose. Para a polpa de abacaxi, as diferenças são um pouco maiores, provavelmente devido ao fato do método de predição empregado considerar os sistemas com soluções ideais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Albin, F. V., Narayana, K. B. Murthy, S. S. & Murthy V. K., 1979, "Thermal diffusivities of some unfrozen and frozen food models", *Journal Food Technology*, 14: 361-367.
- Bakshi, A. S.; Smith, D. E. & Gay, S. A., 1985, "Effect of sweeteners and stabilisers on the thermal conductivity of ice cream", *Milchwissenschaft*, 40(8): 449-453.
- Barros Neto, B., Scarminio, I. S., Bruns, R. E., 1995, "Planejamento e otimização de experimentos", Editora da UNICAMP, Campinas.
- Bleinroth, E. W., 1987, "Série frutas tropicais nº2 - abacaxi", 2.ed., Instituto de Tecnologia de Alimentos, Campinas.
- Chen C. S., 1985, "Thermodynamic analysis of the freezing and thawing of foods: enthalpy and apparent specific heat", *Journal of Food Science*, 50: 1158-1162.
- Hegedusic, V.; Loric T. & Parmac A., 1993, "Influence of phase transition (freezing and thawing) on thermophysical and rheological properties of apple purée-like products", *Acta Alimentaria*, 22(4): 337-349.
- Heldman, D. R., 1974, "Predicting the relationship between unfrozen water fraction and temperature during food freezing using freezing point depression", *Transactions of the ASAE*, 17: 63-66.
- Hense, H., 1990, "Avaliação dos parâmetros termofísicos de congelamento de cação", Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP, Campinas.
- Hwang, M. P. & Hayakawa, K. A., 1979, "Specific heat calorimeter of foods", *Journal of Food Science*, 44: 435-438.
- Kerr, W. L.; Ju, J. & Reid, D. S., 1993, "Enthalpy of frozen foods determined by differential compensated calorimetry", *Journal of Food Science*, 58: 675-679.
- Kleeberg, H. F., 1986, "Estudo comparativo dos parâmetros termodinâmicos e da cinética de congelamento de filé de pescada (*Cynoscion petranus*) cru e cozido", Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP, Campinas.
- Larkin, J. W. & Steffe, J. F., 1987, "Experimental errors associated with the estimation of thermal diffusivity from thermal process data", *Journal of Food Science*, 52(2): 419-424, 428.
- Lin, H. L., 1994, "A mathematical model for freezing of calcium alginate gel balls", *Journal of Food Engineering*, 21: 305-313.
- Lind, I., 1991, "The measurement and prediction of thermal properties of foods during freezing and thawing - a review with particular reference to meat and dough", *Journal of Food Engineering*, 13: 285-319.
- Lindsay, D. T. & Lovatt, S. J., 1994, "Further enthalpy values of foods measured by an adiabatic calorimeter", *Journal of Food Engineering*, 23: 609-620.

López-Ramos A.; Palmisano E.; Dombey A.; Pimentel, D.; Fatés D. & González-Mendizábal D., 1993, "Thermal properties of tropical fruits and vegetables", *Revista Española de Ciencia e Tecnología de Alimentos*, 33(3): 271-283.

Miyawaki, O. & Pongsawatmanit, R., 1994, "Mathematical analysis of the effective thermal conductivity of food materials in the frozen state". *Bioscience, Biotechnology and Biochemistry*, 58(7): 1222-1225.

Mohsenin, N. N., 1980, "Thermal properties of foods and agricultural materials", Gordon and Breach Science Publishers, Inc., New York.

Okos, M. R., 1986, "Physical and chemical properties of food", *ASAE publication*, 09-86.

Pham, Q. T., 1987, "Calculation of bound water in frozen food", *Journal of Food Science*, 52(1): 210-212.

Pham, Q. T.; Wee, H. K.; Kemp, R. M. & Lindsay, D. T., 1994, "Determination of the enthalpy of foods by an adiabatic calorimeter", *Journal of Food Engineering*, 21: 137-156.

Polley, S. L., Snyder, O. P. & Kotnour, P., (1980) "A compilation of thermal properties of foods", *Food Technology*, 34(11): 76-94.

Ramaswamy, H. S. & Tung, M. A., 1981, "Thermophysical properties of apples in relation to freezing", *Journal of Food Science*, 46: 724-728.

Rapusas, R. S. & Driscoll, R. H., 1995 "Thermophysical properties of fresh and dried white onions slices", *Journal of Food Engineering*, 24: 149-164.

Riedel, L., 1951, "The refrigerating effect required to freeze fruits and vegetables". *Refrigerating Engineering*, 59(7):670-673.

Schwartzberg, H. C., 1976, "Effective heat capacities for the freezing and thawing of foods", *Journal of Food Science*, 41: 152-156.

Schwartzberg, H. C., 1977, "Effective heat capacities for the freezing and thawing of foods", *Int. Inst. Refrig. Bull. Annexe 1*.

Schwartzberg, H. C., 1981, "Mathematical analysis of the freezing and thawing of foods", *AICHE Summer Meeting*, Detroit, USA, August.

Telis, V. R. N., 1996, "Estudo das alterações estruturais na gema de ovo durante o congelamento", Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP, Campinas.

Vagenas, G. K. & Marinos- Kouris D., 1990, "Thermal properties of raisins", *Journal of Food Engineering*, 11: 147-158.

ABSTRACT

The knowledge of thermophysical properties of foods is of special importance on studying design and optimization of thermal processing. In food freezing, enthalpy is a fundamental property to indicate the energy that should be removed for freezing the product. In this work, the method of mixture was used to construct enthalpy-temperature curves of two systems (pineapple pulp and sucrose solution). Using these curves, the specific heat-temperature curves and the initial freezing point were calculated. An experimental determination of the initial freezing point was also realized. The results acquired for both systems, in different concentration ranges, were analysed and some conclusions were established.

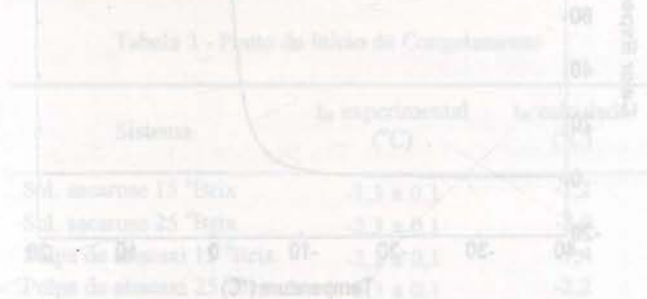


Figura 2 - Calor específico de polpa de abacaxi a 12 bits

Figura 3 - Calor específico de solução de açúcar a 12 bits

Figura 4 - Calor específico de solução de açúcar a 20 bits

Figura 5 - Calor específico de solução de açúcar a 30 bits

Figura 6 - Calor específico de solução de açúcar a 40 bits

Figura 7 - Calor específico de solução de açúcar a 50 bits

Figura 8 - Calor específico de solução de açúcar a 60 bits

Figura 9 - Calor específico de solução de açúcar a 70 bits

Figura 10 - Calor específico de solução de açúcar a 80 bits

Figura 11 - Calor específico de solução de açúcar a 90 bits

Figura 12 - Calor específico de solução de açúcar a 100 bits

Figura 13 - Calor específico de solução de açúcar a 110 bits

Figura 14 - Calor específico de solução de açúcar a 120 bits

Figura 15 - Calor específico de solução de açúcar a 130 bits

Figura 16 - Calor específico de solução de açúcar a 140 bits

Figura 17 - Calor específico de solução de açúcar a 150 bits

Figura 18 - Calor específico de solução de açúcar a 160 bits

Figura 19 - Calor específico de solução de açúcar a 170 bits

Figura 20 - Calor específico de solução de açúcar a 180 bits

Figura 21 - Calor específico de solução de açúcar a 190 bits

Figura 22 - Calor específico de solução de açúcar a 200 bits

Figura 23 - Calor específico de solução de açúcar a 210 bits

Figura 24 - Calor específico de solução de açúcar a 220 bits

Figura 25 - Calor específico de solução de açúcar a 230 bits

Figura 26 - Calor específico de solução de açúcar a 240 bits

Figura 27 - Calor específico de solução de açúcar a 250 bits

Figura 28 - Calor específico de solução de açúcar a 260 bits

Figura 29 - Calor específico de solução de açúcar a 270 bits

Figura 30 - Calor específico de solução de açúcar a 280 bits

Figura 31 - Calor específico de solução de açúcar a 290 bits

Figura 32 - Calor específico de solução de açúcar a 300 bits

Figura 33 - Calor específico de solução de açúcar a 310 bits

Figura 34 - Calor específico de solução de açúcar a 320 bits

Figura 35 - Calor específico de solução de açúcar a 330 bits

Figura 36 - Calor específico de solução de açúcar a 340 bits

Figura 37 - Calor específico de solução de açúcar a 350 bits

Figura 38 - Calor específico de solução de açúcar a 360 bits

Figura 39 - Calor específico de solução de açúcar a 370 bits

Figura 40 - Calor específico de solução de açúcar a 380 bits

Figura 41 - Calor específico de solução de açúcar a 390 bits

Figura 42 - Calor específico de solução de açúcar a 400 bits

Figura 43 - Calor específico de solução de açúcar a 410 bits

Figura 44 - Calor específico de solução de açúcar a 420 bits

Figura 45 - Calor específico de solução de açúcar a 430 bits

Figura 46 - Calor específico de solução de açúcar a 440 bits

Figura 47 - Calor específico de solução de açúcar a 450 bits

Figura 48 - Calor específico de solução de açúcar a 460 bits

Figura 49 - Calor específico de solução de açúcar a 470 bits

Figura 50 - Calor específico de solução de açúcar a 480 bits

Figura 51 - Calor específico de solução de açúcar a 490 bits

Figura 52 - Calor específico de solução de açúcar a 500 bits

Figura 53 - Calor específico de solução de açúcar a 510 bits

Figura 54 - Calor específico de solução de açúcar a 520 bits

Figura 55 - Calor específico de solução de açúcar a 530 bits

Figura 56 - Calor específico de solução de açúcar a 540 bits

Figura 57 - Calor específico de solução de açúcar a 550 bits

Figura 58 - Calor específico de solução de açúcar a 560 bits

Figura 59 - Calor específico de solução de açúcar a 570 bits

Figura 60 - Calor específico de solução de açúcar a 580 bits

Figura 61 - Calor específico de solução de açúcar a 590 bits

Figura 62 - Calor específico de solução de açúcar a 600 bits

Figura 63 - Calor específico de solução de açúcar a 610 bits

Figura 64 - Calor específico de solução de açúcar a 620 bits

Figura 65 - Calor específico de solução de açúcar a 630 bits

Figura 66 - Calor específico de solução de açúcar a 640 bits

Figura 67 - Calor específico de solução de açúcar a 650 bits

Figura 68 - Calor específico de solução de açúcar a 660 bits

Figura 69 - Calor específico de solução de açúcar a 670 bits

Figura 70 - Calor específico de solução de açúcar a 680 bits

Figura 71 - Calor específico de solução de açúcar a 690 bits

Figura 72 - Calor específico de solução de açúcar a 700 bits

Figura 73 - Calor específico de solução de açúcar a 710 bits

Figura 74 - Calor específico de solução de açúcar a 720 bits

Figura 75 - Calor específico de solução de açúcar a 730 bits

Figura 76 - Calor específico de solução de açúcar a 740 bits

Figura 77 - Calor específico de solução de açúcar a 750 bits

Figura 78 - Calor específico de solução de açúcar a 760 bits

Figura 79 - Calor específico de solução de açúcar a 770 bits

Figura 80 - Calor específico de solução de açúcar a 780 bits

Figura 81 - Calor específico de solução de açúcar a 790 bits

Figura 82 - Calor específico de solução de açúcar a 800 bits

Figura 83 - Calor específico de solução de açúcar a 810 bits

Figura 84 - Calor específico de solução de açúcar a 820 bits

Figura 85 - Calor específico de solução de açúcar a 830 bits

Figura 86 - Calor específico de solução de açúcar a 840 bits

Figura 87 - Calor específico de solução de açúcar a 850 bits

Figura 88 - Calor específico de solução de açúcar a 860 bits

Figura 89 - Calor específico de solução de açúcar a 870 bits

Figura 90 - Calor específico de solução de açúcar a 880 bits

Figura 91 - Calor específico de solução de açúcar a 890 bits

Figura 92 - Calor específico de solução de açúcar a 900 bits

Figura 93 - Calor específico de solução de açúcar a 910 bits

Figura 94 - Calor específico de solução de açúcar a 920 bits

Figura 95 - Calor específico de solução de açúcar a 930 bits

Figura 96 - Calor específico de solução de açúcar a 940 bits

Figura 97 - Calor específico de solução de açúcar a 950 bits

Figura 98 - Calor específico de solução de açúcar a 960 bits

Figura 99 - Calor específico de solução de açúcar a 970 bits

Figura 100 - Calor específico de solução de açúcar a 980 bits

Figura 101 - Calor específico de solução de açúcar a 990 bits

Figura 102 - Calor específico de solução de açúcar a 1000 bits



ESTUDO EXPERIMENTAL DA VARIÂNCIA DA TEMPERATURA EM TUBOS CIRCULARES COM PROMOTORES DE TURBULÊNCIA INTERNOS

Rosa L. D. Blanco & Sergio V. Möller

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS, Porto Alegre, RS



RESUMO

Este trabalho apresenta o estudo experimental das flutuações de temperatura no escoamento de ar em um duto de seção circular aquecido, com promotores de turbulência internos, os quais consistem de helicóides de cobre de diferentes diâmetros. Microtermopares são utilizados para as medições de temperatura e de suas flutuações. A aquisição e análise estatística dos dados é realizada por meio de um Analizador de Fourier. Os resultados experimentais para tubos com promotores internos é comparado com os resultados obtidos em tubos lisos, sendo feita a análise do comportamento da variância através da distribuição das escalas de turbulência para a flutuação da temperatura.

INTRODUÇÃO

Promotores de turbulência são dispositivos utilizados em equipamentos de troca de calor com o intuito de produzir, ou intensificar, o processo turbulento em um escoamento, aumentando a mistura e, conseqüentemente, melhorando a troca térmica nesses equipamentos. O conhecimento dos processos de transferência de calor nessas condições é, portanto, necessário para o desenvolvimento e aplicação de promotores de turbulência em equipamentos de troca de calor.

A análise termo e fluidodinâmica é feita através da solução das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Resultados experimentais são de grande valia para a elaboração de modelos visando a solução destas equações (Karam e Möller, 1991; Oliveski e Möller, 1995). A descrição do comportamento das flutuações de velocidade e temperatura, servem, também, de subsídio para o desenvolvimento e avaliação de novos métodos de solução destas equações (Grötzbach, 1987), uma vez que as leis que descrevem as características médias de velocidade para o escoamento, com ou sem transferência de calor, e para a temperatura, tanto em tubos como na camada limite, tem sido amplamente estudadas e comprovadas, devendo-se citar o clássico trabalho de Nikuradse (1930) e, mais recentemente, Zukauskas e Slanciauskas (1987) e Kirillov e Levchenko (1989).

A introdução de rugosidades ou promotores de turbulência em dutos ou canais, e suas conseqüências, tem sido objeto de estudos de diferentes autores, desde o próprio Nikuradse (1950) e, mais recentemente, Rehme (1978), Chiou (1987) e Kim e Webb (1993). Estes trabalhos mostram, em linhas gerais, as características dos parâmetros envolvidos e confirmam o fato de que a inserção de rugosidades ou promotores de turbulência, aumenta a taxa de transferência de quantidade de movimento, e, nos dutos aquecidos, de calor.

A análise de escoamentos turbulentos é feita, classicamente adotando-se a hipótese de Reynolds, segundo a qual, separa-se a média temporal das componentes dos campos de velocidade e de pressão da parte flutuante dessas quantidades. Nos problemas onde ocorre transferência de calor, também a temperatura é dividida em sua parte média temporal e sua parte flutuante (Hinze, 1975). Devido as características aleatórias das flutuações, a análise estatística destes parâmetros faz-se necessária.

O objetivo deste trabalho é realizar a análise experimental da variância das flutuações de temperatura em

escoamento turbulento em um duto circular aquecido e com helicóides internos. Com este fim, as funções de densidade autoespectral e autocorrelação são utilizadas para se obter informações sobre as escalas de comprimento e de tempo, bem como sobre a natureza do processo de transferência de calor neste tipo de geometria, comparando-se com os resultados obtidos em dutos circulares lisos (Blanco, 1996).

PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

A seção de testes consiste em um tubo de cobre de 40 mm de diâmetro interno e 5,0 m de comprimento dos quais 1,2 m são aquecidos eletricamente, correspondendo a região da descarga do ar que é insuflado por meio de um ventilador centrífugo. Os perfis de velocidade e de temperatura foram medidos radialmente a uma seção, aproximadamente 30 mm antes da descarga, no interior do tubo. O perfil de velocidade foi medido por meio de um tubo de Pitot de diâmetro externo de 1,3 mm. A temperatura e suas flutuações foram medidas por intermédio de microtermopares, construídos e calibrados para esta finalidade (Blanco e Möller, 1992). A parte flutuante da temperatura é amplificada e seu comportamento estudado através de um analisador de Fourier, Bruel&Kjaer, modelo 2034. Durante os experimentos um termopar é colocado fixo no centro do tubo, enquanto que o outro é deslocado radialmente da parede para o centro do tubo. O posicionamento do tubo de Pitot, bem como o do termopar na posição variável, é feita através de um posicionador micrométrico.

A utilização do analisador de Fourier permite o estudo do sinal dos termopares através de funções estatísticas de autoespectros e correlações. A observação do registro da temperatura no tempo é realizada em uma faixa de frequência de 0 Hz a 200 Hz. Os registros das funções foram feitos para um intervalo de 2,0 Hz a 200Hz, eliminando-se assim o sinal DC (0 Hz), que aparece no início da escala. As funções de autoespectro foram obtidas através de amostragens de 500 blocos, cada qual com 1024 elementos.

Para minimizar-se a influência da frequência da rede (60 Hz), fez-se uma retificação trifásica da entrada de alimentação do aquecimento da bancada, atenuando-se a frequência de 60 Hz e dando origem a uma frequência de 360 Hz, e suas harmônicas, já fora do intervalo de frequências de interesse. A tensão resultante desta conversão e aplicada à resistência foi de 206 V, sendo o valor da resistência de 34 Ω .

Os promotores de turbulência foram construídos através da introdução de helicóides de fio de cobre com diferentes diâmetros e um passo de aproximadamente 30 mm cada. Uma vista esquemática da parte aquecida da seção de testes bem como dos promotores de turbulência está mostrada na Figura 1. A Tabela 1 lista as geometrias de helicóides utilizadas bem como as condições do escoamento investigadas.

Os parâmetros básicos obtidos nos experimentos foram determinados a partir de cálculos efetuados com um programa computacional desenvolvido para este fim (Brancher et al. 1993).

Tabela 1 Características dos escoamentos investigados:

e/R	e mm	aquecimento	Re	fator de atrito - λ
0,0	0,0	não	$5,4 \cdot 10^4$	0,021
		sim	$3,81 \cdot 10^4$	0,020
0,09	1,8	não	$2,26 \cdot 10^4$	0,038
		sim	$2,39 \cdot 10^4$	0,063
0,11	2,2	não	$1,99 \cdot 10^4$	0,068
		sim	$2,70 \cdot 10^4$	0,115
0,14	2,8	não	$1,83 \cdot 10^4$	0,27
		sim	$2,60 \cdot 10^4$	0,204

RESULTADOS

A Figura 2 apresenta o perfil de velocidade adimensional logarítmico U^+ , como função da posição adimensional y^+ em todas as medições descritas na Tabela 1. A curva teórica mostrada nesta Figura, para referência dos valores, corresponde à clássica "Lei da Parede" para o escoamento isotérmico em dutos circulares lisos estabelecida por Nikuradse (1932). Pode-se verificar o efeito produzido pela inserção dos helicóides, mantendo, de forma geral, a mesma inclinação que a curva obtida por Nikuradse para rugosidades produzidas por meio da deposição de grãos de areia no tubo.

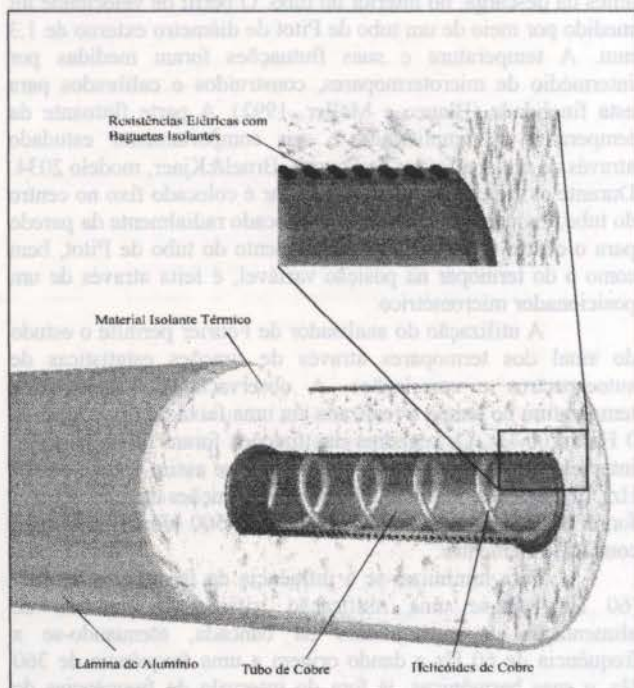


Figura 1: Vista esquemática da seção aquecida, mostrando os promotores de turbulência.

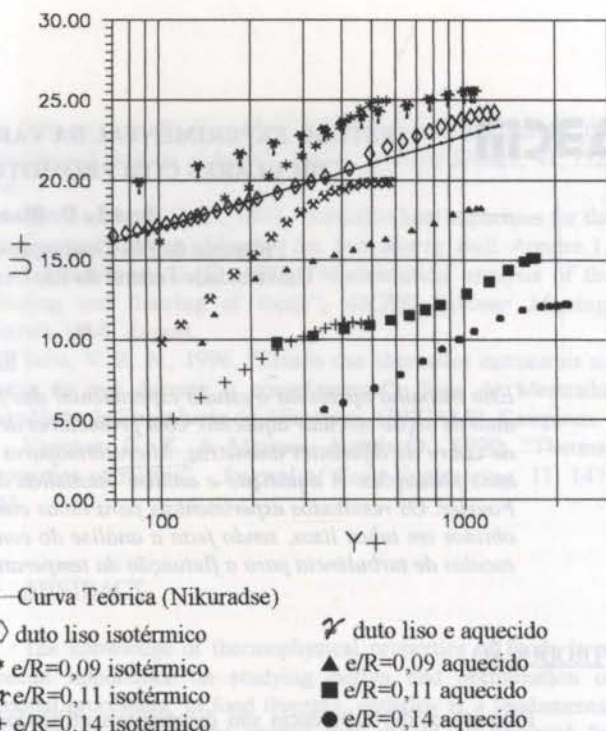


Figura 2. Perfil de velocidade adimensional logarítmico, comparado com a "Lei da Parede" de Nikuradse (1932) para tubos lisos.

Os mesmos resultados, com exceção dos tubos lisos, estão mostrados na Figura 3 como função da posição y/e . A curva teórica corresponde, neste caso à curva sugerida por Nikuradse (1950) para tubos rugosos.

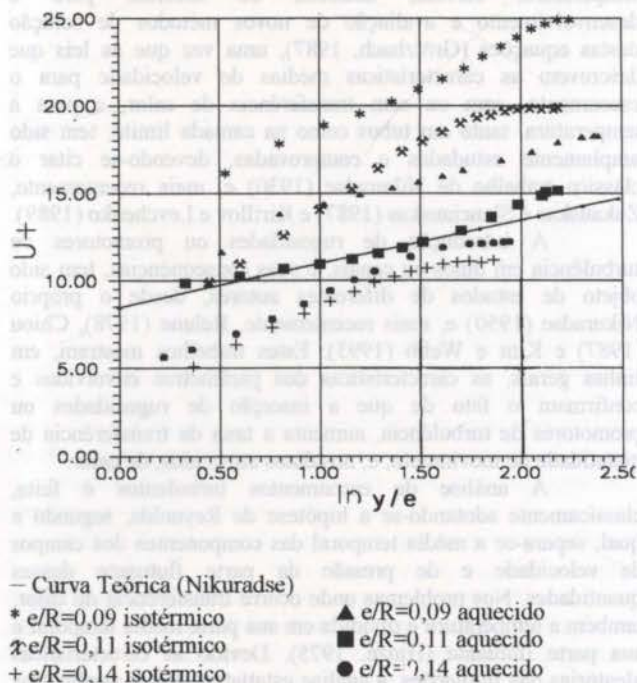


Figura 3. Perfil de velocidade adimensional comparado com a lei de distribuição de velocidade de Nikuradse (1950) para tubos rugosos.

O perfil de temperatura adimensional T^+ , como função da posição adimensional $Y+t$, sendo $Y+t$ dado pelo produto de Y com o número de Prandtl, Pr , em todas as medições descritas na Tabela 1, está apresentado na Figura 4. A curva teórica mostrada foi proposta por Kirillov e Levchenko (1989) para tubo liso aquecido. Neste caso, constata-se uma concordância dentro de uma faixa de diferença máxima de $\pm 5\%$, mesmo para os dados dos tubos rugosos.

A Figura 5 mostra, para várias posições ao longo de um raio, até o centro do duto, a função de autocorrelação do sinal flutuante de temperatura, $R_{TT}(\tau)$, definida por

$$R_{TT}(\tau) = \frac{1}{t_b} \int_0^{t_b} T(t) \cdot T(t + \tau) dt \quad (1)$$

onde t_b é um tempo adequado de observação e τ o tempo de retardo da função. Estes resultados estão normalizados por meio do valor médio quadrático da flutuação de temperatura

$$C_{TT} = \frac{R_{TT}(\tau)}{R_{TT}(0)} \quad (2)$$

onde $R_{TT}(0)$ é o valor médio quadrado da flutuação de temperatura para um tempo de deslocamento, τ , igual a zero, isto é,

$$R_{TT}(0) = \overline{T'^2} \quad (3)$$

Em geral, as curvas de autocorrelação indicam longos intervalos de tempo (no eixo horizontal tem-se o tempo total de 2,0 s) em que as flutuações de temperatura se correlacionam. Isto indica a existência de grandes escalas de tempo e, conseqüentemente, de comprimento, para a flutuação da temperatura no escoamento turbulento neste tipo de canal investigado. Pode-se observar, também, que a medida em que se aproxima do centro do tubo, as inclinações das curvas tendem a ficar menos acentuadas, com maiores áreas, principalmente no caso do helicóide de maior diâmetro.

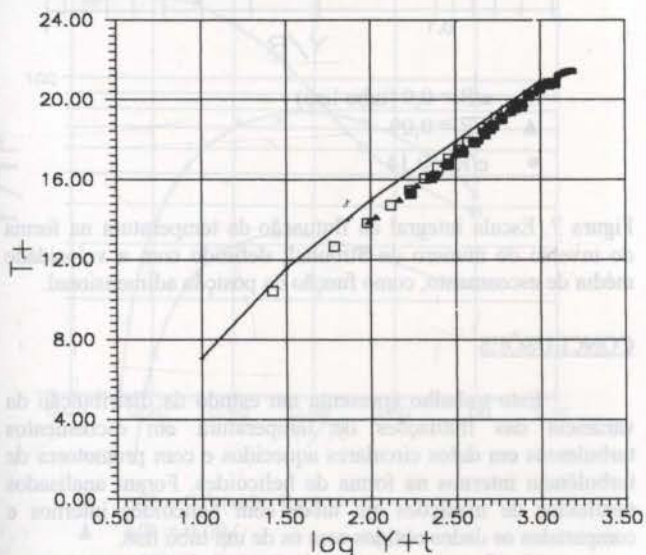


Figura 4. Perfil de temperatura adimensional logarítmico de todas as medições em dutos aquecidos, comparados com a correlação proposta por Kirillov e Levchenko (1989).

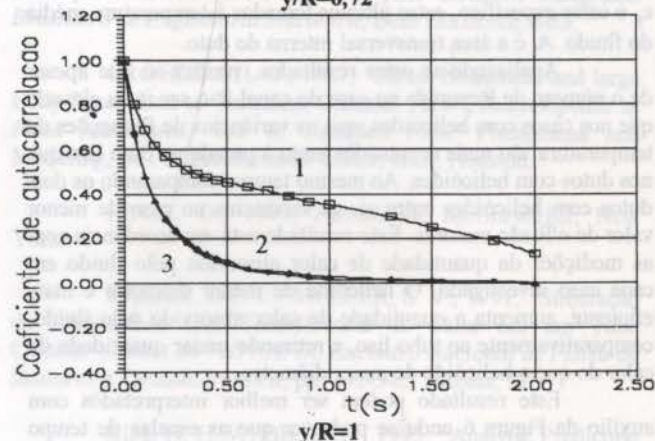
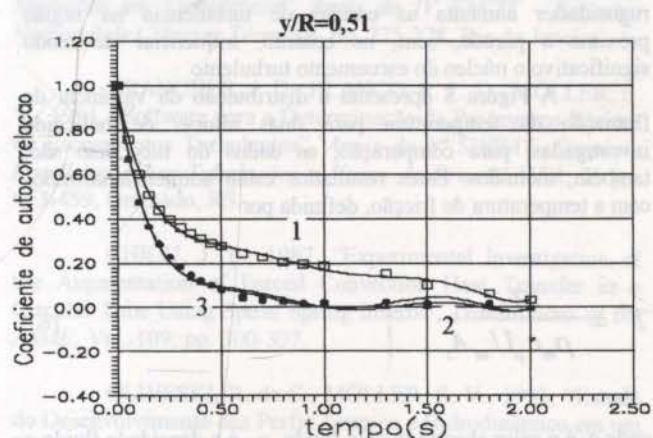
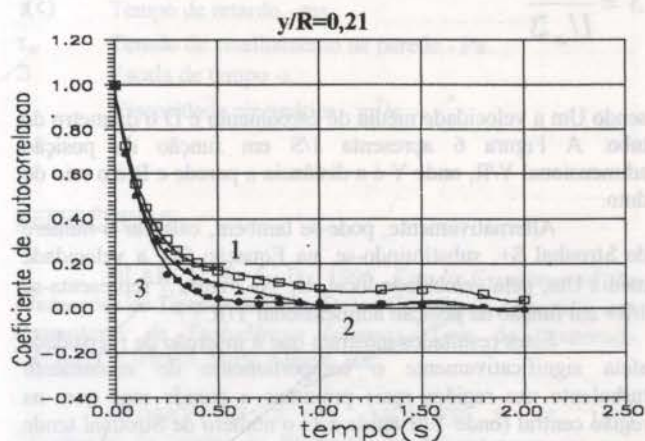
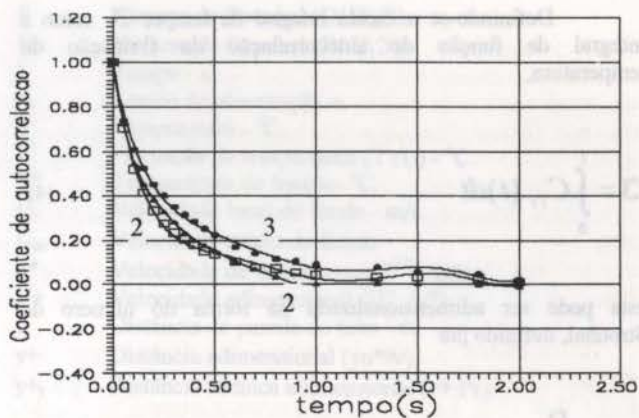


Figura 5. Funções de autocorrelação da flutuação de temperatura normalizadas (1 - tubo liso, 2 - $e/R=0,09$, 3 - $e/R=0,14$).

Definindo-se a escala integral de tempo, \mathcal{T} como a integral da função de autocorrelação da flutuação de temperatura,

$$\mathcal{T} = \int_0^t C_{TT}(t) dt \quad (4)$$

esta pode ser adimensionalizada na forma do número de Strouhal, definido por

$$S = \frac{D}{U_m \mathcal{T}} \quad (5)$$

sendo U_m a velocidade média do escoamento e D o diâmetro do tubo. A Figura 6 apresenta $1/S$ em função da posição adimensional Y/R , onde Y é a distância a parede e R é o raio do duto.

Alternativamente, pode-se também, calcular o número de Strouhal S^+ , substituindo-se, na Equação (5), a velocidade média U_m , pela velocidade local, U_1 . Na Figura 7 representa-se $1/S^+$ em função da posição adimensional Y/R .

Estes resultados mostram que a inserção de rugosidade afeta significativamente o comportamento do escoamento turbulento nas regiões mais próximas a parede mas que, na região central (onde Y/R tende a 1) o número de Strouhal tende a não ser afetado. Isto demonstra que a introdução de rugosidades aumenta as escalas de turbulência na região próxima a parede, sem, no entanto, influenciar de modo significativo o núcleo do escoamento turbulento.

A Figura 8 apresenta a distribuição da variância da flutuação da temperatura para duas alturas de helicóide investigadas; para comparação, os dados do tubo liso são, também, incluídos. Estes resultados estão adimensionalizados com a temperatura de fricção, definida por

$$T^* = \frac{q_f}{\rho_m c_p U_m A_t} \quad (6)$$

onde q_f é o calor absorvido pelo fluido, ρ_m é a densidade fluido e c_p o calor específico, estes últimos tomados à temperatura média do fluido. A_t é a área transversal interna do duto.

Analisando-se estes resultados, verifica-se que apesar de o número de Reynolds no caso do canal liso ser mais elevado que nos casos com helicóides, que as variâncias de flutuações de temperatura são mais acentuadas junto à parede no duto liso que nos dutos com helicóides. Ao mesmo tempo, comparando os dois dutos com helicóides entre si, as variâncias no caso de menor valor de e/R são maiores. Este resultado está em acórdância com as medições da quantidade de calor absorvida pelo fluido em cada caso investigado. O helicóide de menor diâmetro é mais eficiente, aumenta a quantidade de calor absorvido pelo fluido, comparativamente ao tubo liso, e retirando maior quantidade de calor do que o helicóide de maior diâmetro.

Este resultado podem ser melhor interpretados com auxílio da Figura 6 onde se pode ver que as escalas de tempo para a temperatura, e, conseqüentemente, de tamanho, são comparativamente maiores no helicóide de menor diâmetro que no tubo liso ou em presença de um helicóide maior.

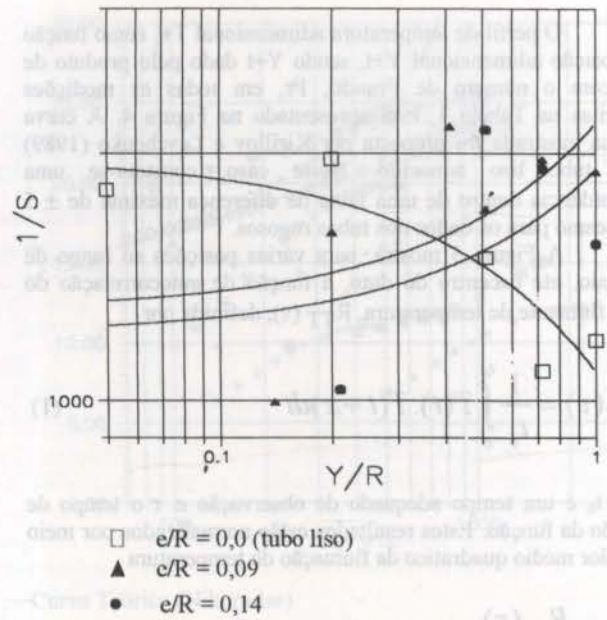


Figura 6. Escala integral da flutuação da temperatura na forma do inverso do número de Strouhal, definido com a velocidade média de escoamento, como função da posição adimensional.

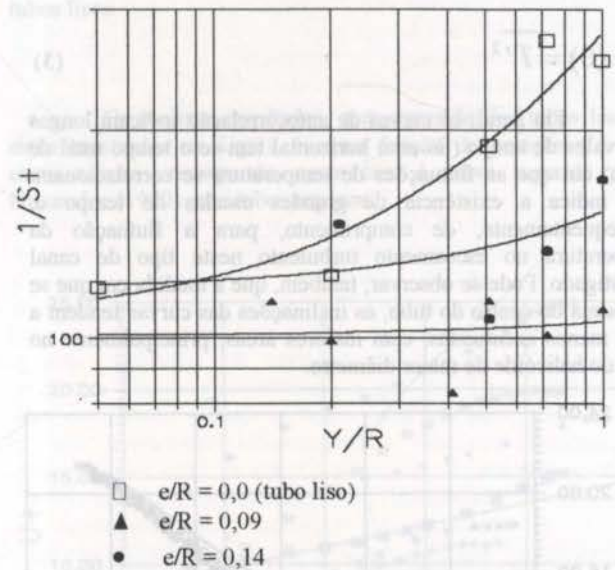


Figura 7. Escala integral da flutuação da temperatura na forma do inverso do número de Strouhal, definido com a velocidade média de escoamento, como função da posição adimensional.

CONCLUSÕES

Este trabalho apresenta um estudo da distribuição da variância das flutuações de temperatura em escoamentos turbulentos em dutos circulares aquecidos e com promotores de turbulência internos na forma de helicóides. Foram analisados resultados de medições em tubos com helicóides internos e comparados os dados obtidos com os de um tubo liso.

Verifica-se que a introdução de helicóides no interior do duto tende a homogeneizar o gradiente de temperatura radial, devido ao aumento da escala de turbulência, quando comparado com os resultados para o tubo liso.

O aquecimento em um duto com rugosidades artificiais não altera a constante universal (parâmetro angular) da equação da lei da parede determinada por Nikuradse, contudo o seu parâmetro linear é influenciado.

A intensidade de flutuação da temperatura é afetada pela presença da rugosidade em regiões mais próximas da parede, porém na região central do duto esta influência não é tão marcante, com os resultados tendendo para valores semelhantes tanto para o tubo liso como para os tubos com helicóides.

As curvas de autocorrelação apresentam uma forma suave de decréscimo o que leva a concluir que os vórtices responsáveis pelo transporte de calor apresentam tamanhos uniformes, podendo-se fazer uma análise das escalas integrais de tempo a partir das mesmas e representando-as adimensionalmente na forma de números de Strouhal.

A presença de rugosidades diminui o número de Strouhal (aumentando $1/S$ e $1/S^+$) em regiões junto a parede. Isto indica que, para estas regiões, a escala integral de tempo aumenta com relação ao tubo liso e, conseqüentemente, aumenta a escala de comprimento. Esta consideração comprova um aumento na escala de turbulência com a presença da rugosidade e, portanto, a retirada de calor é intensificada. Na região central o efeito da rugosidade desaparece e o número de Strouhal tende ao mesmo valor encontrado no tubo liso.

LISTA DE SÍMBOLOS

A_t	Área transversal do duto - m^2 .
C_{TT}	Coefficiente de autocorrelação.
D	Diâmetro do duto - m.
e	Altura do promotor de turbulência - m.
Pr	Número de Prandtl.
q_f	Calor absorvido pelo fluido - W.
R	Raio do duto - m.
Re	Número de Reynolds ($U_m D/\nu$).
R_{TT}	Autocorrelação da temperatura - $^{\circ}C^2$.

S	Número de Strouhal ($D/U_m \zeta$).
S^+	Número de Strouhal ($D/U_1 \zeta$).
t	Tempo - s.
t_b	Tempo de observação -s.
T	Temperatura - $^{\circ}C$.
T'	Flutuação da temperatura ($T'(t)$) - $^{\circ}C$.
T^*	Temperatura de fricção- $^{\circ}C$.
U_1	Velocidade local do fluido - m/s.
U_m	Velocidade média do fluido
u^*	Velocidade de fricção $(\tau_w/\rho)^{1/2}$ - m/s.
U^+	Velocidade adimensional (U_1/u^*).
y	Distância da parede do tubo - m.
y^+	Distância adimensional (yu^*/ν).
y^+_t	Distância térmica adimensional (y^+Pr).
τ	Tempo de retardo - ms.
τ_w	Tensão de cisalhamento na parede - Pa.
ζ	Escala de tempo -s.
ν	Viscosidade cinemática - m^2/s .

REFERÊNCIAS

BLANCO, R. L. D., 1996, *Estudo Experimental das Flutuações de Temperatura em Dutos Circulares Aquecidos com Promotores de Turbulência Internos*, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS, Porto Alegre, RS.

BLANCO, R. L. D., MÖLLER, S. V., 1992, "Avaliação do tempo de Resposta em Microtermopares para Medições em Turbulência", *Anais do IV ENCIT - Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, pp. 275-278, Rio de Janeiro.

BRANCHER, J. D., BLANCO, R. L. D., MÖLLER, S. V., 1994, "Software para a Determinação de Parâmetros Básicos de Escoamentos Turbulentos", *Anais do 8º SIBRAT- Simpósio Brasileiro sobre Tubulações e Vasos de Pressão*, Vol. 2, pp. 453-459, Gramado, RS.

CHIOU, J. P., 1987, "Experimental Investigation of the Augmentation of Forced Convection Heat Transfer in a Circular Tube Using Spiral Spring Inserts", *Transactions of the ASME*, Vol. 109, pp. 300-307.

OLIVESKI, R. de C., MÖLLER, S. V., 1995, "Estudo do Desenvolvimento dos Perfis Térmico e Hidrodinâmico em um Duto pelo Método ADF", *Anais do XIII COBEM, Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Belo Horizonte, MG.

GRÖTZBACH, G., 1987, "Direct Numerical and large Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow", *Encyclopedia of Fluid Mechanics*, Vol. 6, Complex Flow: Phenomena and Modeling, N. P. Chermisinoff Editor, Gulf, Houston.

HINZE, O., 1975, *Turbulence*, McGraw-Hill, New York.

KARAM, J. E. C., MÖLLER, S. V., 1991, "Simulação do Escoamento com Transferência de Calor em um Tubo Circular", *Anais do VIII ENFIR, Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica*, pp. 341-345, Atibaia, SP.

KIM, N. H., WEBB, R. L., 1993, "Analytic Prediction of the Function and Heat Transfer for Turbulent Flow in Axial Internal Fin Tubes", *Journal of Heat Transfer*, Vol. 115, pp. 553-559.

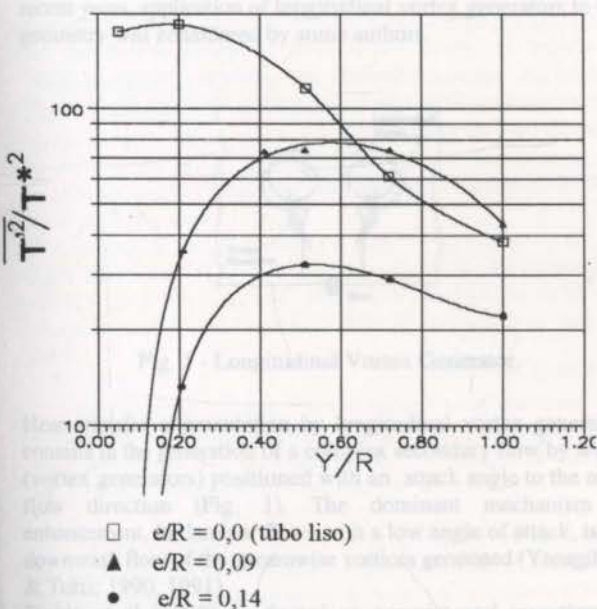


Figura 8. Distribuição da variância da temperatura como função da posição radial do duto.

KIRILLOV, D. L., LEVECHENKO, Ju. D., 1989, "Turbulent Temperature Profiles and Heat Exchange Law in Single Phase Flow in Pipes", *Proc. 4th Int. Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics*, Vol.2, pp. 728-733, Karlsruhe.

NIKURADSE, J., 1932, "Gesetzmässigkeit der turbulenten Strömung in glatten Röhren", *VDI-Forschungsheft* 356.

NIKURADSE, J., 1950, "Laws of Flow in Rough Pipes", *NASA Technical Memorandum* 1292, pp. 1-26, USA.

REHME, K., 1978, "The Structure of Turbulent Flow through a Wall Subchannel of a Rod Bundle with Roughened Rods", *KfK 2716*, Kernforschungszentrum-Karlsruhe, Karlsruhe.

ZUKAUSKAS, A., SLANCIAUSKAS, A., 1987, *Heat Transfer in Turbulent Fluid Flows*, Hemisphere, Washington.

ABSTRACT

This paper presents the experimental study of the temperature fluctuations in a heated circular pipe with helical type internal turbulence promoters made of copper wires with different diameters. Microthermocouples are applied for the measurements of temperature and its fluctuations. Data acquisition and statistical analysis was made by means of a Fourier Analyzer. Experimental results from the measurements in the pipes with internal turbulence promoters are compared with the results obtained in a smooth pipe. The analysis of the behavior of temperature variance is made with help of turbulence scales for the temperature fluctuations.

...așa că s-a realizat un studiu experimental al temperaturii fluctuante într-o conductă circulară încălzită, echipată cu promotori interni de turbulență de tip helical, realizați din fire de cupru cu diferite diametre. Pentru măsurarea temperaturii și a fluctuațiilor acesteia s-au utilizat microtermocupluri. Datele obținute au fost prelucrate și analizate statistic cu ajutorul unui analizor Fourier. Rezultatele experimentale obținute în conductele echipate cu promotori interni de turbulență sunt comparate cu cele obținute în conductele netede. Analiza comportamentului temperaturii fluctuante este realizată cu ajutorul unor scări de turbulență.

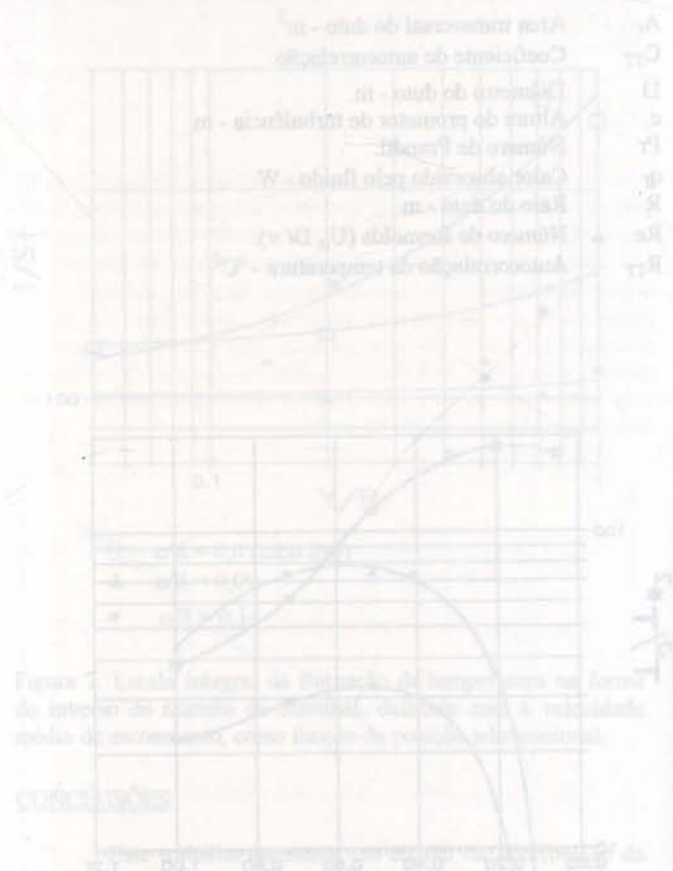


Figura 1. Variația temperaturii fluctuante în funcție de numărul Reynolds pentru diferite diametre ale promotorilor interni de turbulență. Curbele sunt etichetate cu diametrele respective.



NUMERICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF VORTEX GENERATORS ON HEAT TRANSFER AND FLOW LOSSES IN FIN-TUBE CHANNELS

Jurandir I. Yanagihara, Rogério Rodrigues Jr.

Department of Mechanical Engineering
University of São Paulo
05508-900 - São Paulo - SP - Brazil



SUMMARY

This work presents a numerical study of the influence of delta winglet pairs of vortex generators on the flow structure and heat transfer of a fin-tube channel. The momentum and energy conservation equations were solved by finite volume method using a boundary-fitted coordinates system. The influence of vortex generators parameters such as position, angle of attack and aspect ratio was investigated. Local and global influences of vortex generators in heat transfer and flow losses were analyzed by comparison with a model using smooth fin. The results indicate that heat transfer enhancement and flow losses reduction can be obtained simultaneously by using vortex generators.

INTRODUCTION

Development of techniques to improve the performance of compact heat exchangers is very important, since these devices are widely used in industrial applications. The industry has concentrated effort to develop techniques for reduction of operation costs, construction costs and size. The flow structure in these devices is complex and highly dependent of geometrical parameters such as distance between tubes, tube arrangement and fin geometry. The use of computational fluid dynamics to analyze this kind of problem has many advantages over other approaches because allow flow visualization and easy variation of geometrical parameters with lower costs.

Fin-tube compact heat exchangers used in industry already bring in their conception heat transfer enhancement techniques such as louver-fins, corrugated fins, perforated fins, etc. However, there is a constant search for new methods that yield performance improvement. Many heat transfer enhancement techniques have been proposed for use in fin-tube compact heat exchangers. In recent years, application of longitudinal vortex generators to this geometry was considered by some authors.

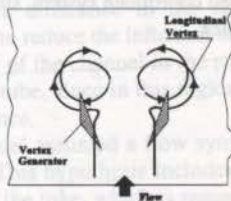


Fig. 1 - Longitudinal Vortex Generator.

Heat transfer augmentation by longitudinal vortex generators consists in the generation of a complex secondary flow by wings (vortex generators) positioned with an attack angle to the main flow direction (Fig. 1). The dominant mechanism of enhancement, for laminar flows with a low angle of attack, is the downwash flow of the streamwise vortices generated (Yanagihara & Tofii; 1990, 1991).

Fiebig et al (1990) conducted an experimental investigation ($2000 \leq Re_E \leq 5000$) about the influence of delta winglet longitudinal vortex generators on flow losses and heat transfer in

a fin-tube channel. Angle of attack and position of vortex generators were investigated. Results indicate $\beta=45^\circ$ as the best attack angle in terms of heat transfer augmentation. Local heat transfer enhancements of 100% and global heat transfer enhancement of 20% were achieved. However, the most important result was the reduction of flow losses in a channel with vortex generators. The authors have observed the existence of a position, behind the tube, which allows simultaneously flow losses reduction and heat transfer enhancement. It was observed a reduction of 8% in the flow losses, at $Re_E=2000$ (E = distance between fins), with larger reduction for increasing Reynolds number. Valencia et al (1993) carried out experimental studies about the influence of delta winglet longitudinal vortex generators on a compact fin-tube heat exchanger with three rows of staggered and in-line tubes. Vortex generators parameters such as attack angle and position were fixed according to the best results of Fiebig et al (1990). Results show that for the chosen geometry the longitudinal vortices increase the heat transfer by 55% to 65% for the in-line and by 9% for the staggered arrangement. Flow losses increase by 20% to 44% for the in-line and by 3% for the staggered arrangement. The in-line arrangement with vortex generators, compared to the staggered one, gives the same heat transfer and lower flow loss at $Re < 1000$ and higher heat transfer and flow losses at $Re > 1000$. The authors observed a small advantage of in-line over the staggered arrangement when using vortex generators in a compact fin-tube heat exchanger.

Biswas et al (1994) conducted a numerical investigation ($Re_E=500$ and $Re_E=1000$) about the flow structure and heat transfer augmentation in a fin-tube channel with delta winglet vortex generators. Vortex generators parameters as attack angle and position were fixed according to best results of Fiebig et al (1990). Local heat transfer enhancement of about 240% was obtained. The influence of vortex generators on flow losses was not presented by the authors.

The present study consists of a numerical investigation about the influence of delta winglet pairs of vortex generators on a simplified model of fin-tube compact heat exchanger. The influence of parameters such as position, attack angle and aspect ratio of vortex generators was investigated. The local and global influence of vortex generators in heat transfer and flow losses are analyzed by comparison with a smooth fin. The computational analysis was carried out by using the computational fluid dynamics package PHOENICS (v. 2.0).

PHYSICAL MODEL AND PARAMETERS

The choice of the geometrical parameters was made considering the basic dimensions of a typical channel of evaporator for domestic air-

conditioning system. However, the physical model has only one row of tubes and the fins present some simplifications when compared with the original fin model. Heat transfer augmentation techniques used in that fin, as corrugations and louvers, were eliminated. The vortex generators influence was evaluated by comparison between smooth fins with and without vortex generators. Fig. 2 presents the physical model. The geometric parameters of the fin-tube channel are:

$$\begin{aligned} B &= 2.89 D \\ L &= 2.17 D \\ E &= 0.2 D \end{aligned} \quad (\text{distance between fins})$$

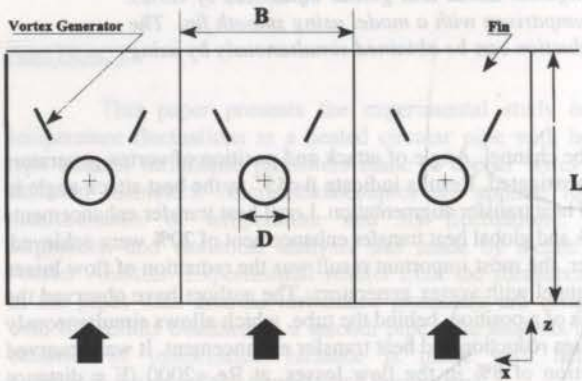


Fig. 2 - Physical Model

There are many geometrical forms for the vortex generators. Although there is a study of the influence of the generators geometry on a laminar boundary layer heat transfer by Yanagihara and Torii (1992), there is no such a report for a fin-tube channel. Nevertheless, only built-in delta winglet vortex generators have been considered in this study. Others effects such as the stamping holes of vortex generators were not considered in the present study.

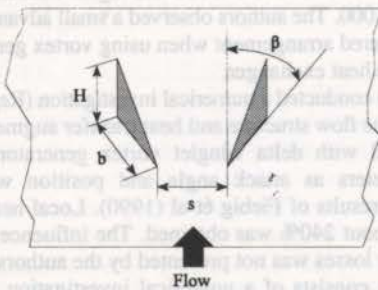


Fig. 3 - Delta Winglet Vortex Generator.

Table 1 - Vortex Generators Parameters.

Height	(H)	0.2 D
Chord	(b)	0.2 D
Aspect Ratio	($\Lambda=2H/b$)	2.0
Angle of Attack	(β)	45°

The investigation was divided in two parts. At first, all vortex generators parameters, except the position, were fixed according to the best results encountered in literature (see Table 1), and only the position was varied. The position of vortex generators was changed in the following interval (See Fig. 4):

$$\begin{aligned} 70^\circ < \theta < 150^\circ \\ 0.6D < r < 0.9D \end{aligned}$$

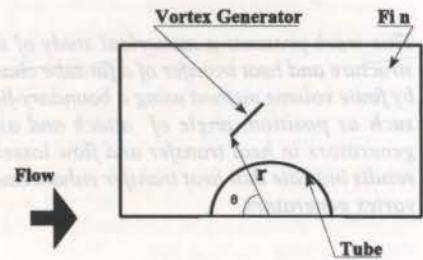


Fig. 4 - Region of Investigation

Secondly, the influences of aspect ratio (Λ) and angle of attack (β) were also investigated. The influence of angle of attack was evaluated with the vortex generators position fixed according to the best value obtained in the first step, and the range used was $15^\circ < \beta < 60^\circ$. The influence of aspect ratio was investigated for the best positions in terms of heat transfer and flow losses in the range $1.0 < \Lambda < 2.0$. The influence of Reynolds number was investigated in two configurations. The parameters such as position, aspect ratio and angle of attack of the vortex generator were chosen for the smallest pressure drop for the first configuration. The selection of the parameters for the second configuration was based on the highest heat transfer enhancement.

NUMERICAL MODEL

Governing equations. The fluid flow and heat transfer processes were modelled by partial differential equations describing the conservation of mass, momentum and thermal energy in three dimensional boundary-fitted coordinate system, since the geometry of the problem is very complex.

Conservation of mass:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (1)$$

Conservation of momentum:

$$\text{div}(\rho u_j u_i) = \text{div}(\mu \nabla u_i) - \frac{\partial p}{\partial x} + S \quad (2)$$

Conservation of energy:

$$\text{div}(\rho u_j h) = \text{div}(\mu \nabla h) \quad (3)$$

The numerical model used a finite-volume formulation. The above equations are integrated over each control volume of the domain, and solved by the widely used CFD package PHOENICS (version 2.0). The package uses a staggered grid arrangement for discretization of the momentum equations. The hybrid scheme is employed for the discretization of the convective transport.

Boundary conditions. The computational model is presented in Fig.5. The symmetry of the problem was considered to reduce data storage and computational efforts necessary to obtain the solution. The flow was assumed in steady-state with constant properties and absence of gravitational effects.

The boundary conditions used were the following:

- Inlet : $w = W_{in}$ and $T = T_{in}$.
- Outlet : $p = p_0$ and null diffusive fluxes in streamwise direction.
- Walls (fins, tube, vortex generators) : $T = T_{wall}$ and no-slip condition.
- Symmetry planes : null mass and heat flux across the plane.

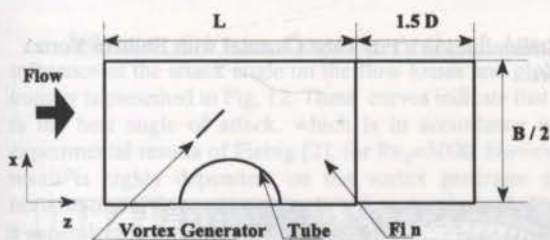


Fig. 5 - Computational Model

Comparing the physical model with the computational model it can be observed a difference in the channel length. Such alteration was used to reduce the influence of boundary condition applied on the exit of the channel in the region of recirculation formed behind the tube, since in this region the diffusive fluxes have great importance.

The numerical model assumed a flow symmetry along the two sides of the tube. This hypothesis includes the assumption of a stable wake behind the tube, which is reasonable due to the wall effects caused by the small E/D ratio (E is the distance between fins).

Convergence criteria. The convergence was assumed when the sum of the residual errors for each of equations sets took a negligible value. The reference residual errors used in this work are 10^{-6} for variables p, u, v, w and 10^{-5} for variable T.

Grid Generation. The complex geometry of the channel required the use of a boundary-fitted coordinate system. The discretization of the delta winglets was difficult, since it have a triangular shape and the computational code used (PHOENICS 2.0) allow only structured discretization of the space. Thus, the delta winglets was discretized by using some rectangles, which

approximate the triangular shape of the vortex generators (see Fig.6). The three-dimensional grid was generated by copying a bidimensional discretization of the longitudinal plane of the channel, and the vortex generators position and angle of attack were determined by fixing some nodes in this plane (see Fig. 7).

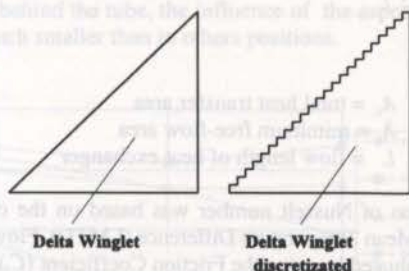


Fig. 6 - Discretization of the Vortex Generators.

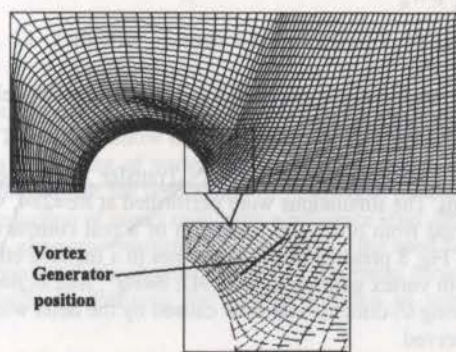


Fig. 7 - Generation of the Three-Dimensional Mesh.

Grid refinement influence. The influence of grid refinement was investigated. An arbitrary configuration was simulated with three degrees of refinement and the results were compared in terms of flow losses and global heat transfer coefficient. It was concluded that a grid with $36 \times 20 \times 67$ volumes would give reasonable results for these calculations at $Re=284$, and a grid with $42 \times 20 \times 77$ volumes at $Re=1000$.

RESULTS

The results of the calculations performed with PHOENICS are presented in terms of Reynolds number (Re) and Nusselt number (Nu), defined according to Kays & London (1984),

$$Nu = \frac{D_h h_c}{k} \quad (4)$$

$$Re = \frac{w_{max} \cdot D_h}{\nu} \quad (5)$$

where w_{max} is the mean velocity on the minimum free-flow area and h_c is the convection heat transfer coefficient. The hydraulic diameter is defined as,

$$D_h = \frac{4 \cdot A_t}{A_c} L \quad (6)$$

where A_t = total heat transfer area
 A_c = minimum free-flow area
 L = flow length of heat exchanger

The evaluation of Nusselt number was based on the classical Logarithmic Mean Temperature Difference (LMTD). Flow losses have been evaluated by using the Friction Coefficient (C_f), which was defined as,

$$C_f = \frac{\Delta p}{\frac{1}{2} \rho W_m^2} \frac{E}{2L} \quad (7)$$

where E is the distance between fins and W_m is the mean velocity on the inlet of the channel.

Flow Structure and Heat Transfer Enhancement Mechanisms. The simulations were performed at $Re=284$, which was obtained from operation condition of a real compact heat exchanger. Fig. 8 presents some streamlines in a fin-tube channel with built-in vortex generators ($r=0.9D$; $\theta=80^\circ$; $\Lambda=2.0$; $\beta=45^\circ$), where a strong tri-dimensional flow caused by the delta winglets can be observed.

The mechanism of heat transfer enhancement can be understood with Fig. 9, where the secondary flow on a transversal section of channel, downstream of the winglets, and the local heat transfer enhancement on the base and top fins are presented. In the regions of the channel where higher momentum fluid is carried toward the wall, an increase in heat transfer occurs, due to the thinning of the boundary layer. In the regions where fluid is carried apart from the wall occur a reduction of heat transfer. Results in terms of local heat transfer enhancement showed promising tendencies. Fig. 10 and 11 present the local heat transfer enhancement for $r=0.9D$ and $\theta=80^\circ$, where local enhancements of about 350% can be observed. In these figures it is evident that the largest local enhancements occur near the vortex generator.

Fig.10 (base fin) presents two peaks of heat transfer enhancement. The first, positioned just before the delta winglet is a evidence of a corner vortex in this region. This type of structure has been related by Yanagihara & Torii (1990, 1991), and it is formed in the corner between the front side of the vortex generator and the fin.

The second peak, positioned near the trailing edge of vortex generator is caused by the main vortex. This vortex is generated as the result of the flow separating in the tip of the delta winglet and rolling up due to the lower pressure in the rear side of the generator. The peak of heat transfer observed in Fig. 11 (top fin) is caused by the strong flow toward the wall at that position.

Influence of Vortex Generator Position. The vortex generator position was varied at $Re=284$. The angle of attack and the aspect ratio of delta winglets were fixed ($\beta=45^\circ$; $\Lambda=2.0$). The results indicate that the best position, in terms of flow losses, was $r=0.9D$ and $\theta=80^\circ$. In such position the channel with vortex

generators presents flow losses 12% lower than the channel without vortex generators. This flow losses reduction is a consequence of the reduction of the form drag due to the tube, since the presence of a delta winglet pair disturbs the pressure distribution along the tube surface. Analysis of the pressure distribution over the tube surface indicated a reduction of pressure level at front side of the tube caused by the vortex generators. The global heat transfer enhancement was about 3% for the same position.

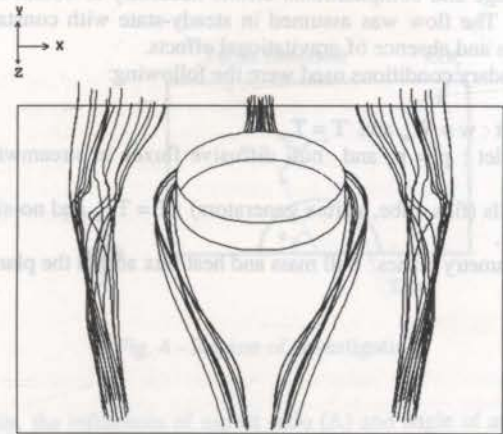


Fig. 8 - Streamlines in a Fin-Tube Channel with Built-In Vortex Generators.

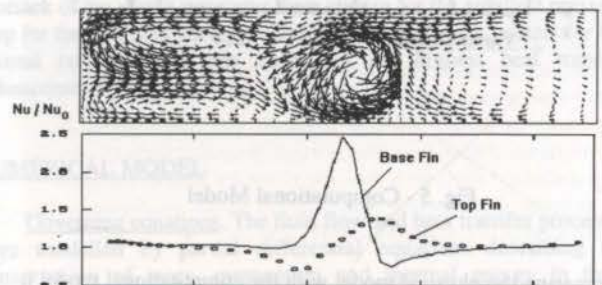


Fig. 9 - Heat Transfer Enhancement Mechanism.

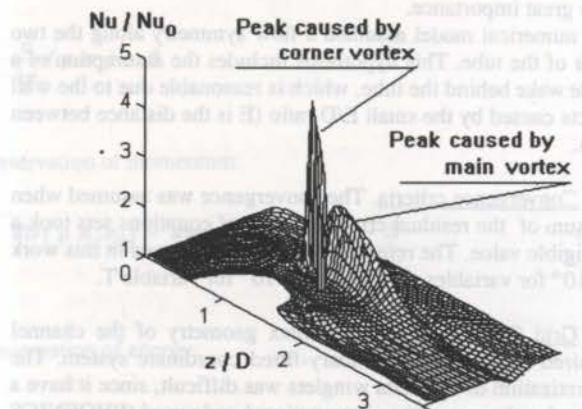


Fig. 10 - Local Heat Transfer Enhancement ($r=0.9D$; $\theta=80^\circ$; $\Lambda=2.0$; $\beta=45^\circ$) - Base Fin.

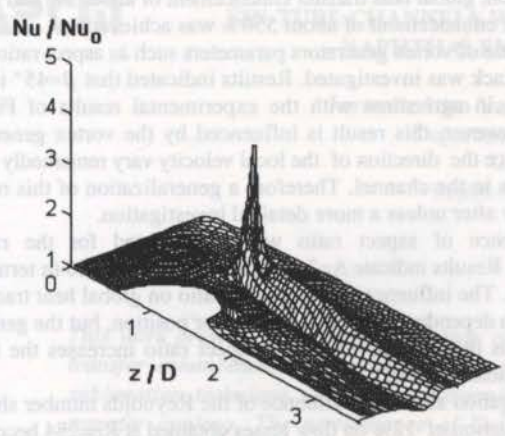


Fig. 11 - Local Heat Transfer Enhancement ($r=0.9D; \theta=80^\circ; \Lambda=2.0; \beta=45^\circ$) - Top Fin.

The best positions, in terms of heat transfer, were $r=0.9D$ and $\theta=130^\circ$, $r=0.7D$ and $\theta=130^\circ$, and $r=0.8D$ and $\theta=90^\circ$, where a global heat transfer enhancement of about 7% was obtained. However, the comparison among the three positions shows a lower flow losses for $r=0.8D$ and $\theta=90^\circ$.

Influence of Vortex Generator Angle of Attack. The influence of the attack angle on the flow losses and global heat transfer is presented in Fig. 12. These curves indicate that $\beta=45^\circ$ is the best angle of attack, which is in accordance with the experimental results of Fiebig [2], for $Re_f=3000$. However, this result is highly dependent on the vortex generator position because of the flow complexity in a fin-tube channel. Therefore a generalization of this result is difficult.

In Fig. 12 it can be observed that $\beta=60^\circ$ presents lower global heat transfer enhancement than $\beta=45^\circ$. This result can be explained by the fact that the vortex intensity increases with the increase of angle of attack until a critical value is reached. Beyond that value, the vortex generator performance decreases. Such behaviour was detected by previous works, but the critical angle was not identified. It is also important to note that the local flow direction varies for different vortex generators position. Thus, the real attack angle, based on the local flow direction, can be different from the nominal value.

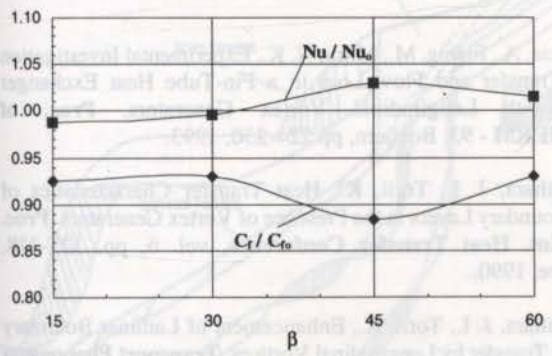


Fig. 12 - Influence of Angle of Attack. (β).

Influence of Vortex generator Aspect Ratio. The influence of aspect ratio was investigated for the best position in terms of flow losses ($r=0.9D$ and $\theta=80^\circ$), and on the best positions in terms of heat transfer ($r=0.9D; \theta=130^\circ$, $r=0.7D; \theta=130^\circ$, and

$r=0.8D; \theta=90^\circ$). The vortex generator angle of attack was fixed ($\beta=45^\circ$). Figure 13 presents the influence of aspect ratio in flow losses. The results show that the reduction of aspect ratio caused an increase of flow losses. This result is the consequence of the increase of the vortex generator frontal area with the decrease of aspect ratio. However, it can be observed that when the vortex generator was positioned behind the tube, the influence of the aspect ratio in flow losses is much smaller than in others positions.

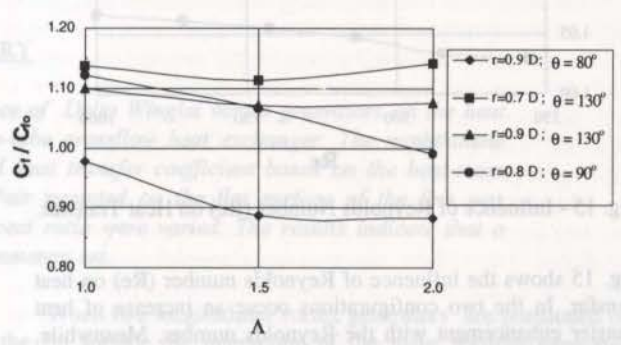


Fig. 13 - Influence of Aspect Ratio (Λ) on Flow Losses.

The Fig. 14 presents the influence of the aspect ratio on heat transfer. The results show that the influence of aspect ratio on heat transfer is dependent of vortex generator position. In all positions investigated, except for ($r=0.8D; \theta=90^\circ$), the heat transfer increases with the reduction of aspect ratio, with an influence level depending on the vortex generator position. This fact shows the need for a careful investigation involving channel and vortex generators parameters with the objective of obtaining the best performance in terms of heat transfer.

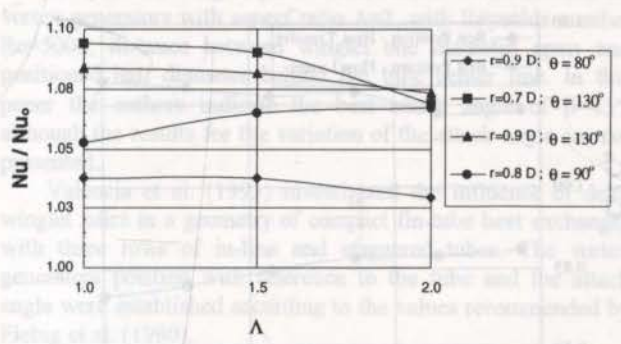


Fig. 14 - Influence of Aspect Ratio (Λ) on Heat Transfer.

Influence of Reynolds Number (Re). The influence of Reynolds number (Re) on heat transfer and flow losses was evaluated in the range $284 \leq Re \leq 1000$. It was chosen two vortex generator positions for this investigation: the best configuration in terms of flow losses ($r=0.9D; \theta=80^\circ; \Lambda=2.0; \beta=45^\circ$) and the best configuration in terms of heat transfer ($r=0.7D; \theta=130^\circ; \Lambda=1.0; \beta=45^\circ$). The results can be observed on Fig. 15 and 16.

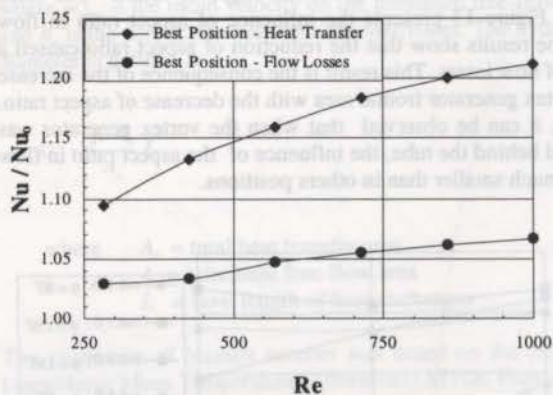


Fig. 15 - Influence of Reynolds Number (Re) on Heat Transfer.

Fig. 15 shows the influence of Reynolds number (Re) on heat transfer. In the two configurations occur an increase of heat transfer enhancement with the Reynolds number. Meanwhile, when the vortex generator was positioned downstream of the tube (best position in terms of heat transfer) occur a much higher influence of the Reynolds number (Re) than in the best configuration in terms of flow losses (vortex generator positioned upstream of the tube).

Fig. 16 presents the influence of Reynolds number (Re) on flow losses. This figure shows that the flow losses reduction of about 12% obtained at Re=284 can reach 20%, at Re=1000, since the effect of reduction of pressure level at the front side of the tube increases with Re. However, for the best configuration in terms of heat transfer the flow losses increases with the Reynolds number, since the form drag caused by the tube and the vortex generators increase with the Reynolds number.

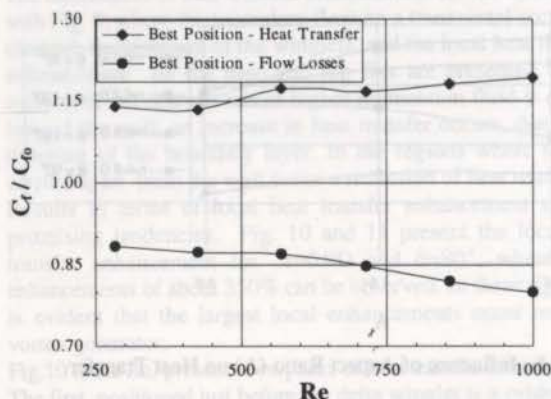


Fig. 16 - Influence of Reynolds Number (Re) on Flow Losses.

CONCLUSIONS

This work presents a numerical investigation about the influence of longitudinal vortex generators on heat transfer and flow losses in a fin-tube channel. Delta winglet vortex generators were used, and the influence of parameters such as position, aspect ratio and angle of attack was investigated. A steady-state analysis was carried out using PHOENICS 2.0 CFD package for $284 \leq Re \leq 1000$.

Results indicate that flow losses reduction and heat transfer enhancement can be achieved simultaneously. At Re=284 a reduction of flow losses of about 12% was obtained with vortex generators positioned at $r=0.9D$ and $\theta=80^\circ$. For the same

configuration, global heat transfer enhancement of about 3% and local heat transfer enhancement of about 350% was achieved.

The influence of vortex generators parameters such as aspect ratio and angle of attack was investigated. Results indicated that $\beta=45^\circ$ is the best angle, in agreement with the experimental results of Fiebig (1990). However, this result is influenced by the vortex generator position since the direction of the local velocity vary remarkably with the position in the channel. Therefore a generalization of this result can be only after unless a more detailed investigation.

The influence of aspect ratio was investigated for the range $1.0 < \Lambda < 2.0$. Results indicate $\Lambda=2.0$ as the best aspect ratio in terms of flow losses. The influence of the aspect ratio on global heat transfer has shown a dependence of vortex generator position, but the general behaviour is that the decreasing of aspect ratio increases the flow losses and heat transfer.

The investigation about the influence of the Reynolds number shows that the reduction of 12% on flow losses obtained at Re=284 becomes larger as the Reynolds number increases. At Re=1000 it was obtained a flow losses reduction of about 20% with a heat transfer enhancement of 7%. The heat transfer enhancement was also significantly influenced by the Reynolds number. The best configuration in terms of heat transfer presents an increase of heat transfer enhancement from 9%, at Re=284, to 21% at Re=1000.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors gratefully acknowledge the technical and financial support of MULTIBRÁS S.A..

REFERENCES

- Biswas, G., Mitra, N. K., Fiebig, M., Heat Transfer Enhancement in Fin-Tube Heat Exchangers by Winglet Type Vortex Generators. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 37, n.2, pp.283-291, 1994.
- Fiebig, M., Mitra, N., Dong, Y., Simultaneous Heat Transfer Enhancement and Flow Loss Reduction of Fin-Tube. *Proc. of Heat Transfer - 1990*, vol. 4, pp. 51-55, Hemisphere, 1990.
- Kays, W. M., London, A. L., *Compact Heat Exchangers*. McGraw-Hill Book Co., 3rd Ed., New York, 1984.
- Patankar, S. V., *Numerical Heat and Fluid Flow*. Hemisphere, 1980.
- Valencia, A., Fiebig, M., Mitra, N. K., Experimental Investigation of Heat Transfer and Flow Loss in a Fin-Tube Heat Exchanger Element with Longitudinal Vortex Generators. *Proc. of EURO THERM - 93*, Bochum, pp.224-230, 1993.
- Yanagihara, J. I., Torii, K., Heat Transfer Characteristics of Laminar Boundary Layers in the Presence of Vortex Generators. *Proc. of 9th Int. Heat Transfer Conference*, vol. 6, pp. 323-328, Hemisphere, 1990.
- Yanagihara, J. I., Torii, K., Enhancement of Laminar Boundary Layer Heat Transfer by Longitudinal Vortices. *Transport Phenomena in Heat and Mass Transfer*, vol. 2, pp.942-953, Elsevier, 1991.
- Yanagihara, J. I., Torii, K., Enhancement of Laminar Boundary Layer Heat Transfer by a Vortex Generator. *JSME Int. Journal*, vol. 35, Serie II, pp. 400-405, 1992.



EXPERIMENTAL STUDY OF HEAT TRANSFER AUGMENTATION OF FIN-TUBE CHANNELS WITH VORTEX GENERATORS USING THE NAPHTHALENE SUBLIMATION TECHNIQUE.

Jurandir Itizo Yanagihara, Juan José Gonzalez Bayón

Department of Mechanical Engineering

University of São Paulo

05508-900 - São Paulo - SP -Brazil



SUMMARY

This work presents an experimental study of the influence of Delta Winglet vortex generators on the heat transfer enhancement in an element of a gas-liquid fin-tube crossflow heat exchanger. The naphthalene sublimation technique was used to determine the global heat transfer coefficient based on the heat-mass transfer analogy. The performance of Delta Winglet Pair mounted on the flat surface of the fins was investigated. The winglet position, attack angle and aspect ratio were varied. The results indicate that a reasonable enhancement of 18% is achieved for some parameters set.

INTRODUCTION

The development of techniques to improve the performance of compact fin-tube heat exchangers is very important, due to their large industrial application. These techniques have the objective of reducing the dimensions, construction costs and operation costs.

Many heat transfer augmentation techniques have been proposed for use in compact fin-tube exchangers (some of these can be found in Bergles, 1991). The utilization of longitudinal vortex generators to this type of heat exchangers has been considered by some authors in the recent years. Heat transfer enhancement by longitudinal vortex generators consists in the formation of a complex secondary flow by wings placed on the fin surface with an attack angle in respect to the main flow direction. A complex structure of secondary flow has been studied by Brockmeier et al. (1989), Yanagihara and Torii (1991), Biswas and Chattopadhyay (1992).

Yanagihara and Torii (1991) found that the structure is formed by a composition of three types of vortices (figure 1).

The main vortex formed at the wing tip, the corner vortex at the wing base and an induced vortex formed between them.

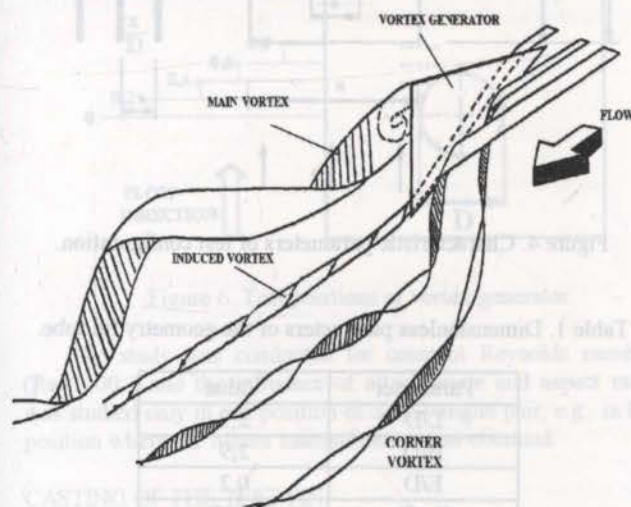


Figure 1. Structure of vortices observed by Yanagihara and Torii (1991) for a delta winglet.

When two longitudinal vortex generators are positioned on the fin surface the interaction of the main vortices generated produces a secondary flow directed to the surface, downwash flow, in the region between the vortex generators. This flow cause a thinning in the boundary layer, enhancing the heat transfer. In the outer region of the generators pair the existence of corner vortices produces a local heat transfer enhancement.

Fiebig et al. (1990) conducted an experimental study about the influence of a pair of delta winglet type vortex generators on heat transfer and flow losses in a plate fin-tube geometry. The winglet position, the attack angle and the Reynolds number from 2000 to 5000 were varied. Global heat transfer enhancement of 20% and reduction in the flow losses of 10% were achieved for the best position winglet pair. These results were obtained for vortex generators with aspect ratio $\Lambda=2$, with Reynolds number $Re=5000$, distance between winglet one diameter apart and positioned half diameter behind the tube center line. In this paper the authors indicate the best attack angle of $\beta=45^\circ$, although the results for the variation of the attack angle are not presented.

Valencia et al. (1993) investigated the influence of delta winglet pairs in a geometry of compact fin-tube heat exchanger with three rows of in-line and staggered tubes. The vortex generators position with reference to the tube and the attack angle were established according to the values recommended by Fiebig et al. (1990).

The results showed 55-65% of heat transfer intensification for the in-line arrangement and 9% for the staggered arrangement. Considering the heat transfer enhancement and the flow losses, the authors concluded that the in-line arrangement has a performance slightly superior to the staggered arrangement in the presence of vortex generators.

Biswas et al. (1994) carried a numerical investigation in a fin-tube channel with delta winglet vortex generators. The objectives were to study the flow structure and the heat transfer enhancement for the same vortex generators parameters recommended by Fiebig et al. (1990) in the range of Reynolds number from 500 to 1000. They observed the interaction between the horseshoe vortex (formed in the tube base) and the longitudinal vortex, that moves the boundary layer separation point over the tube from the tube front to the rear. Consequently, the recirculation region is reduced and the heat transfer is

enhanced. The authors obtained local heat transfer enhancement of about 240%.

The present work consists of an experimental investigation about the influence of delta winglet pair of vortex generators when mounted in a model of fin-tube compact heat exchanger. The influence of the position, attack angle and aspect ratio of vortex generators on the global heat transfer was studied. The results of heat transfer augmentation were analyzed by comparison with the smooth fin.

EXPERIMENTAL APPARATUS.

The tests were conducted in an open circuit wind tunnel, shown schematically in figure 2. The tunnel consists of an inlet, a test section, a diffuser, a centrifugal fan and a tube of discharge. The inlet was equipped with contraction ratio (4:1), grid and honeycomb flow straightener. The velocity profile was measured with a Pitot tube at the test section inlet and was found to be flat within 4 percent.

The test section provided visual access during experiments and easy access to the model for quit installation and removal of specimens. The diffuser has a rectangular inlet section which forms the transition to the circular exit section. The fan was located downstream of the test section to avoid heating of the free-stream flow. The discharge tube vented the air from the wind tunnel to the outside atmosphere, so that naphthalene did not contaminate the laboratory air. The air flow rate was measured by an orifice mounted in the discharge tube and was modulated by varying the power input to a d.c. electric motor which drove the fan.

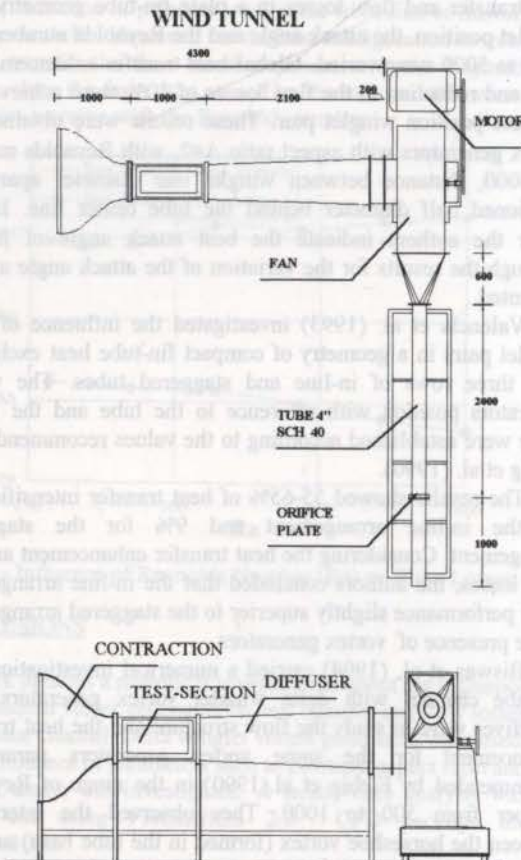


Figure 2. Test facility.

The experimental configuration consisted of a cell of heat exchanger, formed of a finned tube of 90 mm diameter with 11 plate fins 18 mm apart. A pair of delta winglet longitudinal vortex generators (LVG) were mounted on the surface of each fin symmetrical to the tube. The experimental model and the geometrical dimensions are shown in figure 3.

The model was made by displaced fin-units, so that the fins could be mounted and removed. The test fin was located in the center of the model. This fin contained the cast naphthalene and all the other fins simply provided the proper flow conditions.

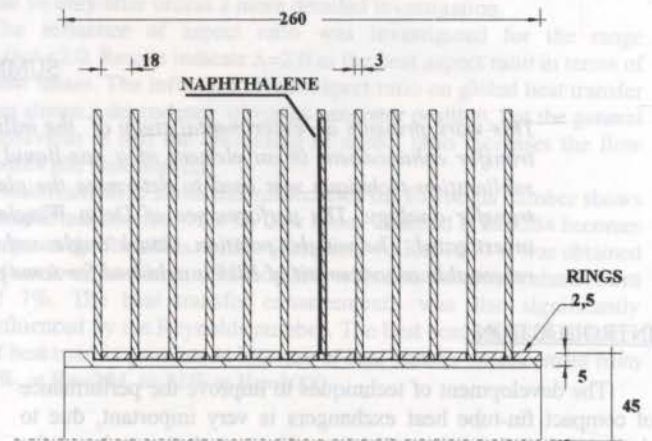


Figure 3. Experimental model.

For the parametric study, the fin tube geometry was held constant and four parameters were varied: the winglet pair position (x/D , $\Delta y/D$), attack angle (β) and aspect ratio (Λ). The dimensionless parameters of the configuration fin-tube (figure 4) are shown in table 1.

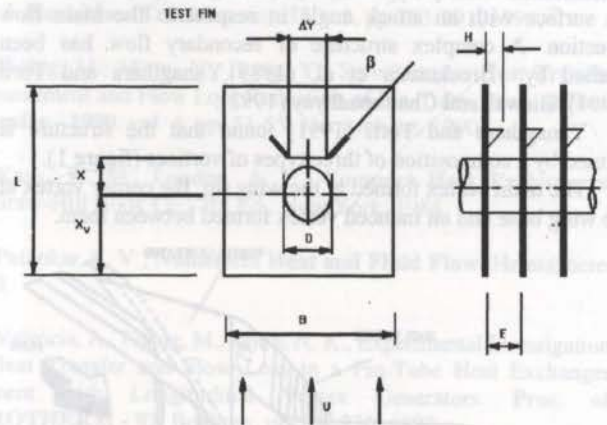


Figure 4. Characteristic parameters of test configuration.

Table 1. Dimensionless parameters of the geometry fin-tube.

Parameter	Value
L/D	2,9
B/D	2,9
E/D	0,2
X_v/D	1,45
H/D	0,2

The characteristic dimensions of the vortex generator are defined in figure 5.

The aspect ratio (Λ) of the vortex generator is defined as:

$$\Lambda = \frac{2H}{b}$$

where: H height of generator
b cord.

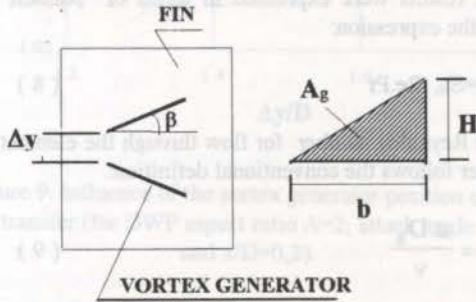


Figure 5. Characteristic dimensions of vortex generator.

The ranges of variable parameters utilized in the experiments are shown in table 2 and the delta winglet test positions are represented in figure 6.

Table 2. Ranges of variation of the parameters.

streamwise position	$0,9 \geq \Delta y/D \geq 0,3$
spanwise position	$0,8 \geq x/D \geq 0$
attack angle	$60^\circ \geq \beta \geq 15^\circ$
aspect ratio	$\Lambda = 1; 1,5; 2$

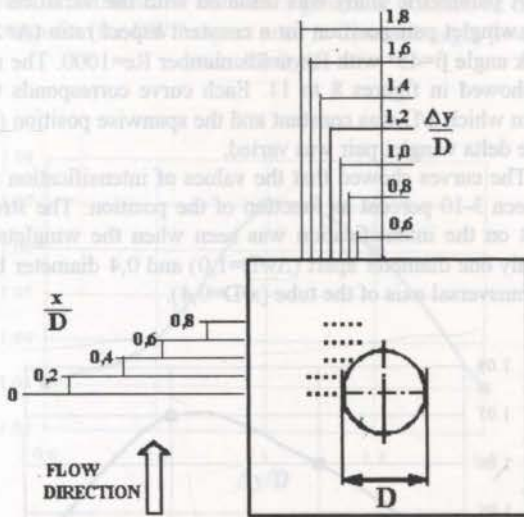


Figure 6. Test positions of vortex generator.

The study was conducted for constant Reynolds number ($Re=1000$) and the influence of attack angle and aspect ratio was studied only in one position of delta winglet pair, e.g., in the position where the higher intensification was obtained.

CASTING OF THE TEST FIN.

The casting mold was machined in one of the fin-units. This mold was made of aluminium (figure 7). The high polished

surface of naphthalene was obtained using a glass plate as the cover surface for the mold. The glass and the mold were always cleaned before to the casting process. The solid naphthalene was heated above its melting point ($80,2^\circ C$) and discharged into the preheated mold. Two vent holes allowed the air to escape as the mold is filled with liquid naphthalene. After the solidification, the mold was reheated to a temperature close to the naphthalene melting point for easier remotion of the cover surface. This procedure allowed the surface to be more polished than removing the cover surface at room temperature.

After casting naphthalene, the test fin was geometrically identical to the other fins. To protect the naphthalene from sublimation by natural convection, the test fin was placed in a closed box for storage. Solid naphthalene particles was put into the box to generate a saturation condition within the box.

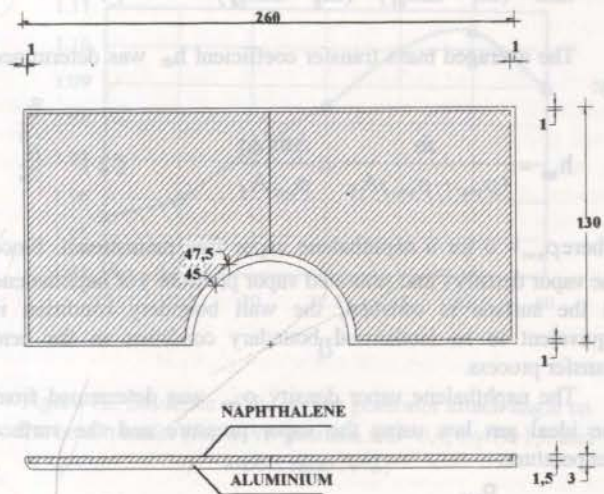


Figure 7. Naphthalene fin.

INSTRUMENTATION.

Temperature measurements were needed since the partial pressure of naphthalene is a function of the temperature, $1^\circ C$ of change in temperature cause a 10% change in the saturation pressure of naphthalene. A thermometer with accuracy within $\pm 0,1^\circ C$ was placed in the flow downstream of the test element.

Air laboratory conditions were inferred from laboratory temperature, pressure and humidity. The uncertainties in the measurements of these parameters were $\pm 0,1^\circ C$, $\pm 0,1$ mm Hg e $\pm 2,5\%$ respectively. For the measurement of global naphthalene sublimation a precision balance ($\pm 10^{-4}g$) was used. The test fin was weighed before and after a wind tunnel exposure. The air rate flow was measured by an orifice plate with an uncertainty of 3,5% (95% of confidence level).

EXPERIMENTAL PROCEDURE AND DATA REDUCTION.

The wind tunnel apparatus was subjected to a warm-up period before each test. After measuring the initial weight, the fin test was immediately assembled to the model and placed in the wind tunnel. The room temperature and the time period (τ_0) of this operation was recorded for later mass correction due to natural convection.

For the mass correction, the naphthalene fin was exposed to room ambient during one minute before put it in the tunnel and the mass difference in this period (Δm_{cl}) was measured. Assuming the natural convection constant during the transport and assembling of the fin to the tunnel, which is a good assumption because lab temperature and naphthalene concentration fluctuated very little, the mass correction was adopted as $\Delta m_{cl} = \Delta m_{cl} \cdot \tau_0$.

During the test run the ambient conditions were recorded several times. Temperature in the wind tunnel was measured every two minutes. After 40 to 45 minutes the fan was turned off and the test fin removed. The fin mass (m_e) was measured.

The procedure for mass correction to the assembling process was also adopted for the mass correction due to removal and transport of the fin to the balance: $\Delta m_{ce} = \Delta m_{cl} \cdot \tau_{0e}$.

The mass change during wind tunnel exposure was:

$$\Delta m = (m_i - \Delta m_{cl}) - (m_e - \Delta m_{ce}) \quad (1)$$

The averaged mass transfer coefficient h_m was determined by:

$$h_m = \frac{\dot{m}}{(\rho_{vw} - \rho_{v\infty})A_f} = \frac{\Delta m / \Delta \tau}{\rho_{vw} A_f} \quad (2)$$

where $\rho_{v\infty} = 0$ for a naphthalene vapor free mainstream. Since the vapor density (and saturated vapor pressure) of naphthalene at the surface is constant, the wall boundary condition is equivalent to an isothermal boundary condition in the heat transfer process.

The naphthalene vapor density ρ_{vw} was determined from the ideal gas law using the vapor pressure and the surface temperature:

$$\rho_{vw} = \frac{P_{vw}}{RT_w} \quad (3)$$

The vapor pressure of naphthalene was obtained using the correlation given by Ambrose et al. (1975):

$$\begin{aligned} T \cdot \log p_n &= (1/2) \cdot a_0 + \sum_1^3 a_s \cdot E_s(x) \\ x &= [2T - (T_{min} + T_{max})] / (T_{max} - T_{min}) \\ a_0 &= 301,6247; a_1 = 791,4937 \\ a_2 &= -8,2536; a_3 = 0,4043 \\ E_1(x) &= x; E_2(x) = 2x^2 - 1; E_3(x) = 4x^3 - 3x \\ (p_n \text{ in Pa}; T \text{ in K}) \end{aligned} \quad (4)$$

The mass transfer Stanton number was used to avoid the uncertainty of the diffusion coefficient. The mass transfer Stanton number, St_m , was determined as:

$$St_m = \frac{h_m}{u} \quad (5)$$

where u is the averaged velocity in the channel, determined by the flow rate in the test section.

The heat-mass transfer analogy yields:

$$St_c = St_m \left(\frac{Pr}{Sc} \right)^{2/3} \quad (6)$$

where St_h is the heat transfer Stanton number

The Schmidt number Sc was calculated using the Cho's correlation (1989) as function of surface temperature:

$$Sc = 2,28 \left(\frac{T}{298,16} \right)^{-0,1526} \quad (7)$$

The results were expressed in terms of Nusselt number through the expression:

$$Nu = St_h \cdot Re \cdot Pr \quad (8)$$

The Reynolds number for flow through the element of heat exchanger follows the conventional definition:

$$Re = \frac{u \cdot D_h}{\nu} \quad (9)$$

A hydraulic diameter of $D_h = 26$ mm was used in the experimental heat exchanger using the definition of Kays and London (1984).

Applying the ASME / ANSI PTC 19.1 methodology, the uncertainties in Re were estimated to be 4 percent and uncertainties in St_h were estimated to be 6,5 percent, for 95% of confidence level.

The term intensification used in this work was defined as the ratio between the Nusselt number of the fin surface with vortex generators (Nu) and the Nusselt number of the smooth fin surface (Nu_0).

RESULTS AND DISCUSSION

A parametric study was initiated with the variation of the delta winglet pair position for a constant aspect ratio ($\Lambda=2$) and attack angle $\beta=45^\circ$ with Reynolds number $Re=1000$. The results are showed in figures 8 to 11. Each curve corresponds to one line in which x/D was constant and the spanwise position ($\Delta y/D$) of the delta winglet pair was varied.

The curves showed that the values of intensification varied between 3-10 percent as function of the position. The strongest effect on the intensification was seen when the winglets were roughly one diameter apart ($\Delta y/D=1,0$) and 0,4 diameter behind the transversal axis of the tube ($x/D=0,4$).

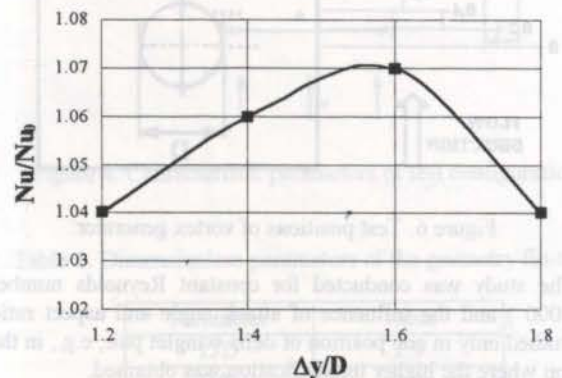


Figure 8. Influence of the vortex generator position on the heat transfer (for DWP aspect ratio $\Lambda=2$, attack angle $\beta=45^\circ$ and $x/D=0$).

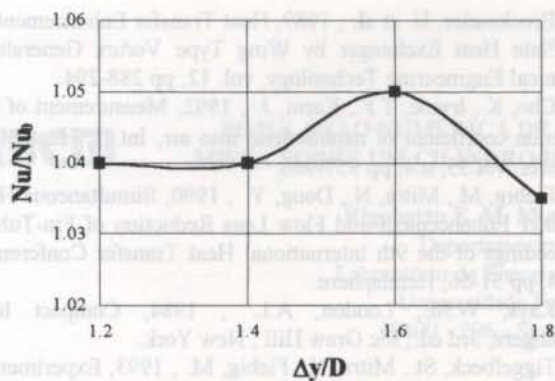


Figure 9. Influence of the vortex generator position on the heat transfer (for DWP aspect ratio $\Lambda=2$, attack angle $\beta=45^\circ$ and $x/D=0,2$).

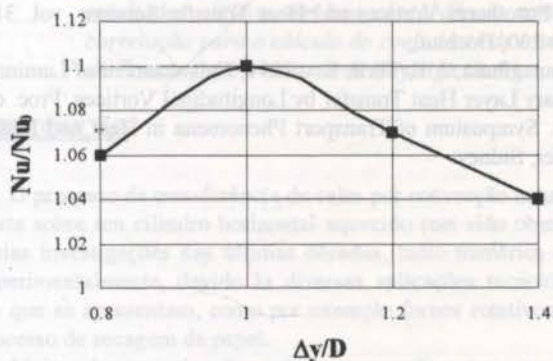


Figure 10. Influence of the vortex generator position on the heat transfer (for DWP aspect ratio $\Lambda=2$, attack angle $\beta=45^\circ$ and $x/D=0,4$).

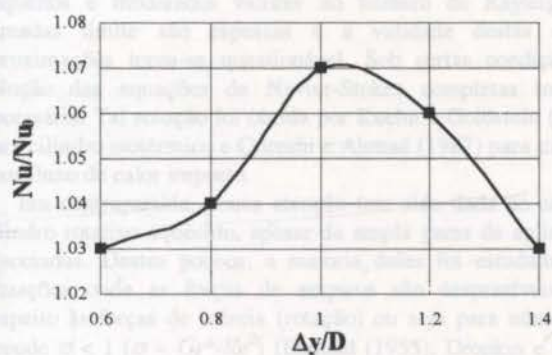


Figure 11. Influence of the vortex generator position on the heat transfer (for DWP aspect ratio $\Lambda=2$, attack angle $\beta=45^\circ$ and $x/D=0,6$).

The results for the delta winglet pair placed behind the tube ($x/D=0,4$ and $0,6$) indicated that the effectiveness of the vortex generators decreases when delta winglet pair position $\Delta y/D$ was superior to $1,0D$. For delta winglet pair positions downstream of the tube with $x/D \geq 0,8$, the values of intensification are small.

For the position $x/D=0,4$; $\Delta y/D=1,0$, relatively close to the tube, the stronger secondary flow generated by the delta winglet

pair acts on the recirculation region, increasing in a large amount the otherwise small heat transfer coefficient.

The results of Fiebig et al. (1990) were nearly similar to this work, with the point of maximum intensification in $x/D=0,5$; $\Delta y/D=1,0$. The differences are in the absolute values of intensification, 20% in Fiebig's work, probably caused because he used higher Reynolds number ($Re=3000$) and a channel with very large fin length downstream of the tube ($7D$ versus $1,45D$ in this work).

Influence of the attack angle.

For the best position of delta winglet pair, the attack angle was varied on the range of 15° to 60° with intervals of $7,5^\circ$ for aspect ratio $\Lambda=2$. The results of tests are shown in figure 12.

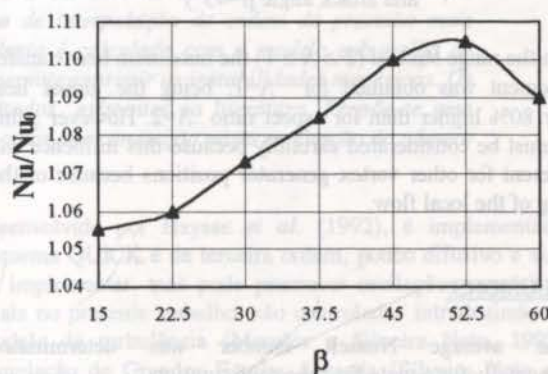


Figure 12. Influence of the vortex generator attack angle on the heat transfer (for DWP position $x/D=0,4$; $\Delta y/D=1,0$ and aspect ratio $\Lambda=2$).

It can be observed that intensification increases with the attack angle, attaining a maximum value at $\beta \approx 52,5^\circ$. Considering only the heat transfer intensification, $\beta \approx 52,5^\circ$ is the best attack angle. But it is known that the pressure losses increase with vortex generator attack angle, because the transversal area of the generator in respect to the flow direction is increased. According to this idea is possible that the best attack angle is smaller than $\beta=52,5^\circ$, which would be in accordance with the results of Fiebig (1990). These author obtained, by experimental studies of heat transfer and pressure losses, the best attack angle of $\beta=45^\circ$.

For $\beta=60^\circ$, it was seen a diminution in the intensification factor. This result is in agreement with the results obtained by Tiggelbeck et al. (1993). This vortex generator performance is explained by the fact that the vortex intensity grows with increasing of attack angle until a determined value (critical value). Beyond this value the vortex intensity decreases, leading to similar effect on heat transfer.

Influence of aspect ratio of the vortex generator.

The influence of aspect ratio was studied for the best position of the delta winglet pair in terms of heat transfer enhancement ($x/D=0,4$; $\Delta y/D=1,0$). The attack angle of the winglets was set to $\beta=45^\circ$.

The influence of aspect ratio on the heat transfer is shown in the figure 13. The results indicate that the global heat transfer increases with the aspect ratio reduction.

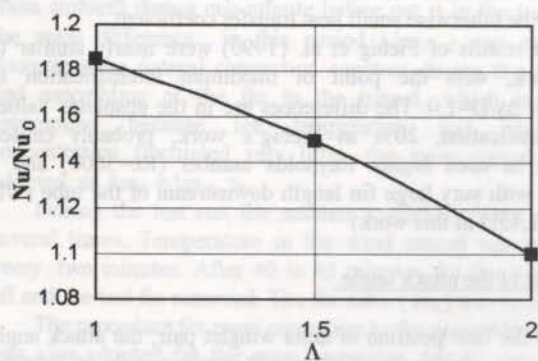


Figure 13. Influence of the vortex generator aspect ratio on the heat transfer (for DWP position $x/D=0,4$; $\Delta y/D=1,0$ and attack angle $\beta=45^\circ$)

On the range studied ($2 \geq \Lambda \geq 1$) the maximum heat transfer enhancement was obtained for $\Lambda=1$, being the global heat transfer 80% higher than for aspect ratio $\Lambda=2$. However, this result must be considered carefully because this influence can be different for other vortex generator positions because of the skewing of the local flow.

CONCLUSIONS

The average Nusselt number was determined experimentally for a plate fin-tube configuration.

The results showed that with the application of delta winglet pair it is possible to enhance the heat transfer on the air side. Heat transfer augmentation of 10% with aspect ratio $\Lambda=2$ and 18% with $\Lambda=1$ was obtained.

The best winglet position for the intensification was found to be $x/D=0,4$ and $\Delta y/D=1,0$. It was verified that the maximum intensification is obtained with aspect ratio equal to 1.

The heat transfer augmentation is influenced by the attack angle of the vortex generators, with the best results when β is close to $52,5^\circ$.

The results of intensification as function of attack angle and aspect ratio can vary with the vortex generator position because the local velocity in the fin-tube configuration has strong dependence with the position. Hence, the study about the use of vortex generators in fin-tube heat exchanger must be complemented by an evaluation of the influence of the attack angle for different winglet positions.

REFERENCES

Ambrose, D., Lawreson, I.J., Sparke, C.H.S., 1975, The vapor pressure of naphthalene, *Journal Chem. Thermodynam.*, vol 7, pp 1173-1176.

Bergles, A. E., 1991, Heat Transfer Enhancement - Second Generation Heat Transfer Technology, Proc. of the 11th ABCM Mechanical Engineering Conference, São Paulo.

Biswas, G., Chattopadhyay, H., Heat Transfer in a Channel with Built-in Wing Type Vortex Generators, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, n 4, pp 803-814, 1992.

Biswas, G, Mitra N.K., Fiebig, M., 1994, Heat Transfer Enhancement in Fin-Tube Heat Exchangers by Winglet Type Vortex Generators, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 37, n 2, pp 283-291.

Brockmeier, U. et al., 1989, Heat Transfer Enhancement in Fin-Plate Heat Exchanger by Wing Type Vortex Generators, *Chemical Engineering Technology*, vol. 12, pp 288-294.

Cho, K., Irvine, T.F., Karni, J., 1992, Measurement of the diffusion coefficient of naphthalene into air, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol 35, n 4, pp 957-966.

Fiebig, M., Mitra, N., Dong, Y., 1990, Simultaneous Heat Transfer Enhancement and Flow Loss Reduction of Fin-Tubes, Proceedings of the 9th International Heat Transfer Conference, vol. 4, pp 51-56, Hemisphere.

Kays, W.M., London, A.L., 1984, Compact heat exchangers, 3rd ed., Mc Graw Hill, New York.

Tiggelbeck, St., Mitra, N., Fiebig, M., 1993, Experimental Investigations of Heat Transfer Enhancement and Flow Losses in a Channel with Double Rows of Longitudinal Vortex Generators. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 36, n. 9, pp 2327 - 2337.

Valencia, A., Fiebig, M., Mitra, N. K., 1993, Experimental Investigation of Heat Transfer and Flow Loss in a Fin-Tube Heat Exchanger Element with Longitudinal Vortex Generators, Proc. of the Eurotherm Vortices and Heat Transfer Seminar, vol. 31, pp 224-230, Bochum.

Yanagihara, J. I., Torii, K., 1991, Enhancement of Laminar Boundary Layer Heat Transfer by Longitudinal Vortices, Proc. of 4th Int. Symposium of Transport Phenomena in Heat and Mass Transfer, Sidney.



SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE GRANDES ESCALAS DA CONVECÇÃO MISTA SOBRE UM CILINDRO HORIZONTAL AQUECIDO EM ROTAÇÃO

Rigoberto E. M. Morales e Aristeu da Silveira Neto

Departamento de Engenharia Mecânica
Laboratório de Energia e Dinâmica dos Fluidos - LEDIF
Universidade Federal de Uberlândia - UFU
38400 - 206 - Santa Mônica - Uberlândia - MG



RESUMO

No presente trabalho é estudada a convecção mista sobre um cilindro horizontal aquecido. É utilizado o método de discretização dos volumes finitos com malhas co-localizadas. Apresenta-se a modelagem da turbulência do tipo sub-malha como uma ferramenta para o controle de instabilidades numéricas que normalmente se manifestam quando se utiliza um esquema de interpolação de ordem de precisão mais elevada tal como o esquema QUICK. A viscosidade turbulenta é calculada com o modelo sub-malha de Smagorinsky. Mostra-se que a técnica de controle proposta permite suprimir as instabilidades numéricas. Os resultados obtidos tem boa concordância com outros resultados existentes na literatura. Propõe-se uma correlação para o cálculo do coeficiente de transferência de calor por convecção mista em função do número de Froude (σ) e o número de Rayleigh (Ra^*).

INTRODUÇÃO

O processo de transferência de calor por convecção natural e mista sobre um cilindro horizontal aquecido tem sido objeto de várias investigações nas últimas décadas, tanto numérica como experimentalmente, devido às diversas aplicações tecnológicas em que se apresentam, como por exemplo fornos rotativos e no processo de secagem de papel.

Muitas das investigações sobre a convecção natural em torno de um cilindro horizontal foram feitas utilizando-se aproximações do tipo camada limite (Churchil e Chu (1975), Raithby e Hollands (1976)). Nestas circunstâncias, os efeitos de curvatura e diferenças de pressões através da camada limite são desprezados, o que torna tais resultados satisfatórios apenas para valores maiores do número de Rayleigh ($Ra^* = 10^4$). Para pequenos e moderados valores do número de Rayleigh, as camadas limite são espessas e a validade destas usuais aproximações torna-se questionável. Sob certas condições, a solução das equações de Navier-Stokes completas torna-se necessária. Tal solução foi obtida por Kuehn e Goldstein (1980) para cilindro isotérmico e Qureshi e Ahmad (1987) para cilindro com fluxo de calor imposto.

Em contrapartida, pouca atenção tem sido dada ao caso do cilindro rotativo aquecido, apesar da ampla gama de aplicações associadas. Destes poucos, a maioria deles foi estudada para situações onde as forças de empuxo são desprezíveis com respeito às forças de inércia (rotação) ou seja para número de Froude $\sigma < 1$ ($\sigma = Gr^*/Re^2$) (Etemad (1955), Dropkin e Carmi (1957)). No entanto, para o caso onde as forças de empuxo são importantes existem ainda poucos trabalhos existentes na literatura (Ball (1987), Morales (1996)).

No presente trabalho, simula-se numericamente a convecção natural e mista sobre um cilindro horizontal aquecido (fluxo de calor imposto) ou seja, as forças de inércia e de empuxo são importantes. O estudo é feito em duas dimensões e em regime transiente. No caso da convecção mista, variou-se o número de Reynolds, baseado na velocidade de rotação do cilindro ($Re = 2\omega R^2/\nu$).

A técnica de volumes finitos desenvolvida por Patankar (1980) com malhas co-localizadas proposta por Marchi *et al.* (1989) é utilizada. O esquema de interpolação QUICK

desenvolvido por Hayase *et al.* (1992), é implementado. O esquema QUICK é de terceira ordem, pouco difusivo e simples de implementar, mas pode promover oscilações numéricas, as quais no presente trabalho, são controladas introduzindo-se um modelo de turbulência (Morales e Silveira Neto, 1995). A Simulação de Grandes Escalas é usada (Silveira Neto *et al.*, 1993) com um modelo de turbulência do tipo Sub-Malha.

EQUAÇÕES GOVERNANTES E CONDIÇÕES DE CONTORNO

O estudo da convecção natural num cilindro horizontal aquecido é governado pelas equações da continuidade, conservação da quantidade de movimento e conservação da energia. O escoamento é considerado incompressível, e utiliza-se a hipótese de Boussinesq para se modelar a força de empuxo.

Em simulação de grandes escalas, cada variável f é decomposta em uma parte relativa ao campo de grandes escalas e outra relativa ao campo sub-malha:

$$f = \bar{f} + f' \quad (1)$$

O campo de grandes escalas é separado do campo sub-malha com a ajuda de um filtro G , definido como segue:

$$\bar{f}(\bar{x}) = \int_D G(\bar{x} - \bar{x}') f(\bar{x}') d\bar{x}' \quad (2)$$

Aplicando-se o filtro às equações governantes (ver Silveira Neto *et al.*, 1993), obtém-se as seguintes relações:

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v} \bar{v}) = -\frac{1}{\rho_0} \nabla \bar{p} + \beta \Delta \bar{T} \bar{g} + \nabla \cdot [\nu \nabla \bar{v} - \bar{v} \bar{v}'] \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v} \bar{T}) = \nabla \cdot (\kappa \nabla \bar{T} - \bar{v} \bar{T}') \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \bar{v} = 0 \quad (5)$$

A barra sobre as variáveis indica a operação de filtragem; o termo $\overline{v'v'}$ é o tensor de Reynolds sub-malha e $\overline{v'T'}$ é o fluxo turbulento de energia térmica. O tensor de Reynolds é modelado com a seguinte equação, proposta por Boussinesq:

$$-\overline{v'v'} = 2\nu_t \overline{S}_{ij} - \frac{2}{3} K_s \delta_{ij} \quad (6)$$

onde K_s é a energia cinética turbulenta sub-malha, δ_{ij} é o delta de Kronecker e \overline{S}_{ij} é a taxa de deformação, dada pela seguinte equação:

$$\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (7)$$

O problema estudado é governado por equações de conservação definidas em coordenadas cilíndricas. Transformando-se as equações filtradas, linearizando-se os termos que incorpora a viscosidade e a difusão turbulentas e adimensionalizando-as de acordo com Balparda *et al.* (1994), obtém-se as seguintes equações:

$$\frac{\partial(r\overline{u})}{\partial r} + \frac{\partial \overline{v}}{\partial \theta} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial \overline{u}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\overline{u}\overline{u})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\overline{v}\overline{u})}{\partial \theta} - \frac{\overline{v}^2}{r} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial r} + Gr^* \overline{T} \sin \theta + (1 + \nu_t^*) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial \theta} \right) - \frac{2}{r^2} \frac{\partial \overline{v}}{\partial \theta} \frac{\overline{u}}{r} \right] \quad (9)$$

$$\frac{\partial \overline{v}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\overline{u}\overline{v})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\overline{v}\overline{v})}{\partial \theta} + \frac{(\overline{u}\overline{v})}{r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial \overline{p}}{\partial \theta} + Gr^* \overline{T} \cos \theta + (1 + \nu_t^*) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{v}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \overline{v}}{\partial \theta} \right) + \frac{2}{r^2} \frac{\partial \overline{u}}{\partial \theta} \frac{\overline{v}}{r} \right] \quad (10)$$

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\overline{u}\overline{T})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\overline{v}\overline{T})}{\partial \theta} = \left(\frac{1}{Pr} + \frac{\alpha_t}{\nu} \right) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \overline{T}}{\partial \theta} \right) \right] \quad (11)$$

onde $\nu_t^* = \frac{\nu_t}{\nu}$ é a viscosidade turbulenta adimensional. A viscosidade turbulenta ν_t é calculada com o modelo de Smagorinsky (1963):

$$\nu_t = (C_s \ell)^2 \sqrt{2 \overline{S}_{ij} \overline{S}_{ij}} \quad (12)$$

onde C_s é uma constante empírica, denominada constante de Smagorinsky, a ser ajustada, ao modelo numérico. O comprimento característico ℓ é definido pela relação:

$$\ell = \sqrt{r \Delta \theta \Delta r} \quad (13)$$

A difusividade térmica turbulenta α_t é calculada com um

número de Prandtl turbulento $\frac{\nu_t}{\alpha_t} = 0,6$ (ver Silveira Neto *et al.*, 1991).

As condições de contorno são estabelecidas como segue, sendo na sequência, relativas à superfície do cilindro, à região de entrada de massa e à região de saída de massa:

- Na superfície do cilindro

$$u(R, \theta, t) = 0; \quad v(R, \theta, t) = 0; \quad -\frac{\partial T}{\partial r}(R, \theta, t) = 1; \quad (14)$$

- Na entrada do domínio:

$$\frac{\partial u}{\partial r}(\infty, \theta, t) = 0; \quad v(\infty, \theta, t) = 0; \quad T(\infty, \theta, t) = 1; \quad (15)$$

- Na saída do domínio:

$$\frac{\partial u}{\partial r}(\infty, \theta, t) = 0; \quad v(\infty, \theta, t) = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial r}(\infty, \theta, t) = 0. \quad (16)$$

MÉTODO DE DISCRETIZAÇÃO E ESQUEMA DE INTERPOLAÇÃO

O método de discretização utilizado é o método dos volumes finitos, desenvolvido por Patankar (1980), com malhas deslocadas e recentemente reestruturado com malhas localizadas por Marchi *et al.* (1989) e utilizado por Balparda *et al.* (1994). A integração das equações é feita sobre o volume de controle esquematizado na figura 1.

Utiliza-se o esquema QUICK (Hayase *et al.*, 1992) para interpolação das variáveis na superfície de controle. Quando as velocidades transportantes são maiores que zero, tem-se:

$$\phi_w = \phi_p + \frac{1}{8} (-\phi_E - 2\phi_p + 3\phi_w), \quad (17)$$

$$\phi_e = \phi_E + \frac{1}{8} (-\phi_{EE} - \phi_E + 3\phi_p), \quad (18)$$

onde ϕ representa uma variável generalizada. Da mesma maneira são obtidas expressões similares para as interfaces na direção "r", ou seja ϕ_r e ϕ_n . Relações parecidas podem ser obtidas quando as velocidades transportantes são menores que zero.

Para a integração das equações sobre o volume de controle mostrado na figura (1), utiliza-se um esquema explícito para as velocidades e temperatura, e um esquema implícito para a pressão. Obtém-se, para uma variável generalizada, a seguinte expressão:

$$B_{p\phi} \phi_p^{n+1} = A_{p\phi} + L[p^\phi]^{n+1} \Delta V \quad (19)$$

onde

$$A_{p\phi} = \sum (a_{nb} \phi_{nb}^n) + \frac{\Delta V}{\Delta t} \phi_p^n + L[S^\phi], \quad (20)$$

$$B_{p\phi} = \frac{\Delta V}{\Delta t}$$

$L[p^\phi]$ e $L[S^\phi]$ são os termos de pressão e o termo fonte na suas formas integradas; n representa o tempo precedente, $n+1$ representa o tempo atual, nb e NB representa os valores da

propriedade ϕ na interface e centro do volume de controle respectivamente.

O código computacional desenvolvido originalmente por Balparda *et al.* (1994) é utilizado para implementar as equações discretizadas obtidas. A equação (19) quando escrita para a pressão dá origem a um sistema linear que é resolvido pelo método TDMA linha por linha (Patankar, 1980).

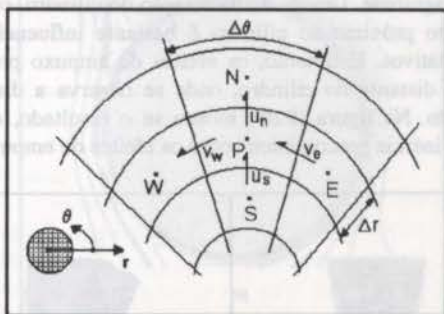


Figura 1. Volume de controle para integração espacial.

RESULTADOS NUMÉRICOS

A seguir são apresentados resultados da simulação do escoamento em convecção natural sobre um cilindro horizontal aquecido. Os cálculos foram realizados com uma malha de 112x30 pontos em (r, θ) o domínio de cálculo é de seis vezes o valor do raio ($6R$).

Como já foi citado o esquema convectivo utilizado é o QUICK. Este esquema é pouco difusivo e simples de implementar, mas promove oscilações numéricas, as quais são indesejáveis porque mascaram os resultados e podem, até mesmo, provocar divergências numéricas nos cálculos. Estas oscilações podem ser combatidas por meio de artifícios numéricos (Marchi, 1993). Outra forma de combatê-las é através do uso de um modelo de turbulência. Detalhes sobre esta metodologia podem ser encontrados em Morales (1996), Morales e Silveira Neto (1995) e Silveira Neto *et al.* (1993).

Depois de uma série de simulações, as instabilidades numéricas são controladas sem afetar a física do problema, com o coeficiente de Smagorinsky $C_s = 0,32$. A seguir são apresentados os resultados para a transferência de calor por convecção natural e mista.

Na figura (2) mostra-se o campo de temperatura sobre um cilindro aquecido. O fluxo de calor q'' é tal que $Ra^* = 1 \times 10^7$. O fluido se movimenta na vertical, devido ao processo de aquecimento gerado pelo cilindro. Na figura (3) mostra-se o escoamento em convecção natural sobre o cilindro. O qual é visualizado com a ajuda das linhas de corrente. Comparando estes resultados com Balparda *et al.* (1994) percebe-se que realmente houve uma redução significativa da difusão artificial.

A figura (4) mostra o número de Nusselt médio como função do número de Rayleigh. Como se pode observar, os resultados obtidos concordam com os resultados numéricos obtidos por Qureshi e Ahmad (1987) e com a solução analítica de Churchill e Chu (1975).

Na figura (5), mostra-se a variação temporal do número de Nusselt com o tempo para o cilindro aquecido com $Ra^* = 1 \times 10^5$. Pode-se observar uma queda do número de Nusselt entre 0 e 10 segundos, devida ao fato que, no começo, a troca de calor por convecção é fraca, e à medida que esta aumenta provoca-se uma circulação no meio adjacente ao cilindro. Isto faz a troca de calor fraca e portanto o número de Nusselt baixo. Depois de 10 segundos o escoamento tende a se estabilizar para depois atingir o regime desenvolvido no qual o número de Nusselt tende a um valor constante.

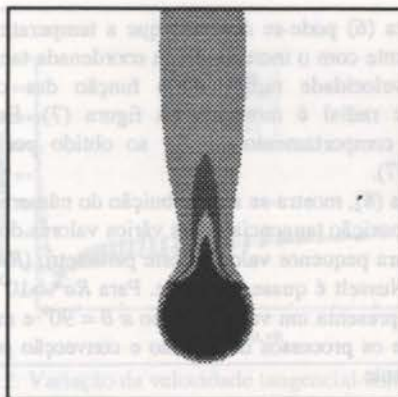


Figura 2. Campo de temperatura obtido com o esquema QUICK e modelo de turbulência, $C_s = 0,32$; $Ra^* = 1 \times 10^7$; $Pr = 0,7$; $t = 12$ seg..

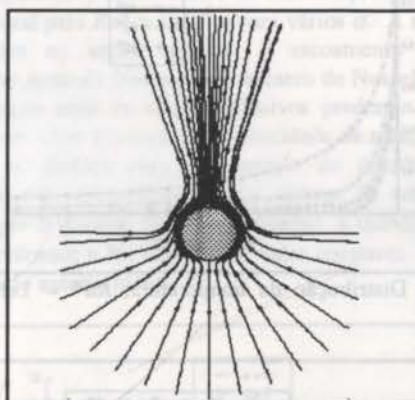


Figura 3. Escoamento em convecção natural visualizado com a ajuda das linhas de corrente, esquema QUICK e modelo de turbulência com $C_s = 0,32$; $Ra^* = 1 \times 10^7$; $Pr = 0,7$; $t = 12$ seg..

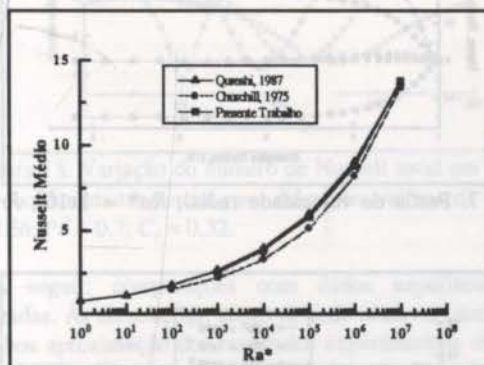


Figura 4. Número de Nusselt médio para convecção natural sobre um cilindro horizontal aquecido; $Pr = 0,7$.

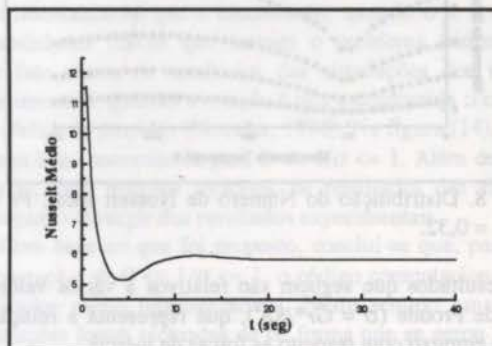


Figura 5. Variação do número de Nusselt com o tempo; para $Ra^* = 1 \times 10^5$; $Pr = 0,7$.

Na figura (6) pode-se observar que a temperatura decresce assintoticamente com o incremento da coordenada tangencial. Os perfis da velocidade radial como função das coordenadas tangencial e radial é mostrado na figura (7). Estas figuras apresentam comportamento similar ao obtido por Qureshi e Ahmad (1987).

Na figura (8), mostra-se a distribuição do número de Nusselt local com a posição tangencial, para vários valores de número de Rayleigh. Para pequenos valores deste parâmetro ($Ra^* < 10^3$), o número de Nusselt é quase uniforme. Para $Ra^* > 10^3$, o número de Nusselt apresenta um valor mínimo a $\theta = 90^\circ$ e máximo a $\theta = 270^\circ$, onde os processos de difusão e convecção predominam respectivamente.

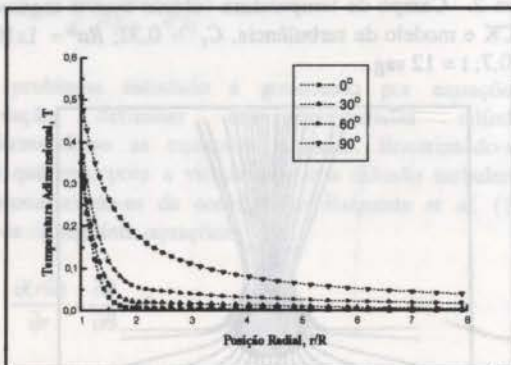


Figura 6. Distribuição da temperatura; $Ra^* = 1 \times 10^5$; $Pr = 0,7$.

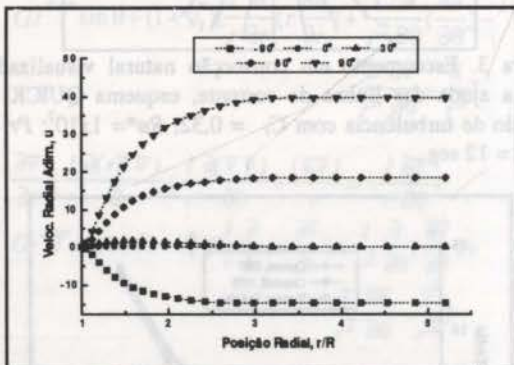


Figura 7. Perfis de velocidade radial; $Ra^* = 1 \times 10^5$; $Pr = 0,7$.

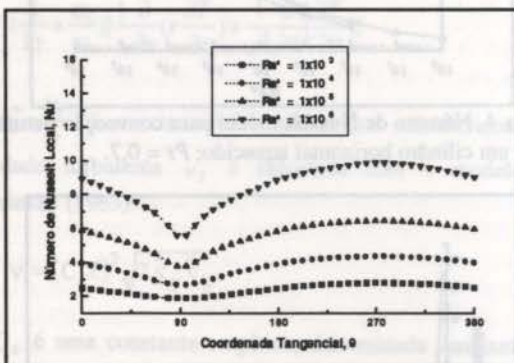


Figura 8. Distribuição do Número de Nusselt local; $Pr = 0,7$; $C_s = 0,32$.

Os resultados que seguem são relativos a vários valores do número de Froude ($\sigma = Gr^*/Re^2$), que representa a relação das forças de empuxo com respeito às forças de inércia.

Na figura (9), mostra-se o campo de temperatura para diferentes velocidades de rotação. Pode-se observar que a baixa

velocidade de rotação (figura (9.b)), a região de maior nível de aquecimento, onde a difusão predomina, é levemente deslocada à esquerda da posição $\theta = 90^\circ$, isto porque as linhas de corrente sofrem consideráveis mudanças (Morales, 1996). Neste caso o efeito de empuxo é predominante, como mostra a figura.

Na figura (9.c), mostra-se o resultado para $\sigma = 1$, nesta situação as forças de inércia e as forças de empuxo são da mesma magnitude. Devido à alta rotação do cilindro, o campo de escoamento próximo ao cilindro é bastante influenciado pelos efeitos rotativos. Entretanto, os efeitos de empuxo predominam na região distante do cilindro, onde se observa a distorção do escoamento. Na figura (9.d) mostra-se o resultado, quando os efeitos de inércia predominam sobre os efeitos de empuxo.

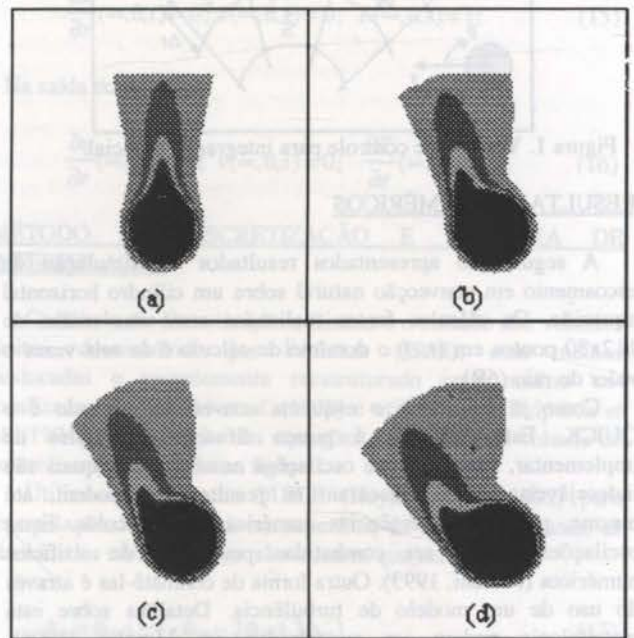


Figura 9. Escoamento sobre o cilindro rotativo visualizado com a ajuda do campo de temperatura; $Ra^* = 1 \times 10^6$; $Pr = 0,7$; $C_s = 0,32$; (a) $Re = 0$, $\sigma = \infty$ (0 rpm); (b) $Re = 290$, $\sigma = 2$ (52 rpm); (c) $Re = 410$, $\sigma = 1$ (75 rpm); (d) $Re = 557$, $\sigma = 0,5$ (110 rpm).

Na figura (10), mostra-se uma ampliação do escoamento junto ao cilindro para três rotações distintas, 52 rpm., 110 rpm. e 360 rpm. O primeiro fato que se nota é que mesmo a 52 rpm (figura (10.a)) o ponto de estagnação do escoamento perde o contato com o cilindro, nesta figura já se observa linhas de corrente que se fecham em círculo, o que mostra o aprisionamento de uma camada de fluido. Nas figuras (10.b) e (10.c) vê-se que o ponto de estagnação se afasta cada vez mais à medida que a rotação aumenta. A camada de fluido aprisionada e rotativa se torna cada vez mais espessa e isola cada vez mais o cilindro dos efeitos de empuxo (convecção). Com isto verifica-se que a medida que a rotação aumenta os efeitos de empuxo sobre o número de Nusselt tornam-se cada vez menores, enquanto que os efeitos de inércia passam a predominar sobre ele (Ball, 1987).

As distribuições da velocidade tangencial a 0° e 180° são mostradas nas figuras (11) e (12) respectivamente, para diferentes valores de σ . A $\theta = 0^\circ$, os efeitos de inércia e empuxo estão no mesmo sentido, o que conduz a uma velocidade tangencial mais alta próximo ao cilindro, em função da velocidade de rotação. Com o aumento da velocidade de rotação do cilindro, também se pode observar que a velocidade em regiões mais afastadas diminui. Isto se deve ao fato que a espessura da camada limite diminui com o aumento da rotação, como se pode observar na figura (11). A $\theta = 180^\circ$ (figura (12)),

acontece o inverso do observado a $\theta = 0^\circ$. Os efeitos de inércia e empuxo estão em sentidos contrários, o que conduz a uma queda na velocidade tangencial próximo ao cilindro. Observa-se também um aumento na espessura da camada limite com o aumento da rotação.

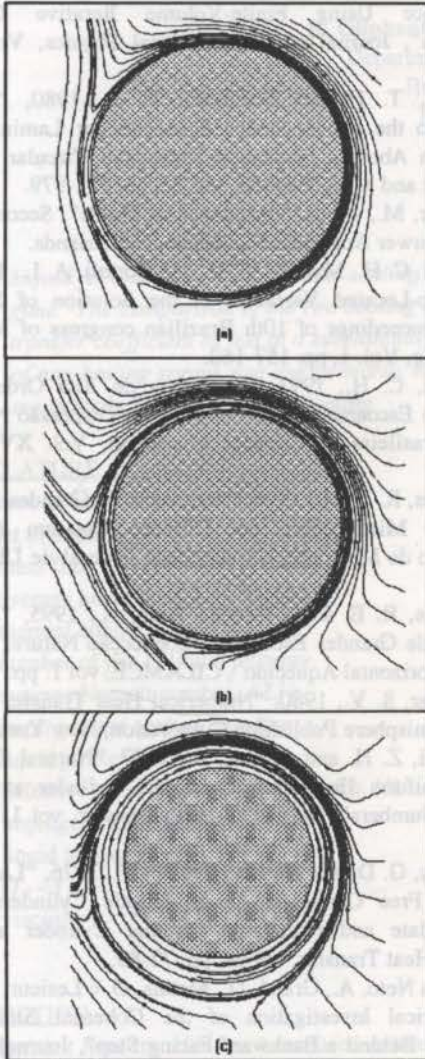


Figura 10. Linhas de corrente, onde se visualiza o deslocamento do ponto de estagnação; $Ra^* = 1 \times 10^6$; $Pr = 0,7$; $C_s = 0,32$; (a) $\sigma = 2$ (52 rpm); (b) $\sigma = 0,5$ (110 rpm); (c) $\sigma = 0,15$ (360 rpm).

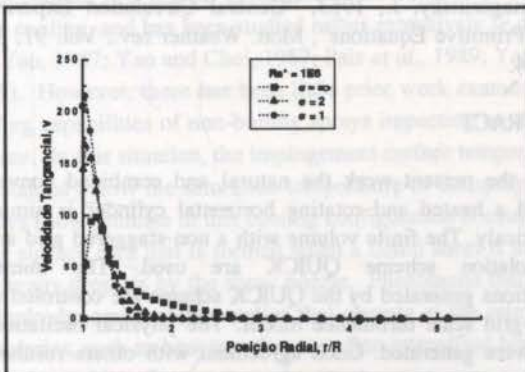


Figura 11. Variação da velocidade tangencial com a posição radial para diferentes valores de σ a 0° ; $Ra^* = 1 \times 10^6$; $Pr = 0,7$; $C_s = 0,32$.

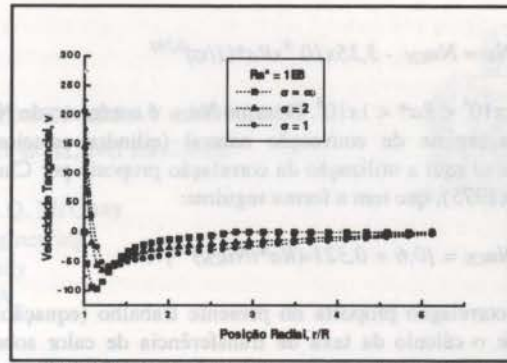


Figura 12. Variação da velocidade tangencial com a posição radial para diferentes valores de σ a 180° ; $Ra^* = 1 \times 10^6$; $Pr = 0,7$; $C_s = 0,32$.

Na figura (13) apresenta-se as distribuições do número de Nusselt local para $Ra^* = 1 \times 10^6$ e para vários σ . A $\sigma = \infty$, como se estudou na seção anterior, o escoamento é simétrico (convecção natural). Neste caso o número de Nusselt é mínimo a 90° , situação onde os efeitos difusivos predominam sobre os convectivos. Com a presença da velocidade de rotação este valor mínimo se desloca para a esquerda do cilindro, como já observado com a visualização dos campos de temperatura. À medida que σ diminui (rotação aumenta), o cilindro passa a se tornar isotérmico e Nu tende a um valor constante com θ , como já explicado anteriormente.

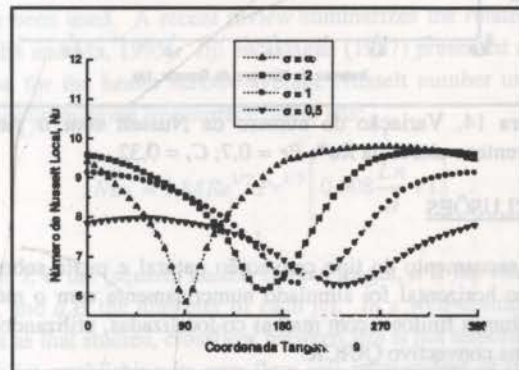


Figura 13. Variação do número de Nusselt local em função da coordenada tangencial para diferentes valores de σ ; $Ra^* = 1 \times 10^6$; $Pr = 0,7$; $C_s = 0,32$.

A seguir, comparações com dados experimentais são realizadas. As simulações, como se pode observar, permitem ter uma boa aproximação dos resultados experimentais obtidos por Ball (1987). Observa-se que o número de Nusselt decresce gradualmente com o incremento da velocidade de rotação para qualquer número de Rayleigh. Ball (1987) observa experimentalmente que o escoamento, quando $\sigma < 1$, apresenta instabilidades físicas que tornam o problema tridimensional. Este fato afasta os resultados das simulações dos resultados experimentais, quando a rotação é alta e predomina com respeito aos efeitos de empuxo (Morales, 1996). Na figura (14), observa-se uma boa concordância para $0 \leq 1/\sigma \leq 1$. Além deste valor, ou seja, para maiores rotações, os resultados das simulações começam a divergir dos resultados experimentais.

Com base no que foi proposto, conclui-se que, para a faixa de operação de $0 \leq 1/\sigma \leq 1$ o código computacional fornece resultados muito representativos. Neste sentido uma série de simulações foram efetuadas de tal forma que se gerou 30 pontos da função $Nu(\sigma, Ra^*)$ e uma correlação é apresentada neste trabalho:

$$Nu = Nu_{CN} - 3,35 \times 10^{-8} Ra^* (1/\sigma)^{0,783} \quad (21)$$

onde $1 \times 10^4 < Ra^* < 1 \times 10^8$. O termo Nu_{CN} é o número de Nusselt para o regime de convecção natural (cilindro estacionário). Propõe-se aqui a utilização da correlação proposta por Churchill e Chu (1975), que tem a forma seguinte:

$$Nu_{CN} = [0,6 + 0,321 \cdot (Ra^*/Nu_{CN})^{1/6}]^2 \quad (22)$$

A correlação proposta no presente trabalho (equação (21)) permite o cálculo da taxa de transferência de calor sobre um cilindro rotativo aquecido, na faixa de operação indicada, com um erro não superior a 5%. Os autores consideram este resultado o mais importante do trabalho e, a nosso conhecimento bibliográfico, ele é inédito.

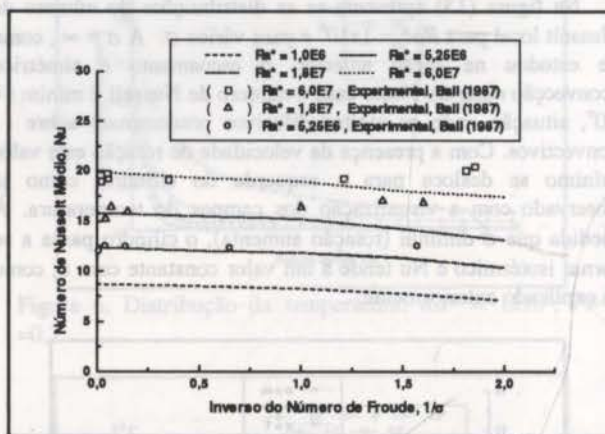


Figura 14. Variação do número de Nusselt com σ para diferentes valores da Ra^* ; $Pr = 0,7$; $C_s = 0,32$.

CONCLUSÕES

O escoamento do tipo convecção natural e mista sobre um cilindro horizontal foi simulado numericamente com o método dos volumes finitos e com malhas co-localizadas, utilizando-se o esquema convectivo QUICK.

As instabilidades numéricas apresentadas pelo esquema QUICK foram controladas com o uso do modelo de turbulência de tipo sub malha. Os resultados obtidos tem uma boa concordância com os existentes na literatura.

Considerando os bons resultados para $0 \leq 1/\sigma \leq 1$, propõe-se uma correlação para o cálculo do coeficiente médio de troca de calor, para o caso do cilindro rotativo.

BIBLIOGRAFIA

Ball, K. S., 1987, "Mixed Convection Heat Transfer in Rotating Systems", Ph.D. Thesis, Drexel University.

Balparada, A., Silveira Neto, A. and Duarte, M. A. V., 1994, "Numerical Analysis of a Two-Dimensional Natural and Forced Convection Around a Heated and Rotating Cylinder", 10th International Heat Transfer Conference, Brighton-UK.

Churchill, S. W. and Chu, H. H. S., 1975, "Correlating Equations for Laminar and Turbulent Free Convection from a Horizontal Cylinder", Int. J. Heat and Mass Transfer, vol 18, pp. 1049-1053.

Dropkin, D. and Carmi, A., 1957, "Natural Convection Heat Transfer from a Horizontal Cylinder Rotating in Air", Trans. ASME, vol. 79, pp. 741-749.

Etemad, G. A., 1955, "Free Convection Heat Transfer from a Rotating Horizontal Cylinder to Ambient Air with Interferometric Study of Flow", Trans. ASME, vol. 77, pp. 1284-1289.

Hayase, T., Humphrey, J. A. C. and Greif, R., 1992, "A consistently Formulated QUICK Scheme for Fast and Stable Convergence Using Finite-Volume Iterative Calculation Procedures", Journal of Computational Physics, Vol. 98, pp. 108-118.

Kuehn, T. H. and Goldstein, R. J., 1980, "Numerical Solution to the Navier-Stokes Equations for Laminar Natural Convection About a Horizontal Isothermal Circular Cylinder", Int. J. Heat and Mass Transfer, vol 23, pp. 971-979.

Lesieur, M., 1990, "Turbulence in Fluids", Second Revised edition, Kluwer Academic Publishers, Netherlands.

Marchi, C. H., Maliska, C. R. and Bortoli, A. L., 1989, "The Use of Co-Located Variables in the Solution of Supersonic Flows", Proceedings of 10th Brazilian congress of Mechanical Engineering, Vol. 1, pp. 157-160.

Marchi, C. H., 1993, "Esquemas de Alta Ordem para a Solução de Escoamentos de Fluidos sem Dispersão Numérica", Revista Brasileira de Ciências Mecânicas, Vol. XV-nº 3, pp. 231-249.

Morales, R. E. M., 1996, "Simulação de Grandes Escalas da Convecção Mista sobre um Cilindro Rotativo Aquecido", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

Morales, R. E. M. e Silveira Neto, A., 1995, "Simulação Numérica de Grandes Escalas da Convecção Natural Sobre um Cilindro Horizontal Aquecido", CILAMCE, vol 1, pp. 739-748.

Patankar, S. V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation, New York.

Qureshi, Z. H. and Ahmad, R., 1987, "Natural Convection from a Uniform Heat Flux Horizontal Cylinder at Moderate Rayleigh Numbers", Numerical Heat Transfer, vol 11, pp. 199-212.

Raithby, G. D. and Hollands, K. G. T., 1976, "Laminar and Turbulent Free Convection from Elliptic Cylinders, with a Vertical Plate and Horizontal Circular Cylinder as Special Cases", J. Heat Transfer, vol 98, pp. 72-80.

Silveira Neto, A., Grand, D., Metais, O. e Lesieur, M., 1993, "A Numerical Investigation of the Coherent Structures of Turbulence Behind a Backward-Facing Step", Journal of Fluids Mechanics, Vol. 256, pp. 1-25.

Silveira Neto, A., Grand, D., Metais, O. e Lesieur, M., 1991, "Simulation Numérique Bidimensionnelle d'un Écoulement Turbulent Stratifié Derrière une Marche", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 34, pp. 1999-2011.

Smagorinsky, J., 1963, "General Circulation Experiments With Primitive Equations", Mon. Weather rev., Vol. 91, 3, pp. 99-164.

ABSTRACT

In the present work the natural and combined convection around a heated and rotating horizontal cylinder is simulated numerically. The finite volume with a non-staggered grid and an interpolation scheme QUICK are used. The numerical oscillations generated by the QUICK scheme are controlled using a sub-grid scale turbulence model. The physical oscillations of flow were generated. Good agreement with others results was obtained. Correlation for heat transfer rate as function of Froude number (σ) and Rayleigh number (Ra^*) is presented.



AN EXPERIMENTAL COMPARISON OF LIQUID JET ARRAY AND SPRAY IMPINGEMENT COOLING IN THE NON-BOILING REGIME



K. Oliphant, B.W. Webb, and M.Q. McQuay
Department of Mechanical Engineering
Brigham Young University
Provo, UT 84602 USA

SUMMARY

Liquid jet and spray impingement cooling were studied experimentally and compared in the non-boiling regime. The comparison of the two cooling techniques revealed that spray cooling can provide the same heat transfer coefficient as jets at a substantially lower mass flux. It was proposed that the more effective cooling of non-boiling sprays was due primarily to the unsteady boundary layer resulting from droplet impact, and secondarily from evaporative cooling.

NOMENCLATURE

A	area of target heater surface
d	jet diameter
G	mass flux
\bar{h}	average heat transfer coefficient
k	thermal conductivity
n	number of jets in liquid jet array
Nu_L	average Nusselt number, $\bar{h}L/k$
q''	impingement surface heat flux
Re	liquid jet Reynolds number
Re^*	Effective spray Reynolds number, Eq. (4)
T_s	impingement surface temperature
T_{liq}	liquid temperature
ΔT	$(T_s - T_{liq})$
μ	viscosity

INTRODUCTION

Impingement heat transfer has been used extensively in industry because of the high rates of cooling it provides. Several reviews document the heat and mass transfer characteristics of both liquid (Webb and Ma, 1995) and gas (Livingood and Hrycak, 1973; Martin, 1977; Downs and James, 1987) jets. Boiling spray cooling is a logical extension to the concept of impingement cooling, and has been studied rather extensively (*e.g.*, Choi and Yao, 1987; Yao and Choi, 1987; Pais *et al.*, 1989; Yao *et al.*, 1989). However, there has been little prior work examining the cooling capabilities of non-boiling sprays impacting on a heated surface. In this situation, the impingement surface temperature is maintained below the saturation temperature of the spray liquid. Sprays show promise in this cooling configuration because of the large surface area that is formed when a liquid sheet is atomized into many droplets by the spray nozzle. Phenomena that depend on hydrodynamic mixing and/or that operate at the interface of boundaries, such as heat transfer, are often intensified because of this increased interface area.

A recent review of impinging liquid jets research reveals very high heat transfer rates at the stagnation point of the jet (Webb

and Ma, 1995). However, at a distance of two to three nozzle diameters from the stagnation point, the cooling rate is less than half that of the stagnation value. The high transport is confined largely to the stagnation flow, whereas the radial flow region is characterized by more moderate heat transfer coefficients. To avoid the severe non-uniformity in heat transfer arrays of jets have been used. A recent review summarizes the related work (Webb and Ma, 1995). Jiji and Dagan (1987) presented a correlation for the heater surface-average Nusselt number under an array of impinging free-surface liquid jets:

$$\overline{Nu}_L = 3.84 Re^{1/2} Pr^{1/3} \left[0.008 \frac{Ln}{d} + 1 \right] \quad (1)$$

Here, L is the (square) heated surface length, n is the number of jets, and d is the diameter of each jet. In a well-drained array such as that studied, crossflow between jets is not important with each jet establishing its own flow cell independent of the other jets. This is confirmed by the experiments of Pan and Webb (1995), whose array module-average Nusselt number was expressed empirically as

$$\overline{Nu}_d = 0.225 Re^{2/3} Pr^{1/3} e^{-0.095(s/d)} \quad (2)$$

where s is the center-to-center spacing of the jets in the array and d is the jet diameter.

While there is a considerable body of literature dealing with the heat transfer characteristics of impinging sprays where the surface temperature exceeds the saturation temperature of the liquid droplets (*e.g.*, Gu *et al.*, 1993), only limited study has treated sprays in the non-boiling regime. Early work focused on two-component (air/water) forced convective cooling of cylinders (Goldstein *et al.*, 1967; Hodgson *et al.*, 1968; Hodgson and Sunderland, 1968; Mednick and Colver, 1969; and Finlay, 1971). The problem has recently been revisited by Siwon and Wisniewski (1986), Ma and Tian (1990), Pais *et al.* (1992), and Sehmbey *et al.* (1992), and Graham and Ramadhyani (1996). The high transport capabilities of spray cooling is demonstrated

in the experimental results of Graham and Ramadhyani (1996), which reveal surface heat fluxes as high as 0.6 MW/m^2 with surface temperatures maintained below 70°C and 80°C with methanol and water sprays, respectively.

As suggested previously in the review of past investigations, work exists contrasting the heat transfer effectiveness of impinging liquid jets and sprays in the boiling regime. However, there appears to have been no prior work focusing on the heat transfer characteristics of non-boiling sprays and their liquid jet counterparts under carefully controlled conditions. The work to be reported here has as its objective an experimental comparison of non-boiling liquid jet array and spray cooling heat transfer at high liquid spray mass fluxes.

EXPERIMENTAL APPARATUS AND METHOD

A schematic of the experimental apparatus is shown in Fig. 1. The heater surface was oriented horizontally and arranged for downward jet or spray impingement. The liquid delivery system consisted of a liquid collection container encasing the heater module, heat exchanger, pump, filter, flow and pressure meters, spray or jet nozzle, and plenum chamber.

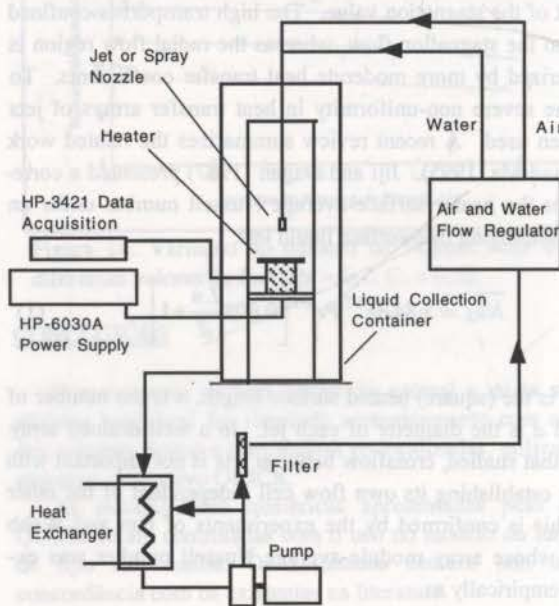


Figure 1 Schematic of flow loop.

Heater Module. The heater assembly is shown schematically in Fig. 2. The heater consisted of a 1.9 cm-diameter aluminum cylinder which was 7.62 cm long. A Lexan cover plate was press-fit onto the aluminum heater target end and a 10 cm diameter PVC tube was attached concentric to the heater module, encasing the aluminum cylinder. Eight radial grooves were milled in the liquid-exposed surface of the Lexan plate to prevent coolant from puddling on the heated surface. The annular space between the aluminum cylinder and the PVC tube, and the region below the heater were filled with Sylox silica insulation (thermal conductivity approximately $0.02 \text{ W/m}^2\text{K}$) to minimize the heat loss. A cylindrical, high-resistance, 500W, cartridge heater was inserted into a hole precision-bored in the bottom of the aluminum cylinder. Power to the cartridge heater was provided by a DC power supply with variable output from 0 - 1000 W. The power supply

output voltage and current were accurate to 0.1V and 0.01A, respectively. The aluminum cylinder dimensions were designed with the aid of a numerical model simulating the conduction in the heater (aluminum cylinder/Sylox/PVC) assembly. The cylinder diameter and the distance between the cartridge heater and the impingement surface distance were selected from model simulations aimed at maximizing the surface temperature uniformity (Oliphant, 1990).

Six T-type, 36-gauge, ceramic-encased, thermocouples were embedded in the aluminum cylinder to measure the heat transfer through the impingement face and determine the surface temperature. Three thermocouples were placed at axial locations below the surface of 0.25, 0.76, and 1.78 cm along the centerline of the cylinder, as shown in Fig. 3. The remaining three thermocouples were placed at the same axial locations (0.25, 0.76, and 1.78 cm below the surface), but radially outward from the center at the midpoint between the centerline and the outer edge at different angular positions (see Fig. 3). A digital data acquisition system was used to collect the temperature data. Slight unsteadiness in the temperature data observed in the spray mist cooling.

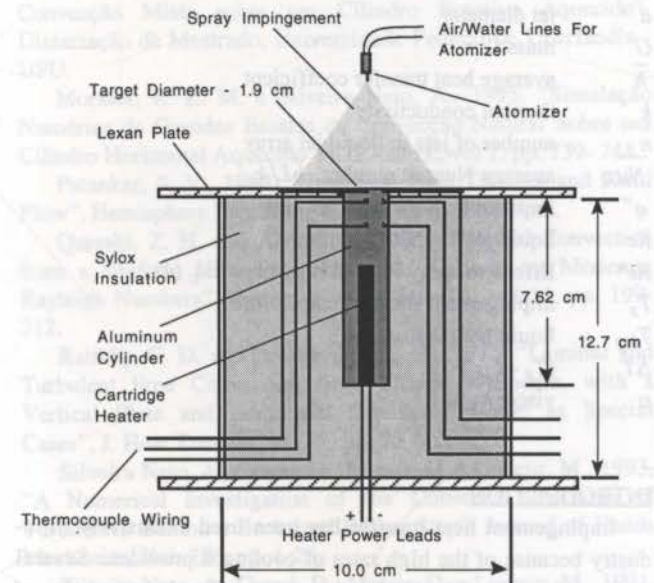


Figure 2 Schematic of aluminum cylinder and cartridge heater with Lexan cover plate exposing the target surface.

study of Graham and Ramadhyani (1996) for water were also found here. A number of measurements (typically between 10 and 50) were taken in order to establish statistically sound data.

The three centerline temperatures were used in a parabolic curve fit of temperature versus axial distance in the heated aluminum cylinder in order to determine the surface temperature and the heat transfer from the exposed surface. To check the accuracy of the heat flux and surface temperature calculations an energy balance was performed between the input and output power. The input power was determined from the voltage and current data. The output power was calculated from the sum of the centerline heat flux calculations (assuming uniform flux on the heater surface) and the heat loss through the heater sides, estimated with the three radial temperature measurements. The results for representative tests showed that the input and output

energy in the system differed by a maximum of 5.3%, suggesting that the centerline temperature measurements provided an accurate basis for the calculation of the average heat flux through the impingement face. This is consistent with the numerical model used to design the heater module, which predicted heat loss in the 5% range as well.

Average heat transfer coefficients for both the liquid jet arrays and the spray cooling were determined each experimental condition from the relation

$$\bar{h} = q'' / (T_s - T_{liq}) \quad (3)$$

where the average heat flux q'' and impingement surface temperature T_s were determined from the parabolic curve-fit of centerline temperature in the aluminum cylinder. The spray liquid temperature T_{liq} was measured with a thermocouple just upstream of the nozzle.

The parabolic curve fit of measured centerline temperatures in the heater was also used to estimate the uncertainty in the heat flux and surface temperature calculation. The uncertainty for a typical heat flux between 0.5 and 1.0 MW/m² was found to be approximately 10%, with the primary sources of error being the

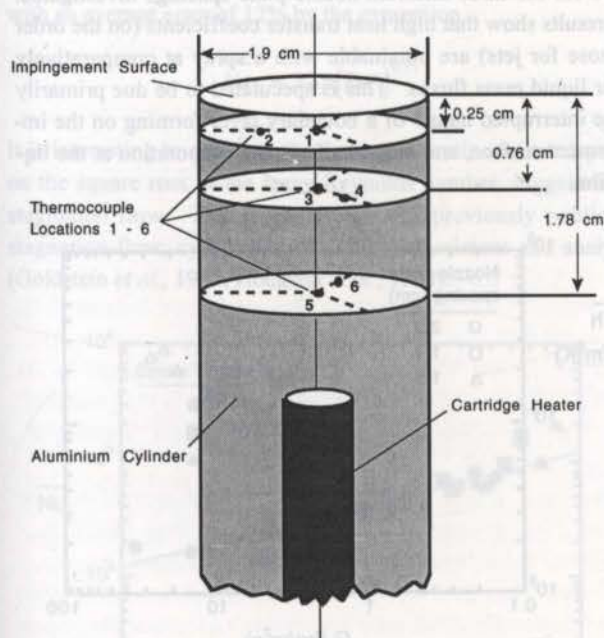


Figure 3 Thermocouple placement in heated cylinder.

temperature measurement and the uncertainty in placement of the thermocouples. The error in temperature difference between the spray and heated impingement surface, $T_s - T_{liq}$, was estimated to be less than 7%.

Jet Array Cooling. Experimental data were collected with several jet array configurations in this study in order to establish a common frame of reference for comparison with the spray data. In addition, the jet data were compared to previously published liquid jet array heat transfer information to validate the methods used to calculate the heat flux, surface temperature, etc. The liquid jet array was produced by connecting several different orifice plates to a 3.0 cm square cross-section plenum attached to the end of the liquid supply tube above the heater module. Three orifice plates were made of 6.35 cm thick aluminum plate in which noz-

zles were drilled to an accuracy of 0.01 mm. Two different jet diameters were investigated, 1.0 and 1.59 mm. Four- and seven-jet nozzle configurations were studied. The holes in the jet array were arranged such that each jet impinged at the centroid of an area equal to that fraction of the total heater surface area and the corresponding number of liquid jets. It was expected that this would give the most uniform cooling from the jet array. Liquid flow rate for the jet array supply was made using a rotameter with $\pm 5\%$ accuracy. Assuming equal distribution of flow through all nozzles in the array, the individual jet Reynolds numbers were in the following ranges:

$$\begin{aligned} 3150 \leq Re \leq 6190 & \quad d = 1.59 \text{ mm, seven-jet array} \\ 4960 \leq Re \leq 8700 & \quad d = 1.0 \text{ mm, seven-jet array} \\ 4040 \leq Re \leq 11,300 & \quad d = 1.0 \text{ mm, four-jet array} \end{aligned}$$

The three different jet array configurations were investigated for several flow rates in the Reynolds number ranges indicated.

Spray Cooling. The spray was generated by a commercially available, full-cone, air-assist atomizer (Delavan Airo Type B). This nozzle uses air introduced into the liquid flow to assist the atomization resulting in finely atomized droplets at high velocities. Manufacturer-specified droplet Sauter mean diameter and velocity were, respectively, 50 μm and approximately 3.0 m/s. Three different nominal liquid spray temperatures were investigated, 11.6, 30.7, and 49.2°C, respectively.

Liquid mass flux measurements were performed for the spray nozzle studies apparatus using a container constructed from a Plexiglass truncated cone fitted to a 100 ml volumetric flask. An orifice the exact size of the target surface (1.9 cm diameter) was machined in the truncated end such that there was a sharp edge at the lip of the orifice. The 1.9 cm-diameter orifice was positioned under the spray at nozzle-plate spacings used in the experiments. Liquid volume was accumulated over a measured time period to determine the total liquid mass flow, from which the average mass flux was calculated. Three collections were made for each mass flux with significant liquid accumulation to assure repeatability and minimize uncertainty in the measurement. The resulting uncertainty in liquid mass flux measured with this orifice device was estimated to be less than 4% (Oliphant, 1990).

For a commercial spray nozzle the liquid mass flux, velocity, and droplet size cannot be changed independently of one another. In order to investigate the dependence of heat transfer on mass flux the spray nozzle operating parameters and nozzle-plate spacing were. This changed the amount of liquid that impacted the heated surface due to the conical spread of the spray and its operating characteristics. However, it should be noted that this procedure may have resulted in a change in the spray parameters (droplet size, droplet velocity, etc.) at the impingement surface; in general, these parameters vary with nozzle operating conditions and position within the spray cone. The spray liquid mass flux was measured for each experimental condition, ranging from 1.0 to 30 kg/m²s.

RESULTS AND DISCUSSION

Jet Array Impingement. Experimental data were collected with multiple jets in this study in order to establish a common frame of reference for comparison with the spray data. In addition, the jet data was compared to previous work to validate methods used to calculate the heat flux and surface temperature. The results are

shown in Fig. 4, which is a plot of average heat transfer coefficient \bar{h} versus liquid mass flux, G , based on heater area.

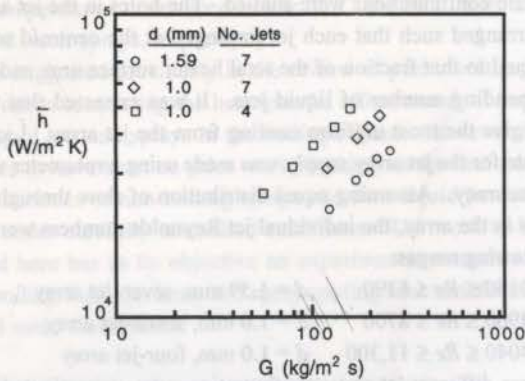


Figure 4 Variation of average heat transfer coefficient with mass flux for the liquid jet array.

As reported previously for liquid jet impingement (Webb and Ma, 1995), Fig. 4 shows that jet velocity plays a significant role in impingement cooling. For a given liquid mass flux and jet array configuration (e.g., the seven-jet configuration), the increase in velocity increases the heat transfer rate. However, comparing the seven- and four-jet configurations at the same jet diameter and liquid mass flux, one notices that the heat transfer coefficient is larger for the four-jet configuration. The decrease in number of jets would be expected to decrease the average heat transfer, since less of the surface is exposed to the high transport region in a stagnation zone. The decrease in the number of jets at a fixed mass flux, however, is offset by an increase in the jet velocity due to the reduction in total orifice area. The net effect is increased average heat transfer. This indicates that there is a trade-off between more jets for more stagnation region area and higher velocities for better stagnation point cooling. One possibility is to reduce the diameter of the jets as their number is increased so that the velocity remains unchanged. This would provide high stagnation point heat transfer over the entire surface. However, there is a point when the jet orifices become so small that clogging and pumping power considerations limit further reduction in orifice size. This optimization of liquid jet array variables is considered in detail by Maddox and Bar-Cohen (1994).

The empirical correlation of Jiji and Dagan (1987) incorporates a jet configuration factor that takes into account the number and size of jets, $(Ln/d + 1)$. However, this correlation presents a heater-average Nusselt number. The module-average Nusselt number correlation of Pan and Webb (1995) also includes nozzle configuration effects through the jet-to-jet spacing parameter s/d . The average heat transfer data obtained in this study were compared with the correlations of these previous investigations. The length scale L used in the Jiji and Dagan correlation was taken to be the square root of the surface area. The comparison with previous work is shown in Fig. 5. Excellent agreement is seen between the data and both correlations, lending confidence to the work reported here. Further, the excellent agreement confirms the validity of the heat flux and surface temperature calculations used here.

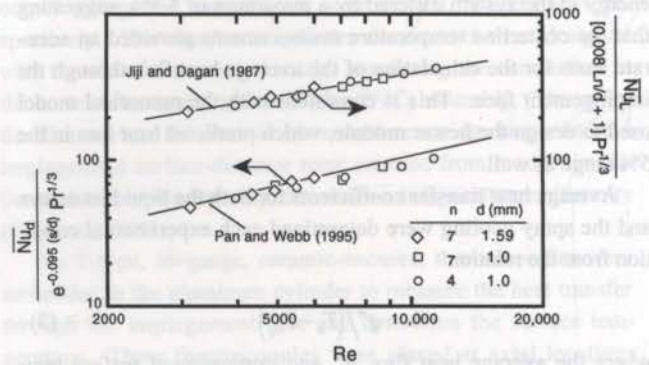


Figure 5 Comparison of liquid jet impingement heat transfer data from this study to previous data.

Spray Impingement. The results presented in this section focus on spray impingement heat transfer. Spray data was taken as a function of liquid mass flux for three different spray liquid temperatures. The dependence of average heat transfer data on mass flux at a spray liquid temperature of $T_{liq} = 11.6^\circ\text{C}$ is illustrated in Fig. 6 for the three different nozzle-plate spacings investigated. The results show that high heat transfer coefficients (on the order of those for jets) are obtainable with a spray at comparatively lower liquid mass fluxes. This is speculated to be due primarily to the interrupted nature of a boundary layer forming on the impingement surface, and secondarily to the evaporation at the liquid film.

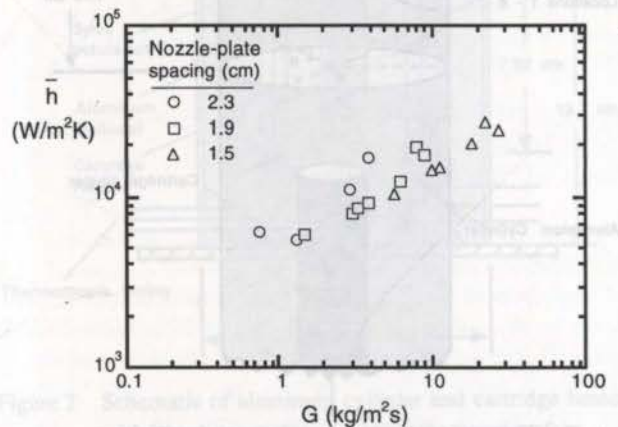


Figure 6 Variation of average heat transfer coefficient with mass flux for spray cooling.

Figure 6 also shows an approximately exponential increase in heat transfer with increasing mass flux as seen in jet impingement, though there is some indication that the dependence of \bar{h} on mass flux is even stronger. Further, there appears to be a slight but noticeable decrease in the average heat transfer coefficient (for the same mass flux) at higher nozzle-plate spacings. As explained previously, however, there is considerable scatter in the data. Even in light of the experimental uncertainty, there is evidence that, in some cases, the average heat transfer coefficient may actually increase slightly with decreasing liquid mass flux. This variability is thought to be caused by variations in spray droplet parameters. Droplet size and velocity were not measured in this study because of the high concentration of droplets, but

work done at a lower liquid mass flux shows that the velocity of the droplets can vary quite significantly with changes in air and water flow rates (Webb *et al.*, 1992). Because the air and water flow rates were changed in this study in order to change the mass flux, velocity changes probably also occurred which accounts for the scatter in the data. The implication is that the heat transfer in non-boiling spray impingement is a complex function of spray operating characteristics.

Even though droplet velocity and size could not be taken into account, the data of Fig. 6 suggest that the heat transfer may correlate loosely with spray liquid mass flux. A rough empirical correlation was developed using the data for all spray liquid temperatures. An effective spray Reynolds number was defined arbitrarily based on the target surface diameter and mass flux as

$$Re^* = Gd/\mu \quad (4)$$

The length scale for the average Nusselt number Nu_L was defined as the square root of the heater surface area. The properties of water at the temperature of the pre-impingement liquid spray were used in the analysis. The data thus normalized are illustrated in Fig. 7. All spray data presented in Fig. 7 were correlated with an average error of 12% by the expression

$$\overline{Nu}_L = 32.5(Re^*)^{0.51} \quad (5)$$

It is interesting to note that the average Nusselt number depends on the square root of the spray Reynolds number, suggestive of stagnation flow. This is consistent with previously published stagnation-flow, cylinder-in-crossflow experiment and analysis (Goldstein *et al.*, 1967; Hodgson *et al.*, 1968).

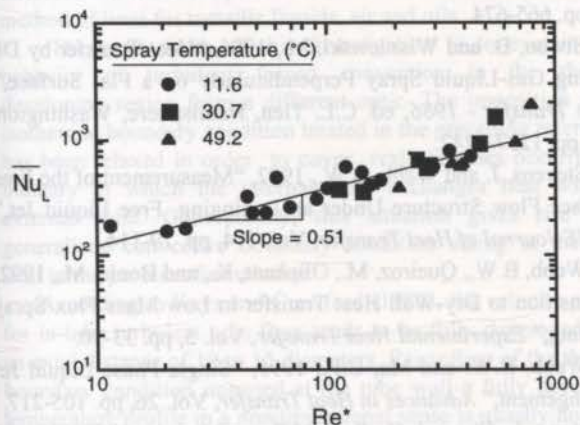


Figure 7 Dimensionless spray cooling data.

It should be underlined that Eq. (5) is incapable of predicting observed differences in average heat transfer as a function of the spray characteristics for a given liquid mass flux. Indeed, though extensive mass flux data were not taken in their study, Graham and Ramadhyani (1996) observed no clear trend between liquid mass flux and impingement surface heat flux. A more accurate correlation would need to account for variations in droplet velocity and size distribution. Further study is needed with non-boiling sprays to investigate the influence of droplet parameters (size distribution, velocity, mass flux, entrainment air, *etc.*) on the heat transfer, but the results of this work are sufficient to make a definitive comparison with jet array impingement.

Jet Array and Spray Comparison. The data for the non-boiling jet and spray cooling are plotted together in Fig. 8. Filled lines are added through the jet and spray data to facilitate quantitative comparison of the average heat transfer coefficient. The jets operate at higher levels of mass flux than the sprays and yet it is seen that the heat transfer for both cases is of the same order of magnitude. If the data for the spray configuration is extrapolated into the jet mass flux region, it is seen that the spray impingement is significantly more effective than the liquid jet arrays. It may be concluded that non-boiling spray impingement provides heat transfer on the order of jet impingement, but at a liquid mass flux nearly an order of magnitude lower than jets.

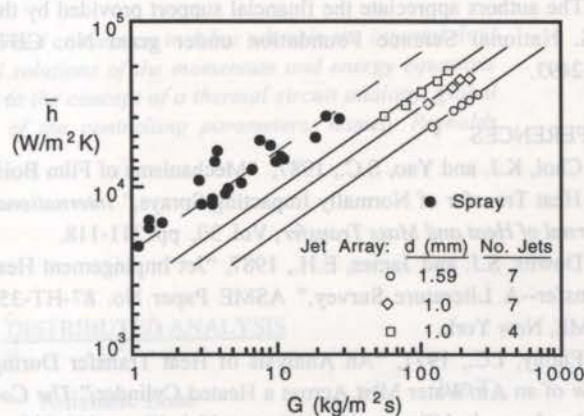


Figure 8 Comparison of jet and spray transport characteristics.

The significantly higher average heat transfer coefficient for non-boiling sprays suggests a different mechanism for heat transfer for single-phase jet and spray impingement. A liquid jet impinging on a heated surface creates a continuous flow of liquid which allows for the formation of a well defined thermal boundary layer in a relatively thick, rapidly moving film. Film thicknesses in the radial flow region ($r/d > 2$) under free-surface liquid jets have been measured to be on the order of 0.1 - 0.5 mm (Stevens and Webb, 1992). However, for spray impingement the spray forms a much thinner liquid layer on the impingement surface. Thicknesses for spray impingement have been measured to be 10 - 30 μm in the impingement region, and 50 μm radial outward for relatively low liquid mass fluxes (Siwon, 1993), and as high as 150 μm for very high fluxes (Yang *et al.*, 1992). The discrete and random nature of the droplet arrival creates a mixing effect that introduces low temperature droplets as discontinuities in the thin liquid film on the impingement surface. Hence, a steady monotonically decreasing temperature profile (or boundary layer effect) from the film surface to the free stream would not prevail as in liquid jet impingement. Further, the anticipated unsteady interface between the very thin liquid layer and the spray entrainment air provides for effective evaporative cooling. The result of the combined randomly interrupted and unsteady thermal boundary layer and evaporative cooling phenomenon is an increase in average heat transfer for sprays over jets in the non-boiling regime.

CONCLUSIONS

Single-phase jet and spray impingement cooling were studied experimentally and compared. Jet heat transfer was shown to be

dependent on the number and velocity of the impinging jets. Spray cooling demonstrated a strong, though not definitive dependence on mass flux. It was speculated that droplet velocity also affects the heat transfer, but further study is required to verify and quantify this effect. The comparison of the two cooling techniques showed that sprays can provide the same heat transfer as jets at a significantly lower liquid mass flux. It was proposed that the better cooling of sprays was due to the combined effect of evaporative cooling from the film along the impingement surface, and the unsteady thermal boundary layer expected in spray impingement.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors appreciate the financial support provided by the U.S. National Science Foundation under grant No. CBT-8552493.

REFERENCES

- Choi, K.J. and Yao, S.C., 1987, "Mechanisms of Film Boiling Heat Transfer of Normally Impacting Sprays," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 30, pp. 311-118.
- Downs, S.J. and James, E.H., 1987, "Jet Impingement Heat Transfer--A Literature Survey," ASME Paper No. 87-HT-35, ASME, New York.
- Finlay, I.C., 1971, "An Analysis of Heat Transfer During Flow of an Air/Water Mist Across a Heated Cylinder," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 49, pp. 333-339.
- Goldstein, M.E., Yang, W.-J., and Clark, J.A., 1967, "Momentum and Heat Transfer in Laminar Flow of Gas with Liquid-Droplet Suspension over a Circular Cylinder," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 89, pp. 185-194.
- Graham, K.M. and Ramadhyani, S., 1996, "Experimental and Theoretical Studies of Mist Jet Impingement Cooling," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 118, pp. 343-349.
- Gu, C.B., Su, G.S., Chow, L.C., and Pais, M.R., 1993, "Comparison of Spray and Jet Impingement Cooling," ASME Paper 93-HT-20, ASME, New York.
- Hodgson, J.W. and Sunderland, J.E., 1968, "Heat Transfer from a Spray-Cooled Isothermal Cylinder," *Industrial and Engineering Chemistry - Fundamentals*, Vol. 7, pp. 567-572.
- Hodgson, J.W., Saterbak, R.T., and Sunderland, J.E., 1968, "An Experimental Investigation of Heat Transfer from a Spray Cooled Isothermal Cylinder," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 90, pp. 457-463.
- Jiji, L. M., and Dagan, Z., 1987, "Experimental Investigation of Single Phase Multi-Jet Impingement Cooling of an Array of Microelectronic Heat Sources," *Proceeding of the International Symposium of Cooling Technology for Electronic Equipment*, the Pacific Institute for Thermal Engineering, HI, pp. 265-283.
- Livingood, J.N.B. and Hrycak, P., 1973, "Impingement Heat Transfer from Turbulent Air Jets to Flat Plates--A Literature Survey," *NASA Tech. Note*, NASA TN x-2778.
- Ma, C.F. and Tian, Y.Q., 1990, "Experimental Investigation on Two-Phase Two-Component Jet Impingement Heat Transfer from Simulated Microelectronic Heat Sources," *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 17, pp. 399-408.
- Maddox, D.E. and Bar-Cohen, A., 1994, "Single-Phase Thermo-fluid Design of Submerged-Jet Impingement Cooling for Electronic Components," *ASME Journal of Electronic Packaging*, Vol. 116, pp. 237-340.
- Martin, H., 1977, "Heat and Mass Transfer Between Impinging Gas Jets and Solid Boundaries," *Advances in Heat Transfer*, Vol. 13, pp. 1-60.
- Mednick, R.L. and Colver, C.P., 1969, "Heat Transfer from a Cylinder in an Air-Water Spray Flow Stream," *AICHE Journal*, Vol. 15, pp. 357-362.
- Oliphant, K.O., 1990, "A Comparison of Jet and Spray Impingement Cooling," M.S. Thesis, Brigham Young University, Provo, Utah.
- Pais, M.R., Chow, L.C., and Mahefkey, E.T., 1989, "Surface Roughness and its Effects on the Heat Transfer Mechanism in Spray Cooling," in *Heat Transfer in High Energy/High Heat Flux Applications*, eds. R.J. Goldstein, L.C. Chow, and E.E. Anderson, HTD-Vol. 119, ASME, New York, pp. 51-59.
- Pais, M.R., Chow, L.C., and Mahefkey, E.T., 1992, "Surface Roughness and Its Effects on the Heat Transfer Mechanism in Spray Cooling," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 114, pp. 211-219.
- Pan, Y. and Webb, B.W., 1995, "Heat Transfer Characteristics of Arrays of Free-Surface Liquid Jets," *ASME J. Heat Transfer*, Vol. 117, pp. 878-883.
- Schmbeys, M.S., Pais, M.R., and Chow, L.C., 1992, "Effect of Surface Material Properties and Surface Characteristics in Evaporative Spray Cooling," *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 6, pp. 505-512.
- Siwon, B., 1993, "Experimental Investigations of the Liquid Film by a Gas-Liquid Spray Jet Impinging Onto a Flat Surface," *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 20, pp. 665-674.
- Siwon, B. and Wisniewski, M., 1986, "Heat Transfer by Directing Gas-Liquid Spray Perpendicularly on a Flat Surface," *Heat Transfer - 1986*, ed. C.L. Tien, Hemisphere, Washington, DC, pp. 1237-1242.
- Stevens, J. and Webb, B.W., 1992, "Measurement of the Free Surface Flow Structure Under an Impinging, Free Liquid Jet," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 114, pp. 79-114.
- Webb, B.W., Queiroz, M., Oliphant, K., and Bonin, M., 1992, "Transition to Dry-Wall Heat Transfer in Low Mass Flux Spray Cooling," *Experimental Heat Transfer*, Vol. 5, pp. 33-50.
- Webb, B.W. and Ma, C.F., 1995, "Single-Phase Liquid Jet Impingement," *Advances in Heat Transfer*, Vol. 26, pp. 105-217.
- Yang, J., Chow, L.C., Pais, M.R., and Ito, A., 1992, "Liquid Film Thickness and Topography Determination Using Fresnel Diffraction and Holography," *Experimental Heat Transfer*, Vol. 5, pp. 239-252.
- Yao, S.C., Deb, S., and Hammouda, N., 1989, "Impacting Spray Boiling For Thermal Control of Electronic Systems," *Proceedings of the National Heat Transfer Conference*, HTD-Vol. 111, ASME, New York, pp. 129-134.
- Yao, S.C. and Choi, K.J., 1987, "Heat Transfer Experiments of Monodispersed Vertically Impacting Sprays," *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 13, pp. 639-648.



A NEW NUSSELT NUMBER CORRELATION FOR TURBULENT FORCED CONVECTION IN PIPES EXPOSED TO CONVECTIVE ENVIRONMENTS



Carlos Barroeta, Rafael Reyes, Ulises Lacoa
 Departamento de Termodinámica y Fenómenos de Transferencia
 Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela.

Antonio Campo
 Nuclear Engineering Department
 Idaho State University, Idaho, USA.

SUMMARY

This paper addressed the general analysis of turbulent forced convection in tubes wherein the internal fluid stream exchanges heat with an external fluid. Numerical solutions of the momentum and energy equations were conducted with the finite volume method. Resorting to the concept of a thermal circuit analogy, global Nusselt numbers were adequately correlated in terms of the controlling parameters, namely Reynolds number, Prandtl number and Biot number.

INTRODUCTION

It is widely known that prediction of the thermal characteristics of turbulent flow inside circular tubes is of paramount interest in industrial applications of thermal engineering.

Turbulent heat transfer in the thermal developing region has been predicted primarily for a limiting condition involving isothermal wall tubes. Notter and Sleicher (1972) presented a semi-analytical solution for metallic liquids, air and oils. Chen and Chiou (1981) carried out a numerical simulation for metallic liquids and air. Morales et al. (1988) employed a differential/difference procedure based on the finite-volume method of lines for metallic liquids, air and oils.

The main focus of this investigation is to examine the behavior of turbulent forced convection in the thermal developing region from a different optic. The imposition of an isothermal boundary condition treated in the preceding references has been relaxed in order to cover realistic cases occurring in industry in which the internal flow exchanges heat with an external fluid. Conceptually, this situation gives rise to a generalized convective boundary condition acting at the tube wall in the problem formulation.

According to Kays and Crawford (1980), the velocity profile for in-tube turbulent tube flow tends to be fully developed after an axial distance of 10 to 15 diameters. Regardless of the thermal boundary condition imposed at the tube wall a fully developed temperature profile in a nondimensional sense is usually no more than 40 to 60 diameters. Thereby, the second focus here consists in constructing a suitable correlation equation capable of predicting the global Nusselt number as a function of the Reynolds number, the Prandtl number and the Biot number for a particular case of a thermally developed region. Naturally, the resulting correlation equation must satisfy the two extreme conditions, namely high and low external heat transfer coefficients (high and low Biot numbers).

A literature review has not reflected any evidence of work on the specific topic of global Nusselt numbers for turbulent flows. The only exception is the study of Sparrow and Patankar (1977) which focused on laminar regimes.

The problem description and coordinate system is shown in Figure 1.

DISTRIBUTED ANALYSIS

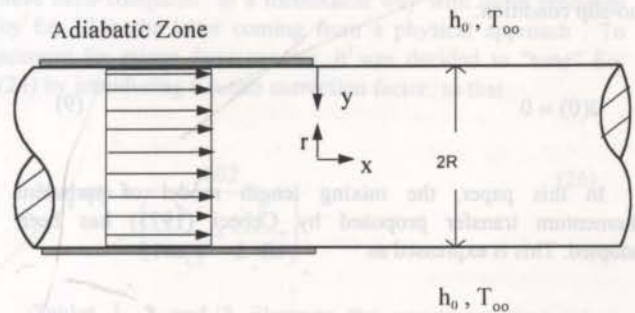


Figure 1. Problem Description and coordinate system

For fully developed turbulent flow in a smooth circular tube, the energy equation becomes

$$\bar{u} \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r(\alpha + \epsilon_H) \frac{\partial T}{\partial r} \right] \tag{1}$$

where the influence of axial conduction and viscous dissipation are regarded as negligible. This equation is restricted to axisymmetric thermal conditions and constant fluid properties.

Under the assumption of external convective boundary condition and uniform fluid temperature at the entrance of the exchange region T_c , the boundary conditions are given by

$$T(0, r) = T_c \tag{2}$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(x, 0) = 0 \tag{3}$$

$$-k_i \frac{\partial T}{\partial r}(x, R) = h_0(T - T_\infty) \tag{4}$$

The turbulent velocity profile appearing in Eq. (1) may be obtained by integrating the appropriate equation for conservation of momentum. That is

$$\tau = -\mu \frac{d\bar{u}}{dy} + \rho u'v' \quad (5)$$

where

$$u'v' = -\varepsilon_M \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (6)$$

Next, adopting the customary dimensionless variables

$$u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau}; \quad y^+ = \frac{y \cdot u_\tau}{\nu}; \quad R^+ = \frac{R u_\tau}{\nu} \quad (7)$$

Eq. (5) can be written as follows

$$(1 + \varepsilon_M / \nu) \frac{d\bar{u}}{dy} = 1 - \frac{y^+}{R^+} \quad (8)$$

This equation may be numerically integrated satisfying the no-slip condition:

$$\bar{u}(0) = 0 \quad (9)$$

In this paper, the mixing length model of turbulent momentum transfer proposed by Cebeci (1973) has been adopted. This is expressed as

$$\varepsilon_M / \nu = l^{*2} \left| \frac{du^+}{dy^+} \right| \quad (10)$$

where

$$l^* = R^+ [0.14 - 0.08(r/R)^2 - 0.006(r/R)^4] \times [1 - \exp(-y^+ / 26)] \quad (11)$$

In light of the foregoing, the energy equation may be reformulated in terms of the following set of dimensionless variables and parameters

$$z = \frac{x}{D}; \quad \eta = \frac{r}{R}; \quad \theta = \frac{T - T_\infty}{T_e - T_\infty} \quad (12)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha}; \quad Re = \frac{\bar{u}_m D}{\nu}; \quad Bi = \frac{h_0 \cdot R}{k_i} \quad (13)$$

in addition to those already defined in Eq (7). Thus, the resulting equation becomes

$$Re \frac{u^+}{u_m^+} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{4}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\eta \left(\frac{1}{Pr} + \frac{\varepsilon_H / \nu}{Pr_t} \right) \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right] \quad (14)$$

which is subject to

$$\theta(0, \eta) = 1 \quad (15)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(z, 0) = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(z, 1) = -Bi\theta \quad (17)$$

The turbulent Prandtl number, Pr_t , is given by (Dwyer and Tu, 1962) as

$$\frac{1}{Pr_t} = 1 - \frac{1.82}{Pr(\varepsilon_M / \nu)^{1.4}} \quad (18)$$

where

$$(\varepsilon_M / \nu) = 4 + 0.002897 Re^{0.919} \quad (19)$$

The dimensionless bulk temperature is calculated by

$$\theta_b(z) = \frac{\int_0^1 \bar{u} \theta \eta d\eta}{\int_0^1 \bar{u} \eta d\eta} \quad (20)$$

and the local, global Nusselt number is given by

$$Nu_g(z) = \frac{UD}{k_i} = \frac{-2 \frac{\partial \theta}{\partial \eta}(z, 1)}{\theta_b(z)} \quad (21)$$

where U is the global heat transfer coefficient.

NUMERICAL PROCEDURE

Computation of the turbulent velocity profile is rather straightforward and it may be readily accomplished utilizing a fourth-order Runge-Kutta algorithm. Accordingly, the computed velocity is introduced in Eq. (14) in order to determine the temperature distribution in the tube.

The control volume approach (Patankar, 1980) was used to discretize the energy equation where the implicit scheme has been adopted to handle the convective term. The system of algebraic equations resulting from the discretization scheme was solved by the Thomas algorithm. To warrant enhanced accuracy, 2000 grid points were deployed in the radial direction.

Once the temperature distribution is obtained, Eq. (20) can be integrated numerically.

LUMPED ANALYSIS

a) Low Biot Number

From the theory of heat conduction (Arpaci, 1966) it is widely known that the transient temperature distribution inside a solid cylinder collapses into the mean temperature distribution

$$\theta_m = \exp(-2 \text{Bi} \cdot \text{Fo}) \quad (22)$$

whenever $\text{Bi} < 0.1$. This situation corresponds to a limiting case of negligible conductive resistance. Knowing that the turbulent velocity profile resembles a "plug flow", the physical analogy between transient conduction and steady, turbulent forced convection can be adopted here. This implies that $\bar{u}_m \bar{t} = x$. Solving for \bar{t} and introducing the ratio in Eq. (22) leads to the bulk temperature distribution

$$\theta_b = \exp(-4\text{Bi} \cdot z / \text{RePr}) \quad (23)$$

which of course is valid for $\text{Bi} < 0$ exclusively. The outcome of this lumped equation compares satisfactorily with the numerical bulk temperature produced by the computer code for any combination of Re and Pr .

b) Relationship between Nusselt numbers

The concept of the global heat transfer coefficient, U , enables us to write the Harmonic mean for the global Nusselt number, as follows

$$\frac{1}{\text{Nu}_g} = \frac{1}{\text{Nu}_{i,T}} + \frac{1}{2 \cdot \text{Bi}} \quad (24)$$

Here, $\text{Nu}_{i,T} = h_i D / k$ denotes the internal Nusselt number for an isothermal tube. It is worth mentioning that Eq. (24) is associated with the resistance in series depicted in Fig. 2.

It is interesting to verify that Eq. (24) satisfies the two limiting cases, for a low Biot number case ($\text{Bi} \rightarrow 0$), the global Nusselt number becomes proportional to the Biot number, while in the isothermal walled case, ($\text{Bi} \rightarrow \infty$), Nu_g and $\text{Nu}_{i,T}$ are identical.

c) Any Biot numbers

By virtue of Eq. (24), the generalization of the expression for the mean bulk temperature distribution, Eq. (23), leads to

$$\theta_b = \exp\left(-2 \frac{\text{Nu}_g \cdot x}{\text{RePrR}}\right) \quad (25)$$

Derivation of this equation is omitted for brevity, but the interested reader may consult reference (Campo and Lacoa, 1995).

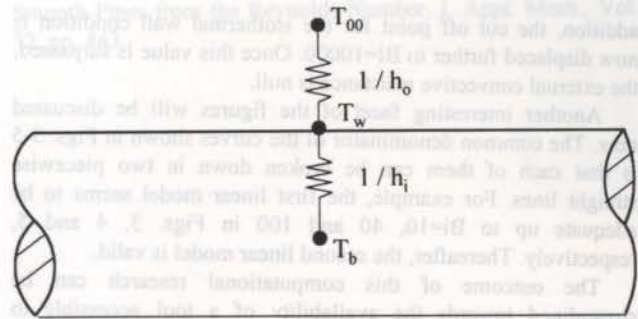


Figure 2. Analog electrical circuit.

DISCUSSION OF RESULTS

Owing to space limitations it is impossible to present in this section all possible combinations of the controlling parameters Re , Pr and Bi . Hence, pre-selected values of these parameters are chosen as follows: a fixed, intermediate $\text{Re}=10^5$, three Pr ranging from 0.007 (metallic liquid), 0.7 (air) and 7 (water) whereas Bi , $0 < \text{Bi} \leq 300$.

The numerically-determined global Nusselt numbers, Nu_g , have been compared in a methodical way with those produced by Eq. (24), the latter coming from a physical approach. To account for minor discrepancies, it was decided to "tune" Eq. (24) by introducing a subtle correction factor, so that

$$\text{Nu}_{g,app} = \frac{1.02}{\left(\frac{1}{\text{Nu}_{i,T}} + \frac{1}{2 \cdot \text{Bi}}\right)} \quad (26)$$

Tables 1, 2 and 3 illustrate the one-to-one comparison between the global Nusselt numbers, Nu_g (num) and Nu_g (app), obtained by the two different routes. An overall inspection of the tables reveals that the agreement is adequate. In Table 1 the maximum error for $\text{Pr}=0.007$ stays within a 2.99%. The error tends to increase with Pr , for instance in Table 2 for $\text{Pr}=0.7$ the maximum error does not exceed 4.36% and in Table 3 for $\text{Pr}=7$ the maximum error reaches 10.92%. Parallel to this, Figs. 3, 4 and 5 displaying the variation of Nu_g with Bi for each of Pr numbers are the companion figures to Tables 1, 2 and 3.

It can be observed in Fig. 3 that the Nu_g deviation for $\text{Pr}=0.007$ between both methods is imperceptible. Both Nu_g increase rapidly for small Bi and the curves stabilize around $\text{Bi}=100$. This behavior indicates that the external convective resistance has vanished completely at this particular Bi . Therefore, $\text{Bi}=100$ turns out to be a safe borderline for the establishment of a criterion for the isothermal wall condition. The good quality of both sets of results exhibited in Fig. 3 persists in Fig. 4. However, Nu_g raises with a mild slope resulting in a shift of the borderline for the isothermal wall to a higher Bi , $\text{Bi}=1000$. This shift can be interpreted in terms of a prevalent external convective resistance whose presence is felt up to $\text{Bi}=1000$. Contrary to the reasonable behavior exhibited in Figs. 3 and 4, the results produced by the correlation equation deteriorate slightly for $\text{Bi} > 100$. In this sub-region, both Nu_g grow slowly and Nu_g (app) underpredicts Nu_g (num) consistently. In

addition, the cut off point for the isothermal wall condition is now displaced further to $Bi=10000$. Once this value is surpassed, the external convective resistance is null.

Another interesting facet of the figures will be discussed now. The common denominator of the curves shown in Figs. 3-5 is that each of them can be broken down in two piecewise straight lines. For example, the first linear model seems to be adequate up to $Bi=10, 40$ and 100 in Figs. 3, 4 and 5, respectively. Thereafter, the second linear model is valid.

The outcome of this computational research can be streamlined towards the availability of a tool accessible to thermal design engineers. In this regard, it is widely known that the specialized literature contains well-tested correlation equations for the turbulent Nusselt number congruous to an isothermal wall condition, $Nu_{i,T}$. These $Nu_{i,T}$ equations together with the Bi number are the necessary ingredients in Eq. (25):

a) For air and oils ($Pr \geq 0.7$), Gnielinski (1976) correlation equation

$$Nu_{i,T} = \frac{(f/2)(Re-1000)Pr}{1+12.7\sqrt{f/2}(Pr^{2/3}-1)} \quad (27)$$

where the friction factor due to Techo et al. (1965) is taken from

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 1.737 \ln \left(\frac{Re}{1.964 \ln Re - 3.822} \right) \quad (28)$$

$10^4 < Re < 10^7$

b) For liquid metals ($Pr < 0.1$), Notter-Sleicher (1972) correlation equation

$$Nu_{i,T} = 4.8 + 0.016 Re^{0.85} Pr^{0.93} \quad (29)$$

$10^4 < Re < 10^6, \quad 0.004 < Pr < 0.1$

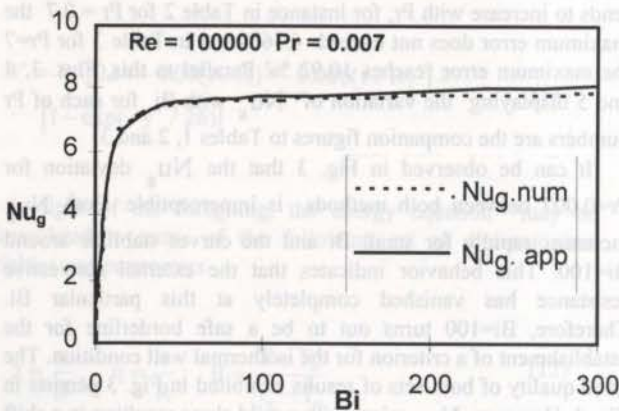


Figure 3. Asymptotic global Nusselt number vs. Biot number. $Re=100000, Pr=0.007$

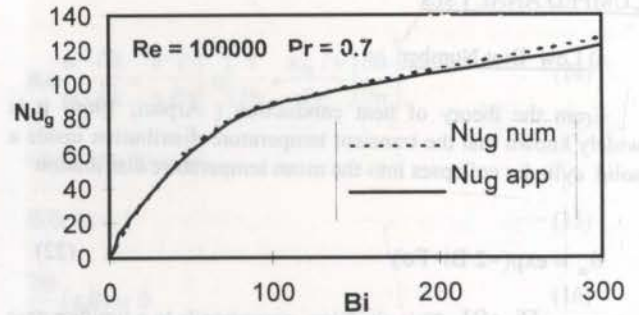


Figure 4. Asymptotic global Nusselt number vs. Biot number. $Re=100000, Pr=0.7$

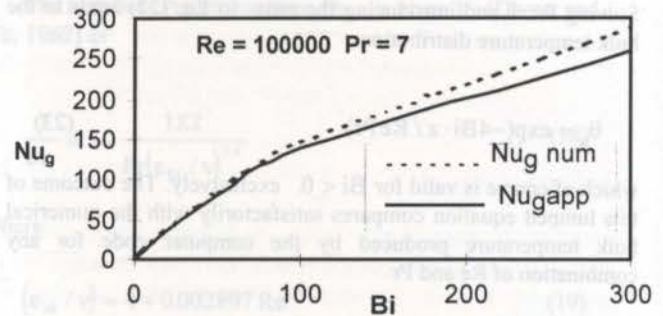


Figure 5. Asymptotic global Nusselt number vs. Biot number. $Re=100000, Pr=7$

Table 1 - Asymptotic global Nusselt number for different Biot numbers. Prandtl number fixed at $Pr=0.007$ and $Re=100000$

Bi	$Nu_g(\text{num})$	$Nu_g(\text{app})$	Error(%)
0.01	0,02	0,02	0,00
0.1	0,20	0,20	0,00
0.5	0,91	0,91	0,00
1	1,66	1,63	-1,81
10	6,03	5,85	-2,99
25	7,14	7,07	-0,98
50	7,59	7,60	0,13
300	7,99	8,10	1,38

Table 2 - Asymptotic global Nusselt number for different Biot numbers. Prandtl number fixed at $Pr=0.7$ and $Re=100000$

Bi	$Nu_g(\text{num})$	$Nu_g(\text{app})$	Error(%)
0,01	0,02	0,02	0,00
0,1	0,20	0,20	0,00
0,5	0,99	1,01	2,02
1	1,98	2,01	1,52
10	17,82	18,00	1,01
50	62,14	61,18	-1,55
100	89,37	87,39	-2,22
300	127,90	122,32	-4,36

Table 3 - Asymptotic global Nusselt number for different Biot numbers. Prandtl number fixed at Pr=7 and Re=100000.

Bi	Nu _g (num)	Nu _g (app)	Error(%)
0,01	0,02	0,02	0
0,1	0,20	0,20	0
0,5	1,00	1,02	2,00
1	1,99	2,03	2,01
10	19,30	19,51	1,09
50	84,83	82,99	-2,17
100	146,82	139,90	-4,71
300	289,33	257,73	-10,92

CONCLUDING REMARKS

A numerical study involving turbulent flow in a pipe exposed to an external convective boundary condition having fully developed velocity has been conducted. The asymptotic global Nusselt number obtained numerically was correlated in terms of Biot number. It was verified that Biot > 1000 corresponds to the limit case of isothermal wall, while Bi < 0.1 corresponds to the limit case of negligible internal resistance. Finally, an excellent correlation was found using the equivalent thermal circuit technique, given by Eq. (25). For moderate Biot number 0.1 < Bi < 100, the error was lower than 5%.

REFERENCES

Arpaci, V. S., 1966, "Conduction Heat Transfer", Addison-Wesley, Reading, Ma.

Campo, A., and Lacoa, U., 1995, "Teaching Technique for Internal Forced Convection Flows Through Tubes Cooled Heated by External Natural Convection. I Horizontal Orientation " Comp. Appl. Engng. Education. Vol. 2, pp. 225-234.

Cebeci, T., 1973, "A Model for Eddy Conductivity and Turbulent Prandtl Number". J. of Heat Transfer, Vol. 95, pp. 227-236.

Chen, C. J., and Chiou, J. S., 1981, "Laminar and Turbulent Heat Transfer in the Pipe Entrance Region for Liquids Metals", Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 24, pp. 1179-1189.

Dwyer, O. E., and Tu, P. S., 1962, "Unilateral Heat Transfer to Liquid Metals flowing in annuli", Nucle. Sci. Engng, Vol. 15, pp. 58.

Gnielinski, V. , 1976, "New Equations for heat and Mass Transfer in Turbulent pipe and Channel Flow" . Int. Chem. Eng., Vol. 16, pp. 359-368.

Kays, W. M., and Crawford, M. E., 1980, "Convective Heat and Mass Transfer", Mcgraw-Hill, New York.

Morales, J. C., Campo, A., and Lacoa, U., 1988," Calculation of Turbulent Forced Convection in the Thermal Entry Region of Pipes by the Method of Lines and Control Volumes" Physico-Chemical Hydrodynamics, Vol. 10, pp. 65-76.

Notter, R. H., and Sleicher, C. T., 1972, "A Solution of the Turbulent Graetz Problem III. Fully Developed and Entry Region Heat Transfer Rates" Chem. Engng. Sci., Vol. 27, 2073-2093.

Patankar, S. V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere, Washington, D. C.

Sparrow, E. M., and Patankar, S. V., 1977, "Relationship among boundary conditions and Nusselt Numbers for Thermally Developed Tube Flows", J. Heat Transfer, Vol. 99, pp. 483-485.

Techo, R. , Tickner, R. R., and James, R., E., 1965, "An accurate Equation for the computation of the friction factor for

Smooth Pipes from the Reynolds-Number, J. Appl. Mech., Vol. 32, pp. 443.

INTERCAMBIO TÉRMICO EN FLUIDO LÁMINAR ENTRE PLACAS
 RIBOLLO, Francisco ALBA JUEZ,
 RA, Ramon FIDALGO
 Universidad Nacional de San Juan
 CAMPO
 Idaho State University

RESUMEN
 En este trabajo se presenta una investigación numérica para determinar la influencia de la inclusión de un intercambio térmico entre dos placas y un fluido que circula entre ellas. Se ha trabajado con un número de Biot variable, algunas geometrías geométricas y distancias del problema resolviéndose la ecuación de energía en un dominio 2D. Como se han establecido criterios de comparación

geométricas, dinámicas y térmicas y se lleva a cabo por medio de la aplicación de métodos numéricos.

FORMULACION DEL PROBLEMA

GEOMETRÍA. El dominio y estudio consiste en un canal formado por placas sólidas que representan las placas donde se encuentran los componentes electrónicos tal como se representa en la figura 1. Se toma L la longitud del canal. H la separación entre placas, α y β las posiciones relativas del deflector, θ la altura del mismo, ϕ es el ángulo de inclinación respecto del eje x.

En general se considerará un plano de simetría para $y = H/2$, siendo esta una hipótesis aceptable (Sánchez, 1991) que permite reducir el volumen de cálculo. Las proporciones geométricas y la posición del deflector se mantendrán constantes para las distintas simulaciones variándose el ángulo del deflector. Estas proporciones son:

$$\frac{L}{H} = 10 \quad \frac{\alpha}{H} = 5 \quad \frac{\beta}{H} = 0.5$$

$$\frac{h}{H} = 0.25 \quad \theta = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$$

MODELO MATEMÁTICO. En este trabajo se resuelve el problema en forma adimensional, por lo tanto se utilizan un conjunto de variables adimensionales a saber:

$$r = \frac{x}{L} \quad r = \frac{y}{H} \quad r = \frac{z}{L} \quad r = \frac{z}{H}$$

$$r = \frac{x}{L} \quad r = \frac{y}{H} \quad r = \frac{z}{L}$$

$$r = \frac{x}{L} \quad r = \frac{y}{H}$$

donde
 T_0 = temperatura media a la entrada
 T_1 = temperatura media a la salida



INCREMENTO LOCALIZADO DEL INTERCAMBIO TÉRMICO EN FLUJO LAMINAR ENTRE PLACAS

Manuel SÁNCHEZ, Daniel REBOLLO, Francisco ALBA JUEZ,
Carlos GUEVARA, Ramon FIDALGO
Instituto de Mecánica Aplicada. Universidad Nacional de San Juan
Antonio CAMPO
College of Engineering. Idaho State University



RESUMEN

En este trabajo se presenta una investigación realizada para determinar la influencia de la inclusión de deflectores en el intercambio térmico entre dos placas y un fluido que circula entre ellas. Se ha trabajado con métodos numéricos, variándose algunos parámetros geométricos y dinámicos del problema evaluándose la influencia de los mismos en el intercambio térmico, para lo cual se han establecido criterios de comparación.

INTRODUCCIÓN

La electrónica y sus aplicaciones en el control de procesos, comunicaciones, computación, etc. ha registrado en las últimas décadas un avance sin precedentes. Un aspecto negativo de los componentes electrónicos es que desarrollan calor, el cual atenta contra el correcto funcionamiento de los mismos.

La tendencia a una gran compacidad en los equipos electrónicos a los efectos de ahorrar espacio, causa dificultades a la hora de evacuar el calor generado. A los efectos de lograr un alto grado de compacidad, se han dispuesto los componentes electrónicos en plaquetas que se disponen "apiladas" en sentido vertical u horizontal e interconectadas a través de una plaqueta madre. Esta disposición forma canales por los que pasa el aire que circula por medio de convección natural o forzada evacuando el calor generado por los componentes.

La escasa distancia entre placas provoca flujos laminares en los cuales el intercambio de calor es pobre. Como consecuencia de esto se deben usar potentes ventiladores que traen aparejada la producción de ruidos y aun así no terminan de solucionar el problema de la remoción de calor de algunos componentes críticos, haciendo peligrar su integridad y correcto funcionamiento.

Como característica distintiva se reconoce además la generación localizada de calor. Es decir, el calor no es generado en forma uniforme en toda la extensión de la placa, sino en los lugares en donde se encuentran los componentes electrónicos. Cabe citar aquí, que cada uno de ellos posee distinta capacidad como generador de calor, por lo que el sistema de evacuación del calor óptimo debiera generar zonas de intercambio intensificado a los efectos de provocar una remoción a medida del calor producido por cada componente.

Como es sabido, el calor cedido por convección a partir de una superficie sólida, guarda una relación directa con el valor de la componente de la velocidad del fluido normal a dicha superficie en las cercanías de la misma. Dicha componente se puede incrementar con la inclusión de deflectores en las inmediaciones de las fuentes de calor localizadas a los efectos antes mencionados.

El efecto local que producen estos deflectores varía en función de la forma, ángulos, tamaño, posición relativa respecto de la fuente de calor, velocidad del fluido, etc.

El objetivo fundamental de este trabajo es la investigación de los fenómenos físicos de flujo laminar de fluidos y transmisión de calor convectivo en un canal con fuentes localizadas de calor en sus paredes, y la intensificación del flujo de calor en esas fuentes, por medio de deflectores convenientemente ubicados. La investigación comprende contemplar variadas condiciones

geométricas, dinámicas y térmicas y se lleva a cabo por medio de la aplicación de métodos numéricos.

FORMULACION DEL PROBLEMA

GEOMETRÍA. El dominio a estudiar consiste en un canal limitado por placas sólidas que representan las plaquetas donde se encuentran los componentes electrónicos tal como se representan en la figura 1. Siendo L la longitud del canal, H la separación entre placas, Δx y Δy las posiciones relativas del deflector, h la altura del mismo y α el ángulo de inclinación respecto del eje x .

En general se considerará un plano de simetría para $y = H/2$, siendo esta una hipótesis aceptable (Sanchez, 1991) que permite reducir el volumen de cálculo. Las proporciones geométricas y la ubicación del deflector se mantendrán constantes para las distintas simulaciones variándose el ángulo del deflector. Estas proporciones son

$$\frac{L}{H} = 10 \quad \frac{\Delta x}{H} = 5 \quad \frac{\Delta y}{H} = 0.5$$

$$\frac{h}{H} = 0.25 \quad \alpha = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$$

MODELO MATEMÁTICO. Es conveniente aquí trabajar en forma adimensional, por lo tanto se definirá un conjunto de variables adimensionales a saber:

$$L^* = \frac{L}{H} \quad x^* = \frac{x}{H} \quad y^* = \frac{y}{H} \quad h^* = \frac{h}{H}$$

$$u^* = \frac{u}{V_\infty} \quad v^* = \frac{v}{V_\infty} \quad p^* = \frac{p}{\rho V_\infty^2}$$

$$T^* = \frac{T}{T_\infty} \quad t^* = \frac{t V_\infty}{H}$$

donde

V_∞ = velocidad media a la entrada

T_∞ = temperatura media a la entrada

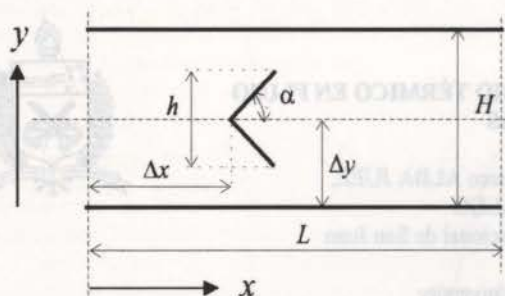


Figura 1 - Representación gráfica de la geometría estudiada

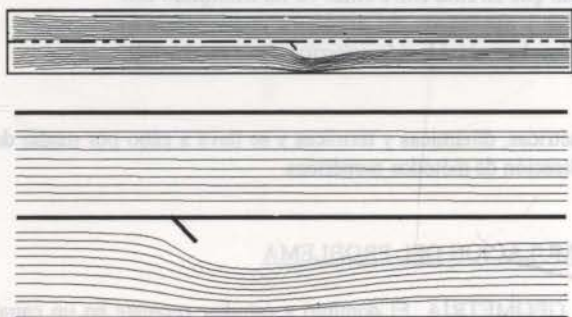


Figura 2 - Líneas de corriente para un canal con y sin deflector. Canal completo (arriba) y detalle (abajo)

Las ecuaciones que gobiernan este fenómeno en forma adimensional con las variables antes definidas a las que de aquí en adelante se les suprimirá el asterisco son la ecuación de la continuidad

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

las ecuaciones del momento

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

y la ecuación de la energía

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{2}{RePr} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$$

donde el número de Reynolds y Prandtl están definidos como

$$Re = \frac{V_{\infty} 2H}{\delta} \quad Pr = \frac{c_p \mu}{\lambda}$$

siendo

- u = componente de velocidad en la dirección x
- v = componente de velocidad en la dirección y
- p = presión
- t = tiempo

- T = temperatura
- δ = viscosidad dinámica del fluido
- c_p = calor específico a presión constante del fluido
- μ = viscosidad cinemática del fluido
- λ = conductividad térmica del fluido

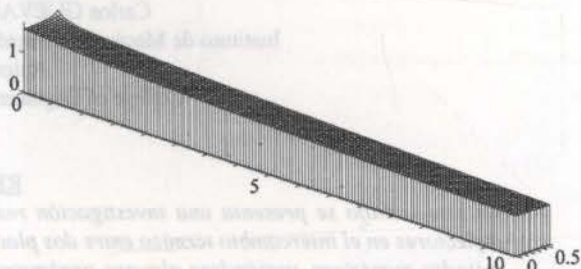


Figura 3a - Campo de presiones sin deflector y $Re = 800$

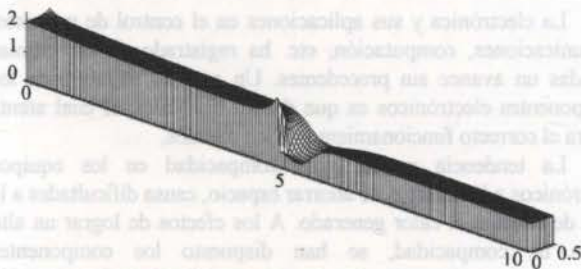


Figura 3b - Campo de presiones con deflector con $\alpha = 45^\circ$ y $Re = 800$

CONDICIONES DE BORDE. Las condiciones de borde a la entrada son

$$u = 1 \quad v = 0 \quad T = 1$$

a la salida

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

en la pared sólida

$$u = 0 \quad v = 0 \quad T = 2$$

en el plano de simetría

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad v = 0$$

y en el deflector

$$u = 0 \quad v = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0$$

siendo

n = dirección normal al deflector

MÉTODO DE SOLUCIÓN. Para resolver este problema se ha usado un modelo de volúmenes finitos en coordenadas cartesianas (Patankar, 1980) recurriéndose a una técnica de interpolación para representar las condiciones de borde en el deflector y las placas (Sanchez, 1991).

Se ha usado un modelo no estacionario en el que la solución final se obtiene con un avance explícito en el tiempo (Sanchez, 1991). El esquema de discretización utiliza la técnica de "flux blending" en donde se han mezclado un esquema "upwind" y un esquema central por partes iguales (Hirt et al., 1975).

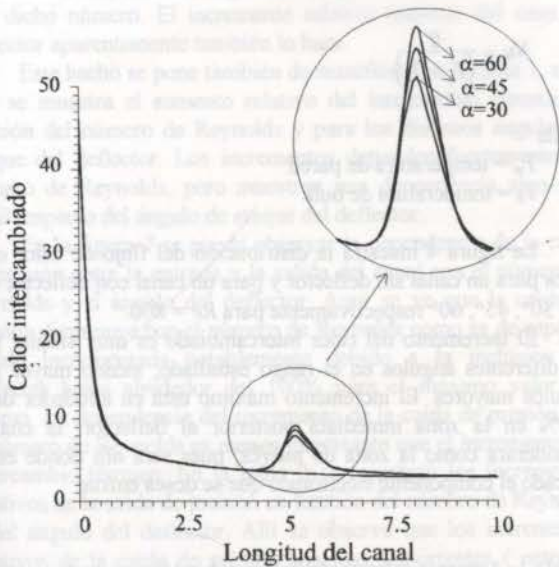


Figura 4 - Distribución del flujo de calor en la placa para un canal con y sin deflector para $Re = 800$

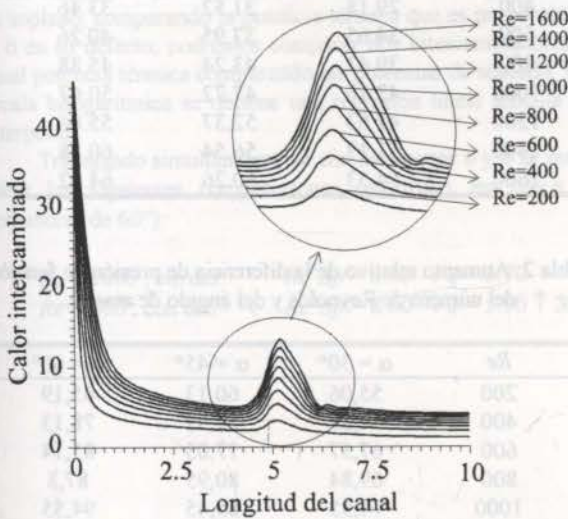


Figura 5 - Distribución del flujo de calor en la placa para un canal con deflectores con $\alpha = 45$

La solución de la ecuación de Poisson de la presión se realizó con un método iterativo con sobrerelajación.

El dominio descrito se discretizó con 24 celdas en y y entre 142 y 418 celdas en x dependiendo este número del ángulo α del

deflector. El programa de simulación se ejecuto en un computador IBM RS/6000 utilizando entre 20 min. y 2.30 hs de CPU.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La presentación de los resultados se separa en los correspondientes al campo de velocidades, presiones y temperaturas.

CONCLUSIONES

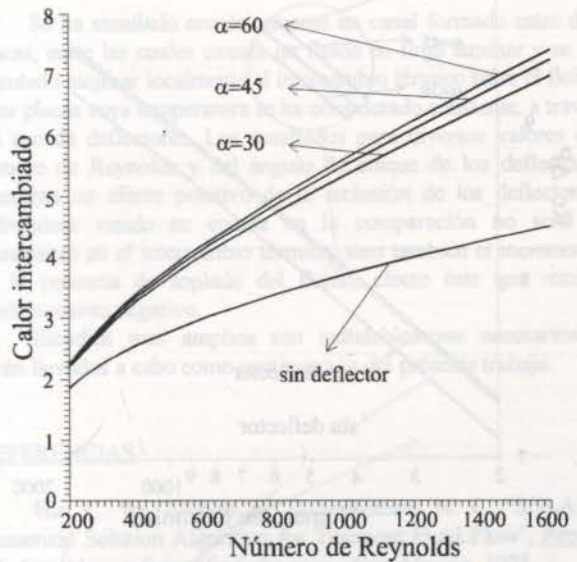


Figura 6 - Valor medio de q integrado en la zona de interés

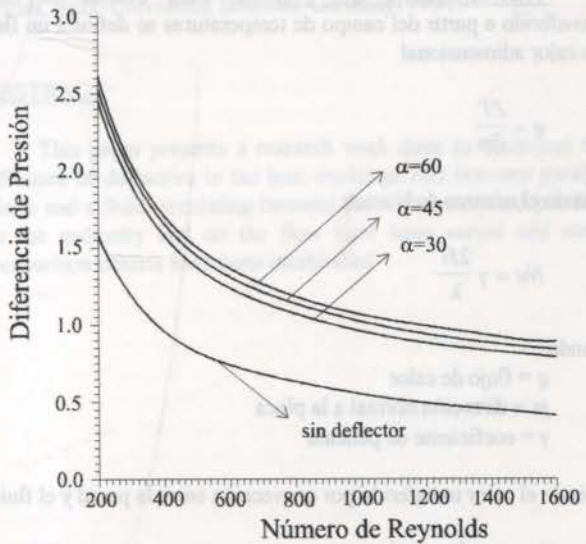


Figura 7 - Caída de presión entre la entrada y la salida del canal

CAMPO DE VELOCIDADES. En la figura 2 se puede observar una comparación entre las líneas de corriente para un caso con $Re = 800$ y $\alpha = 45^\circ$ con y sin deflector. El deflector desvía las partículas en dirección de la pared, incrementando la velocidad normal a la misma.

CAMPO DE PRESIONES. En la figura 3 se comparan los campos de presión para un caso con $Re = 800$, sin deflector y con deflector con $\alpha = 45^\circ$. La caída de presión sin deflector es aproximadamente 0.63 para todo el canal, bajando desde 1.63 a la entrada hasta 1 a la salida. En el caso con deflector el descenso de la presión es mas pronunciado, siendo éste causado fundamentalmente por la presencia del deflector. Aquí la presión cae desde 2.14 a la entrada hasta 1 a la salida.

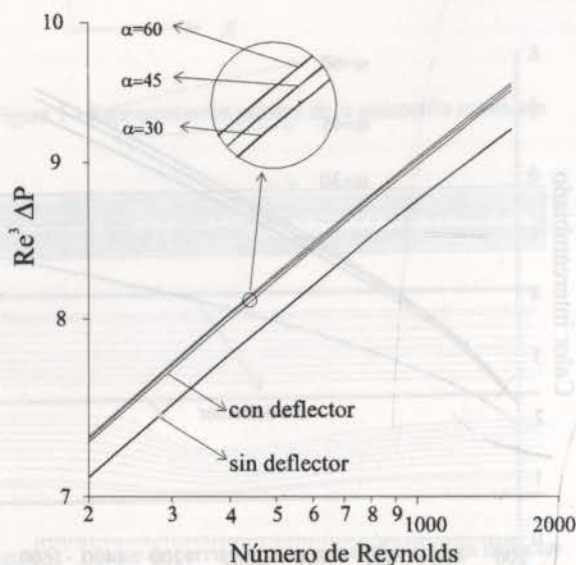


Figura 8 - Representación bilogarítmica de $Re^3 \Delta p$ en función del Re

TRANSMISIÓN DE CALOR. Para evaluar el calor transferido a partir del campo de temperaturas se definirá un flujo de calor adimensional

$$q = \frac{\partial T}{\partial m}$$

siendo el número de Nusselt

$$Nu = \gamma \frac{2H}{\lambda}$$

donde

- q = flujo de calor
- m = dirección normal a la placa
- γ = coeficiente de película

siendo el calor transferido por convección entre la pared y el fluido

$$q_{conv} = \gamma(T_w - T_f)$$

y el calor transferido por conducción en la interface entre la pared y el fluido

$$q_{cond} = \lambda \frac{\partial T}{\partial m}$$

igualando ambos flujos de calor

$$\gamma(T_w - T_b) = \lambda \frac{\partial T}{\partial m}$$

adimensionalizando esta ultima ecuación

$$\frac{\gamma H}{\lambda} = \frac{\partial T}{(T_w - T_b)}$$

se obtiene finalmente el numero de Nusselt en función del flujo de calor

$$Nu = \frac{q}{(T_w - T_b)}$$

donde

- T_w = temperatura de pared
- T_b = temperatura de bulk

La figura 4 muestra la distribución del flujo de calor en la placa para un canal sin deflector y para un canal con deflector con $\alpha = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ respectivamente para $Re = 800$.

El incremento del calor intercambiado es muy similar para los diferentes ángulos en el rango estudiado, siendo mayor para ángulos mayores. El incremento máximo está en alrededor de un 300% en la zona inmediata posterior al deflector, la cual se considerará como la zona de interés, pues será allí donde estará ubicado el componente electrónico que se desea enfriar.

Tabla 1: Aumento relativo del intercambio térmico en función del número de Reynolds y del ángulo de ataque α .

Re	$\alpha = 30^\circ$	$\alpha = 45^\circ$	$\alpha = 60^\circ$
200	20.0	21.08	21.62
400	29.18	31.52	33.46
600	34.65	37.95	40.26
800	39.41	43.24	45.88
1000	43.16	47.72	50.67
1200	47.63	52.37	55.86
1400	51.17	56.54	60.28
1600	54.53	60.26	64.02

Tabla 2: Aumento relativo de la diferencia de presión en función del número de Reynolds y del ángulo de ataque.

Re	$\alpha = 30^\circ$	$\alpha = 45^\circ$	$\alpha = 60^\circ$
200	55,06	60,13	65,19
400	64,58	72,92	78,13
600	67,57	77,03	85,14
800	69,84	80,95	87,3
1000	74,55	85,45	94,55
1200	79,59	91,84	102,04
1400	84,44	95,56	106,67
1600	92,68	104,88	117,07

La figura 5 muestra la distribución del flujo de calor en la placa para un canal con deflectores con $\alpha = 45^\circ$ y distintos números de Reynolds. El calor intercambiado depende mas fuertemente del numero de Reynolds que del ángulo del deflector. Se observa que el valor máximo para $Re = 400$ con deflector

alcanza el valor del canal *sin deflector* para $Re = 1600$. El incremento relativo en la zona de los máximos crece en forma muy evidente con el número de Reynolds.

Para determinar el incremento en el intercambio térmico en el componente electrónico se ha definido una zona de interés donde se supone estará ubicado el mismo. Esta *zona de interés* se define entre la coordenada $x = 3.5$ y la coordenada $x = 7.0$ en dirección longitudinal del canal.

En la figura 6 se muestra el valor medio del calor integrado en la zona de interés en función de Re y α . Allí se ve que el calor aumenta con el número de Reynolds observándose además que la sensibilidad respecto del ángulo de ataque se incrementa también con dicho número. El incremento relativo respecto del caso sin deflector aparentemente también lo hace.

Este hecho se pone también de manifiesto en la tabla 1, en la que se muestra el aumento relativo del intercambio térmico en función del número de Reynolds y para los distintos ángulos de ataque del deflector. Los incrementos dependen fuertemente del número de Reynolds, pero muestran una dependencia algo más débil respecto del ángulo de ataque del deflector.

En la figura 7 se puede observar la dependencia de la caída de presión entre la entrada y la salida del canal con el número de Reynolds y el ángulo del deflector. Aquí se ve que la caída de presión disminuye con el número de Reynolds como es de esperar, siendo incrementada notablemente debido a la inclusión del deflector hasta alrededor del 100% para el máximo valor del mismo. La dependencia del incremento de la caída de presión con el número de Reynolds es menos importante que el incremento del intercambio térmico. En la tabla 2 se muestran los incrementos relativos de la caída de presión en función del número de Reynolds y del ángulo del deflector. Allí se observa que los incrementos relativos de la caída de presión son más importantes (entre un 50% y un 100%) que los incrementos en el calor intercambiado (entre un 20% y un 60%)

En la figura 8 se muestra el producto $Re^3 \Delta p$, el cual es proporcional a la potencia de soplado del aire, a los efectos de poder comparar dos intercambiadores de calor con igual potencia de soplado, comparando la potencia térmica que es proporcional a q , o en su defecto, podremos comparar dos intercambiadores con igual potencia térmica comparando las potencias de soplado. En la escala bilogarítmica se obtiene una regresión lineal sencilla para interpolar.

Trabajando simultáneamente con las figuras 6 y 8 se pueden hacer las siguientes comparaciones (en todos los casos con deflectores de 60°):

$$\begin{aligned} Re = 1000, \text{ sin def.} & \quad Re^3 \Delta p = 8.60 \rightarrow q = 3.70 \\ Re = 800, \text{ con def.} & \quad Re^3 \Delta p = 8.60 \rightarrow q = 5.00 \uparrow 35\% \end{aligned}$$

Aquí se obtiene un incremento del 35% en la potencia térmica a igualdad de potencia de soplado.

$$\begin{aligned} Re = 1600, \text{ sin def.} & \quad Re^3 \Delta p = 9.20 \rightarrow q = 4.50 \\ Re = 650, \text{ con def.} & \quad Re^3 \Delta p = 8.50 \downarrow 8\% \rightarrow q = 4.50 \end{aligned}$$

Aquí se obtiene una reducción de la potencia de soplado del 8% a igualdad de potencia térmica.

CONCLUSIONES

Se ha simulado numéricamente un canal formado entre dos placas, entre las cuales circula un fluido en flujo laminar y se ha intentado mejorar localmente el intercambio térmico entre el fluido y las placas cuya temperatura se ha considerado constante, a través del uso de deflectores. Los resultados para diversos valores del número de Reynolds y del ángulo de ataque de los deflectores muestran un efecto positivo de la inclusión de los deflectores, habiéndose tenido en cuenta en la comparación no solo el incremento en el intercambio térmico, sino también el incremento en la potencia de soplado del fluido, efecto éste que resulta evidentemente negativo.

Estudios más amplios son indudablemente necesarios y serán llevados a cabo como continuación del presente trabajo.

REFERENCIAS

Hirt C. W., Nichols B. D. y Romero N. C. "SOLA, a Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flow", Report LA, Los Alamos Scientific Laboratory, New Mexico, 1975
 Patankar S. V. "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow" Mc Graw - Hill, New York, 1980.
 Sanchez M. A, Numerische Simulation von einreihigen Lamellen-Rohr-Wärmetauscher mit Längswirbelerzeuger, Ph.D. Thesis, Ruhr-Universität Bochum, Germany, 1991.

ABSTRACT

This paper presents a research work done to determine the influence of deflectors in the heat exchange rate between parallel plates and a fluid circulating between them. Parameters, depending on the geometry and on the flow have been varied and some comparison criteria have been established.

MÉTODOS EXPERIMENTALES

El aparato experimental utilizado, que es esquematizado en la figura 7, era un canal constituido por dos superficies paralelas. Una de las superficies era de vidrio y la otra de nailon. O se era forzada a través del canal, o que pervenía a la formación del perfilado de las placas, dependiendo de la inclinación o desajuste local de nailon. Se obtienen así los coeficientes locales de transferencia de masa (número de Sherwood) y por analogía los coeficientes de transferencia de calor a través de placas con los correspondientes coeficientes de transferencia de masa (número de Nusselt).

Como en superficie de vidrio sólo había desajuste, sólo el flujo de masa, era afectado una parte de la superficie de nailon.



TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO ESCOAMENTO TURBULENTO EM DESENVOLVIMENTO ENTRE PLACAS PLANAS PARALELAS

Marcio Bueno dos Santos

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE - LIT

12227-010 - S. J. dos Campos - SP - Brasil

Sergio Mourão Saboya

Edson Luiz Zaporoli

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA - IEME

12228-900 - S.J. dos Campos - SP - Brasil



SUMÁRIO

O presente trabalho trata da análise experimental da convecção forçada entre placas paralelas num escoamento com transição laminar-turbulenta. Foi utilizada a técnica de sublimação de naftaleno conjuntamente com a analogia entre transferência de calor e massa para a determinação dos coeficientes locais de transferência, que são apresentados na forma do número de Sherwood. A faixa de números de Reynolds dos escoamentos estudados foi de 15000 a 55000.

INTRODUÇÃO

O propósito deste trabalho é a determinação dos coeficientes locais de transferência no escoamento com transição laminar-turbulenta na região de entrada de um canal de placas planas paralelas, no qual uma das placas é isotérmica e a outra é adiabática, empregando-se analogia de transferência de calor e massa conjuntamente com a técnica de sublimação de naftaleno.

A técnica de sublimação de naftaleno tem sido utilizada com sucesso em experimentos com convecção forçada. Diversos trabalhos nesta linha foram realizados, podendo-se citar, a título de exemplo, os trabalhos de Saboya e Santos (1981) e Fernandes (1977). Podemos também citar artigo de Souza Meneses (1988) que apresenta uma revisão dos trabalhos da literatura de transferência de calor nos quais experimentos com a técnica de sublimação de naftaleno são utilizados. Entretanto, não é do conhecimento dos autores do presente artigo o emprego desta técnica às situações nas quais há uma transição laminar-turbulenta.

Um exame da literatura mostra diversas pesquisas correlatas à presente, destacando-se os trabalhos de Boelter et al. (1948), que fornece valores de coeficientes locais neste tipo de escoamento num duto circular com temperatura uniforme na parede, e Mills (1962) que analisa o mesmo problema no caso de fluxo de calor uniforme na parede.

MÉTODOS EXPERIMENTAIS

O aparato experimental utilizado, que é esquematizado na figura 1, era um canal constituído por duas superfícies paralelas. Uma das superfícies era de acrílico e a outra de naftaleno. O ar era forçado através do canal, o que provocava a sublimação do naftaleno das placas, desgastando-as. Medindo-se o desgaste local do naftaleno obtinham-se os coeficientes locais de transferência de massa (número de Sherwood) e pela analogia entre transferência de calor e massa podia-se obter os correspondentes coeficientes de transferência de calor (número de Nusselt).

Como na superfície de acrílico não havia desgaste, isto é, fluxo de massa, ela simulava uma parede onde não havia fluxo

de calor, isto é, adiabática. Como é sabido, a analogia entre transferência de calor e massa mostra que as concentrações de naftaleno desempenham no problema de transferência de massa papel análogo ao das temperaturas no problema de transferência de calor. Sobre as superfícies de naftaleno as concentrações podem ser consideradas constantes. Portanto, estas superfícies simulam paredes isotérmicas na correspondente situação de transferência de calor.

Aparato Experimental. A figura 1 mostra um esquema do aparato experimental usado. O ar era succionado para o canal através de uma entrada em forma de boca de sino. Esta boca de sino foi projetada e construída cuidadosamente, seguindo-se as indicações de Morel (1977). Seu objetivo era tornar o perfil de velocidades na entrada o mais uniforme possível e propiciar um nível de turbulência na entrada relativamente baixo. Detalhes do projeto e da construção são dados em Santos (1991), e uma discussão completa sobre as características do escoamento na boca de sino pode ser encontrada nos artigos de Morel (1977), Boelter et al. (1948) e Mills (1962).

O canal era formado por uma placa de acrílico e quatro placas de naftaleno montadas sobre uma base de duralumínio. Foram utilizadas quatro placas de naftaleno por causa da maior facilidade de fabricação de placas de menor dimensão. As quatro placas formavam um canal de 320 mm de comprimento por 116 mm no sentido perpendicular ao escoamento. A altura do canal era de 10 mm. A razão de aspecto era, portanto, de 11,6. Esta razão pode ser considerada suficientemente grande para simular um canal de placas infinitas tendo em vista a comparação dos presentes resultados com os de Sparrow e Cur (1982) na região desenvolvida (v. tabela 1). Essa afirmação também encontra apoio consultando-se o artigo de Sparrow et al. (1966), no qual foi utilizada uma razão de aspecto de 5. No projeto da seção de testes voltou-se a atenção para uma rápida montagem e desmontagem, visando-se minimizar os efeitos da convecção (sublimação) natural do naftaleno.

O naftaleno utilizado para a fabricação das placas era previamente destilado e nunca era reutilizado sem uma nova destilação. Maiores detalhes sobre os métodos de destilação e fundição das placas podem ser encontrados em Santos (1991).

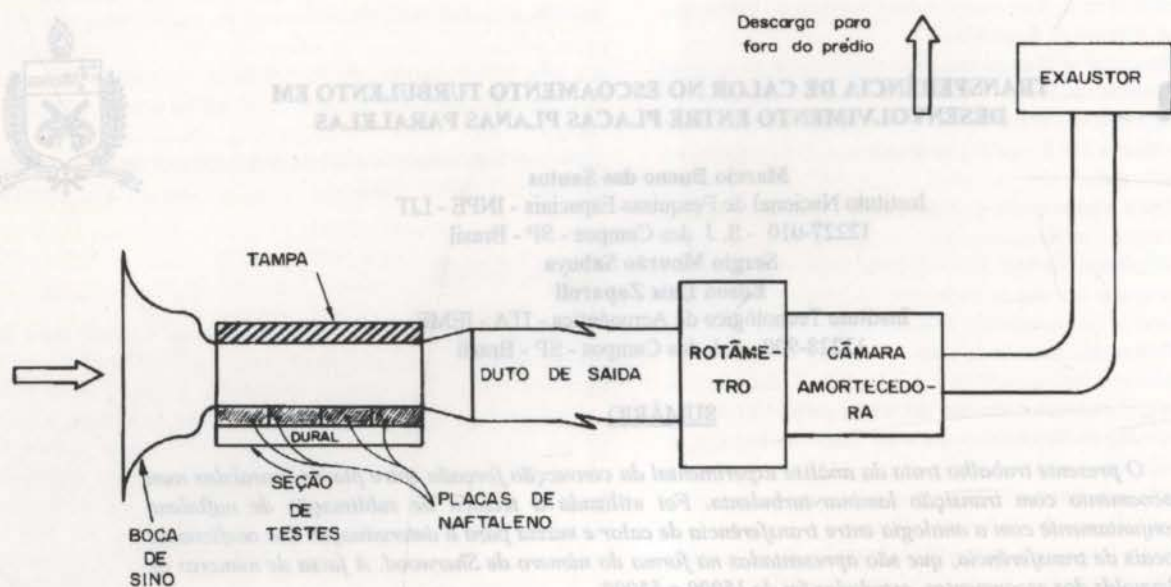


Figura 1 - Aparato Experimental

A figura 1 mostra os outros componentes do aparato: o rotâmetro utilizado para medir as vazões do ar, a câmara amortecedora, construída para dar maior estabilidade ao escoamento; e o exaustor que lançava o ar para fora do laboratório, garantindo-se assim que o ar que entrava no canal estivesse sem resíduos de naftaleno.

Medições. Para medir-se o desgaste local do naftaleno sublimado durante o escoamento usou-se um apalpador. A diferença de leitura no apalpador antes e depois do teste fornecia a espessura do naftaleno sublimado em cada placa. Obtinha-se a localização dos pontos nos quais as leituras eram feitas usando-se uma mesa de coordenadas cujo micrômetro permitia deslocamentos de 0,001mm.

O cômputo do desgaste provocado pela sublimação natural era feito com auxílio de uma quinta placa de naftaleno com as mesmas dimensões das outras quatro. A superfície desta quinta placa era exposta ao ar, pelo mesmo tempo que era necessário para montagem e desmontagem da seção de teste e para a medição do desgaste local nas outras placas. A variação de massa sofrida pela quinta placa era utilizada para a correção do desgaste sofrido por sublimação natural das outras quatro placas que constituíam a seção de testes. Esta variação era obtida por uma balança de precisão capaz de medir 0,1 mg. As medidas locais foram feitas na linha central das placas, eqüidistantes da paredes laterais. Um resumo das operações de medição será dada a seguir:

- pesagem da placa usada para correção da sublimação natural;
- fixação da placa na mesa de coordenadas e leitura das medidas locais utilizando-se o apalpador;
- montagem da seção de testes;
- partida no exaustor, dando início ao escoamento do ar através do canal;
- desmontagem do aparato (após o intervalo de tempo da corrida) e nova fixação das placas na mesa de coordenadas. Isto era feito utilizando-se pontos de referência sobre uma superfície metálica acoplada à placa de naftaleno. Pontos sobre esta superfície, em

razão de não sofrerem desgaste, permitiam um posicionamento correto das placas de naftaleno, isto é, o mesmo da fase b;

- nova leitura das medidas locais. A diferença com os valores obtidos em b fornecia o desgaste local;
- nova pesagem da placa usada para correção da sublimação natural.

As medições que poderiam provocar maiores erros experimentais eram as de tempo, comprimento, massa e vazão. No caso do tempo, devido à duração das corridas e a precisão do cronômetro usado, os erros eram desprezíveis. Nas medições dos desgastes locais nas placas o erro estimado foi de 1 μm , sendo que os desgastes típicos eram da ordem de 50 μm , havendo, portanto, um erro da ordem de 2%. Nos casos da massa e vazão os erros estimados foram de 4%. Uma análise completa dos erros experimentais, incluindo a medição de outras grandezas além das citadas acima, mostra (Santos, 1991) que a incerteza dos resultados não ultrapassa os valores de 4,5% para o número de Sherwood local e de 4,2% para o número de Reynolds.

Os detalhes completos dos procedimentos experimentais, assim como uma descrição detalhada das operações que visavam a maior confiabilidade possível das medidas são encontrados em Santos (1991).

REDUÇÃO DE DADOS EXPERIMENTAIS

Após a obtenção do desgaste local procedia-se à redução dos dados experimentais que será descrita a seguir.

O número de Sherwood local - análogo ao número de Nusselt é dado por:

$$Sh_x = \frac{k_x D_h}{D_N} \quad (1)$$

onde D_h é o diâmetro hidráulico, D_N é a difusividade do naftaleno no ar e K_x é o coeficiente local de transferência de massa definido por:

$$k_x = \frac{\dot{m}_N}{(\rho_{NW} - \rho_{N0})} \quad (2)$$

onde \dot{m}_N é o fluxo de massa local sublimada (análogo ao fluxo de calor) e ρ_{NW} e ρ_{N0} são as concentrações de naftaleno (análogas às temperaturas) na superfície da placa e na entrada do canal, respectivamente. O fluxo de massa local de naftaleno sublimado pode ser escrito como:

$$\dot{m}_N = \frac{\rho_{NS} d}{t} \quad (3)$$

onde ρ_{NS} é a massa específica do naftaleno sólido ($1,145 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$), d é o desgaste local medido nas placas e t é o tempo da experiência.

A concentração na entrada do canal, ρ_{N0} , é zero pois o ar ao penetrar na seção de testes estava isento da presença de naftaleno sublimado. A concentração de naftaleno na parede, ρ_{NW} , era calculada com auxílio da correlação de Sogin (Sogin e Providence, 1958):

$$\log_{10} p_{NW} = 13,564 - \frac{3729,4}{T_w} \quad (4)$$

Sendo p_{NW} a pressão parcial de vapor do naftaleno na superfície e T_w a temperatura das placas. T_w era igual a temperatura ambiente, já que as placas eram deixadas no laboratório por um tempo suficientemente longo e, portanto, estavam em equilíbrio térmico com o ambiente. A concentração ρ_{NW} era calculada utilizando-se a lei dos gases ideais:

$$\rho_{NW} = \frac{p_{NW}}{R_N T_w} \quad (5)$$

onde R_N é a constante de gás do naftaleno, igual a $64,872 \text{ J/kg K}$. A difusividade D_N era calculada por:

$$D_N = \frac{\nu}{Sc} \quad (6)$$

onde Sc era o número de Schmidt (análogo ao número de Prandtl) do naftaleno. Seu valor é 2,50. O valor de ν (viscosidade cinemática do vapor de naftaleno) era tomado igual ao da viscosidade cinemática do ar, já que as concentrações de naftaleno eram muito pequenas. ν era calculada por:

$$\nu = \frac{\mu_{ar}}{\rho_{ar}} \quad (7)$$

Para a avaliação de μ_{ar} e ρ_{ar} nas temperaturas ambientes utilizaram-se as correlações fornecidas por Zografos et al. (1987).

O número de Reynolds foi definido como:

$$Re = \frac{4Q}{\nu_{ar} PE} \quad (8)$$

onde Q é a vazão volumétrica em m^3/s e PE é o perímetro molhado do canal retangular.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As figuras 2, 3, 4 e 5 mostram os valores dos números de Sherwood locais em função do comprimento adimensional $X=x/D_h$, onde x é a coordenada na direção do escoamento, para os números de Reynolds 54000, 38371, 33424 e 19565. Nas figuras 2, 3 e 4 observa-se a transição laminar-turbulenta que ocorre no escoamento. O mecanismo dessa transição é explicado da seguinte forma: nas proximidades da entrada tem-se altos valores do número de Sherwood, sendo que estes valores diminuem a medida que o escoamento avança no canal, mostrando o desenvolvimento da camada limite. Ocorre então um súbito aumento dos coeficientes de transferência, indicando a existência da transição. A região do escoamento da entrada até a transição é laminar e após essa tem-se turbulência, o que explica o súbito aumento de Sh_x . As figuras mostram que a transição ocorreu aproximadamente para os valores de X iguais a 1,5 (figura 2), 5,0 (figura 3) e 8,5 (figura 4). A transição ocorre mais próxima da entrada quanto maior o número de Reynolds, como era de se esperar. Boelter et al. (1948) e Mills (1962) notaram

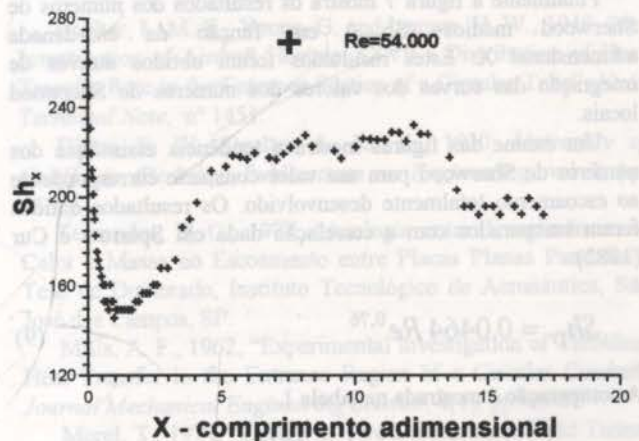


Figura 2 - Valores dos coeficientes locais de transferência $Re=54.000$

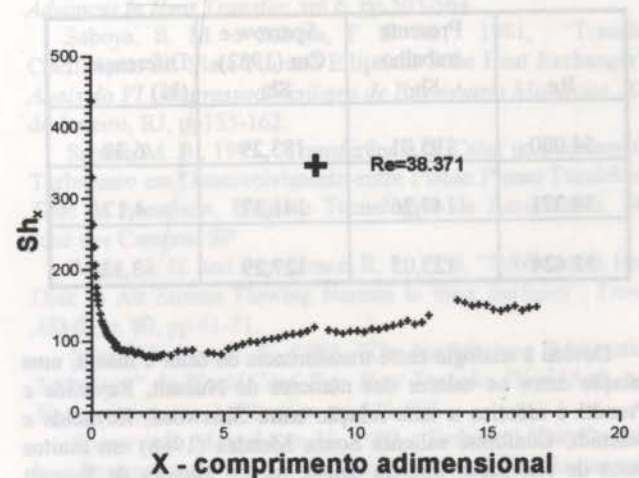


Figura 3 - Valores dos coeficientes locais de transferência $Re=38.371$

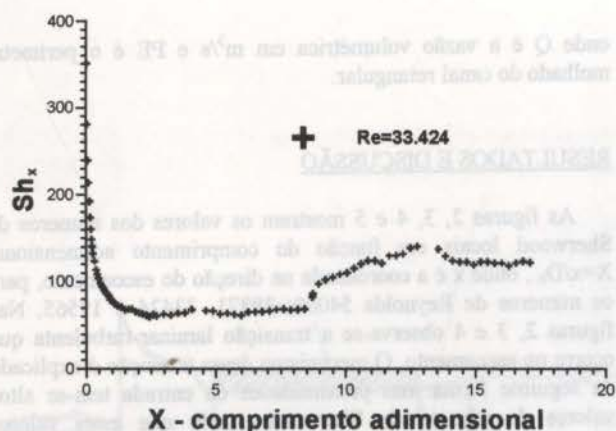


Figura 4 - Valores dos coeficientes locais de transferência
Re=33.424

o mesmo comportamento do escoamento. Este comportamento é o que é mostrado qualitativamente na figura 6.

A figura 5, correspondente ao menor número de Reynolds, não mostra a transição, indicando que o comprimento do canal estudado não foi suficiente para que esta ocorresse.

Finalmente a figura 7 mostra os resultados dos números de Sherwood médios (Sh_{med}) em função da coordenada adimensional X. Estes resultados foram obtidos através de integração das curvas dos valores dos números de Sherwood locais.

Um exame das figuras mostra a tendência assintótica dos números de Sherwood para um valor constante correspondente ao escoamento totalmente desenvolvido. Os resultados obtidos foram comparados com a correlação dada em Sparrow e Cur (1982):

$$Sh_D = 0,0464 Re^{0,76} \quad (9)$$

A comparação é mostrada na tabela 1.

Tabela 1- Comparação do valor do número de Sherwood no escoamento totalmente desenvolvido - (Sh_D)

Re	Presente trabalho Sh_D	Sparrow e Cur (1982) Sh_D	Diferença (%)
54.000	195,01	183,29	6,39
38.371	147,26	141,37	4,17
33.424	123,05	127,29	-3,33

Devido à analogia entre transferência de calor e massa, uma relação entre os valores dos números de Nusselt, Reynolds e Prandtl é idêntica a uma relação entre Sherwood, Reynolds e Schmidt. Conforme salienta Souza Mendes (1988) em muitos casos de convecção forçada tem-se para o número de Nusselt (local ou médio):

$$Nu = C Pr^n Re^m \quad (10)$$

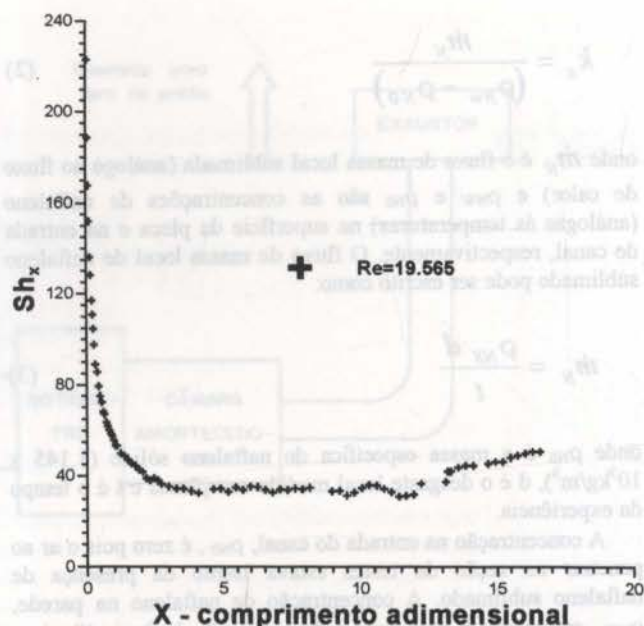


Figura 5 - Valores dos coeficientes locais de transferência
Re=19.565

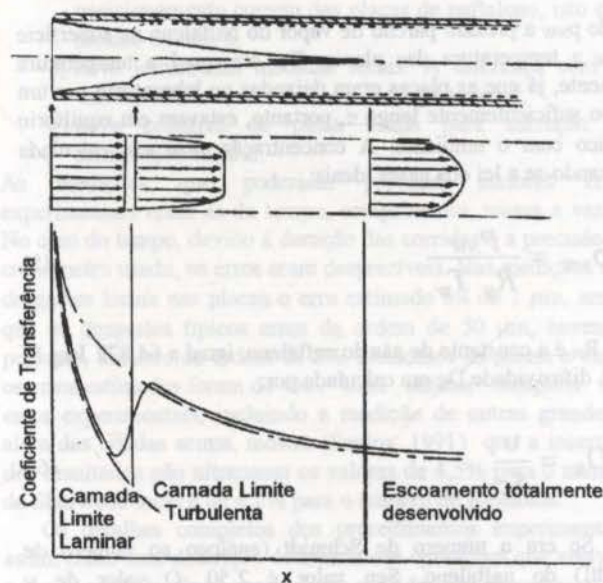


Figura - 6 Transição laminar-turbulenta no escoamento

Em consequência da analogia vem:

$$Sh = C Sc^n Re^m \quad (11)$$

Portanto:

$$Nu = \left(\frac{Pr}{Sc} \right)^n Sh \quad (12)$$

No presente caso tem-se $Pr \approx 0.7$ (ar) e $Sc = 2,5$ (naftaleno).

O expoente n recomendado (Souza Mendes, 1988) é 0,4 para escoamentos turbulentos internos.

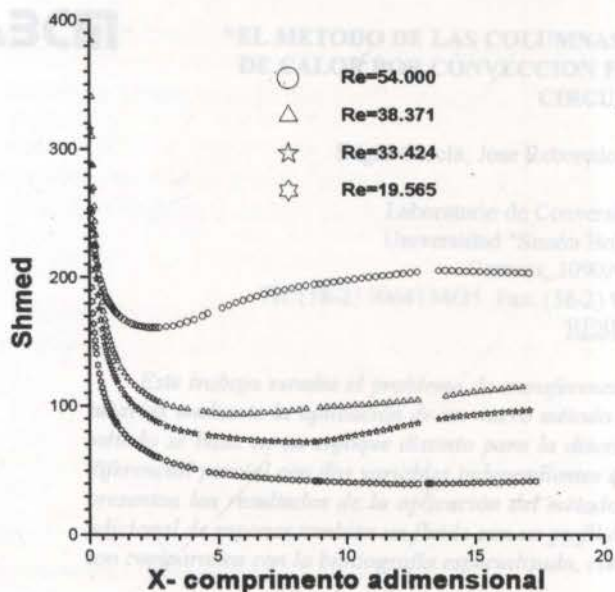


Figura 7 - Valores dos coeficientes médios de transferência

A figura 8 apresenta uma comparação dos resultados obtidos no presente trabalho com a conhecida correlação de Dittus-Boelter (1930) e com a correlação de Petukhov (1970). Nesta comparação foi utilizada a Eq. (11) com $n=0,4$. Ambas as correlações foram desenvolvidas para dutos de seção circular, e a de Petukhov para a condição de contorno de fluxo de calor constante. Entretanto, é comum na literatura utilizar-se a equação de Dittus-Boelter em geometrias não circulares, substituindo-se o diâmetro do tubo pelo diâmetro hidráulico. É também usual considerar-se que no escoamento turbulento a diferença entre as condições de contorno de fluxo de calor

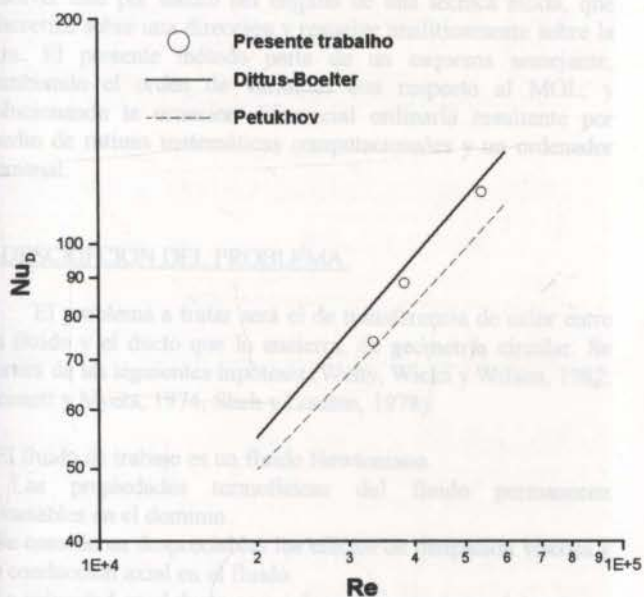


Figura 8 - Números de Nusselt para o escoamento desenvolvido

constante e de temperatura na parede constante tem influência secundária (Sparrow e Cur, 1982). Vê-se, desta forma, que os resultados obtidos no presente trabalho, apresentando seus valores entre as correlações de Dittus-Boelter e Petukhov, (bastante usadas na prática da engenharia) levam a uma confiabilidade, no mínimo, comparável à destas correlações.

CONCLUSÕES

A técnica de sublimação de naftaleno foi satisfatória para o estudo o problema envolvendo escoamento laminar-turbulento. Os valores dos coeficientes de transferência apresentam concordância qualitativa com os apresentados por Boelter (1948) e Mills (1962) que analisaram dutos de seção circular. Uma boa concordância quantitativa com os valores dos coeficientes de transferência na região desenvolvida apresentados por Sparrow e Cur (1982) foi obtida.

Para baixo número de Reynolds (19.565) nota-se que a transição não é atingida, mostrando que os valores dos coeficientes de transferência são os do escoamento laminar. A transição possivelmente poderia ocorrer numa posição a jusante no canal.

REFERÊNCIAS

- Boelter, L. M. K., Young, G. and Iversen, H. W., 1948, "An Investigation of Aircraft Heaters XXVII - Distribution of Heat Transfer Rate in the Entrance Section of a Circular Tube", *Naca Technical Note*, nº 1451.
- Dittus, F. W., Boelter, L. M. K., 1930, *University of California (Berkeley) Publications on Engineering*, vol 2, pp. 443.
- Fernandes, E. C., 1977, "Analogia entre Transferência de Calor e Massa no Escoamento entre Placas Planas Paralelas", Tese de Doutorado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP.
- Mills, A. F., 1962, "Experimental Investigation of Turbulent Heat Transfer in the Entrance Region of a Circular Conduit" *Journal Mechanical Engineering Science*, 4(1), pp. 63-67
- Morel, T., 1977, "Design of Two-Dimensional Wind Tunnel Contraction", *Journal of Fluids Engineering*, June, pp. 371-378.
- Petukhov, B. S., 1970, "Heat Transfer and Friction in Turbulent Pipe Flow with Variable Physical Properties", *Advances in Heat Transfer*, vol 6, pp 503-564.
- Saboya, S. M. e Saboya, F. E. M., 1981, "Transfer Coefficients for Plate Fin and Elliptical Tube Heat Exchanger", *Anais do VI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Rio de Janeiro, RJ, pp153-162.
- Santos, M. B., 1991, "Transferência de Calor no Escoamento Turbulento em Desenvolvimento entre Placas Planas Paralelas", Tese de Mestrado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP
- Sogin, H. H. and Providence, R. I., 1958, "Sublimation from Disk to Air Stream Flowing Normal to their Surfaces", *Trans. ASME*, v. 80, pp 61-71.
- Souza Mendes, P. R., 1988, "The Naphthalene Sublimation Technique", In *World Conf. Exp. Heat Transfer Fluid Mech, and Thermodynamics*, 1, Elsevier, pp 446-460.
- Sparrow, E. M. and Cur, N., 1982, "Turbulent Heat Transfer in a Symmetrically or Asymmetrically Heated Flat Rectangular Duct with Flow Separation at Inlet", *Journal of Heat Transfer*, v. 104, pp. 82-89.



"EL METODO DE LAS COLUMNAS APLICADO A LA TRANSFERENCIA DE CALOR POR CONVECCION FORZADA LAMINAR EN TUBERIAS CIRCULARES".



Edgar García, Jose Reboredo, Andrés Tremante, Ciro Pérez

Laboratorio de Conversión de Energía Mecánica.
Universidad "Simón Bolívar", Apdo Postal: 89000
Caracas, 1090A, VENEZUELA.

Tlf: (58-2) 9064134/35. Fax: (58-2) 9064132, E-mail: atrem@skynet.usb.ve

RESUMEN

Este trabajo estudia el problema de transferencia de calor por convección forzada interna laminar en tuberías mediante la aplicación de un nuevo método al cual hemos llamado método de las columnas. Este método se basa en un enfoque distinto para la discretización de las variables que conforman la ecuación diferencial parcial con dos variables independientes que gobierna este proceso de transferencia de calor. Se presentan los resultados de la aplicación del método para el clásico problema de Graetz, con la variante adicional de suponer también un fluido con un perfil de velocidades del tipo pistón. Los resultados obtenidos son comparados con la bibliografía especializada, considerándose altamente satisfactorios.

1-INTRODUCCION:

El problema de transferencia de calor de un fluido a lo largo de un conducto circular, con flujo laminar hidrodinámicamente desarrollado, mejor conocido como el problema de Graetz, ha sido el problema tradicionalmente empleado para mostrar el fenómeno de convección forzada en ductos cerrados. Este problema está gobernado por la ecuación de la energía, que se presenta como una ecuación diferencial en derivadas parciales con dos variables independientes, después de las siguientes consideraciones: flujo laminar, fluido newtoniano, propiedades termofísicas constantes y efectos de disipación viscosa y conducción axial despreciables.

Soluciones analíticas (Bennet y Myers, 1974) y numéricas han sido dadas a este problema, entre las últimas el método de las líneas (MOL) (Liskovets, 1965) presenta la posibilidad de resolver éste por medio del empleo de una técnica mixta, que discretiza sobre una dirección y resuelve analíticamente sobre la otra. El presente método parte de un esquema semejante, cambiando el orden de variables con respecto al MOL, y solucionando la ecuación diferencial ordinaria resultante por medio de rutinas matemáticas computacionales y un ordenador personal.

2-DESCRIPCION DEL PROBLEMA.

El problema a tratar será el de transferencia de calor entre un fluido y el ducto que lo encierra, de geometría circular. Se partirá de las siguientes hipótesis (Welty, Wicks y Wilson, 1982; Bennett y Myers, 1974, Shah y London, 1978):

- El fluido de trabajo es un fluido Newtoniano.
- Las propiedades termofísicas del fluido permanecen invariables en el dominio.
- Se consideran despreciables los efectos de disipación viscosa y de conducción axial en el fluido.
- La velocidad en el ducto es axial y es función única del radio.

Para este problema, la ecuación de la energía en coordenadas cilíndricas y en forma dimensional resulta simplificada de la siguiente forma:

$$\rho U(r) C_p \frac{\partial T}{\partial x} = k \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (1)$$

Para definir el problema falta proponer el perfil de velocidades y las condiciones térmicas del problema:

2.1 Caso A: Problema de Graetz con temperatura constante en la pared: El clásico problema de Graetz propone dos hipótesis adicionales:

- Flujo hidrodinámicamente desarrollado en el ducto circular, de estructura parabólica.
- Temperatura en la pared constante (T_s), diferente a la temperatura de entrada del fluido (T_0).

Así, la velocidad del fluido corresponde a la ecuación:

$$U(r) = 2U_m \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \quad (2)$$

Y el problema queda definido por las siguientes condiciones de borde:

$$a) x = 0; T = T_0, \quad 0 \leq r \leq R \quad (3)$$

$$b) r = R; T = T_s, \quad \forall x > 0 \quad (4)$$

$$c) r = 0; \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \forall x > 0 \quad (5)$$

Esta expresión se puede adimensionalizar por medio de los siguientes cambios de variable:

$$\theta = \frac{T - T_s}{T_0 - T_s} \quad (6)$$

$$Z = \frac{x}{2R \text{RePr}} \quad (7)$$

$$\text{Re} = \frac{2U_m R}{\nu} \quad (8)$$

$$\text{Pr} = \frac{\mu C_p}{k} \quad (9)$$

$$\eta = \frac{r}{R} \quad (10)$$

Adimensionalizando, la ecuación se presenta como:

$$(1 - \eta^2) \frac{\partial \theta}{\partial Z} = 2 \frac{\partial \left(\eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} \quad (11)$$

Con las siguientes condiciones de borde:

$$\text{a) } Z = 0; \theta = \theta_0, \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (12)$$

$$\text{b) } \eta = 1; \theta = \theta_s, \quad \forall Z > 0 \quad (13)$$

$$\text{c) } \eta = 0; \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad \forall Z > 0 \quad (14)$$

2.2- Caso B: Problema de Graetz con Flujo Pistón: Se proponen dos hipótesis extra:

- Temperatura en la pared constante (T_s), diferente a la temperatura de entrada del fluido (T_0)
- Se considerará que el flujo en la tubería corresponderá a un fluido Bingham en flujo tipo pistón.

Así, la ecuación del perfil de velocidades será:

$$U(r) = U_m \quad (15)$$

sometida a las mismas condiciones de borde del caso A.

Por medio de la misma adimensionalización, obtenemos:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial Z} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial \left(\eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} \quad (16)$$

sometida a las mismas condiciones de borde del caso A expresadas en sus variables adimensionales (12,13,14).

2.3- Caso C. Problema de Graetz con flujo de calor constante en la pared: Para este problema, las hipótesis extra a considerarse son:

- Flujo de calor por unidad de área constante a través del tubo hacia el fluido.
- El flujo es laminar, y está hidrodinámicamente desarrollado (ecuación (2)).

Bajo estas condiciones, la ecuación diferencial corresponde a la misma del caso A, bajo las siguientes condiciones de borde:

$$\text{a) } x = 0; T = T_0, \quad 0 \leq r \leq R \quad (17)$$

$$\text{b) } r = R; q_s'' = k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{r=R}, \quad \forall x > 0 \quad (18)$$

$$\text{c) } r = 0; \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \forall x > 0 \quad (19)$$

Esta expresión se puede adimensionalizar por medio de los siguientes cambios de variable:

$$\phi = \frac{T - T_0}{\frac{q_s'' R}{k}} \quad (20)$$

$$Z = \frac{x}{2R \text{RePr}} \quad (21)$$

$$\text{Re} = \frac{2U_m R}{\nu} \quad (22)$$

$$\text{Pr} = \frac{\mu C_p}{k} \quad (23)$$

$$\eta = \frac{r}{R} \quad (24)$$

Adimensionalizando, la ecuación se presenta como:

$$(1 - \eta^2) \frac{\partial \phi}{\partial Z} = 2 \frac{\partial \left(\eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} \quad (25)$$

Con las siguientes condiciones de borde:

$$\text{a) } Z = 0; \phi = 0, \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (26)$$

$$\text{b) } \eta = 1; \frac{\partial \phi}{\partial r} = 1, \quad \forall Z > 0 \quad (27)$$

$$\text{c) } \eta = 0; \frac{\partial \phi}{\partial r} = 0, \quad \forall Z > 0 \quad (28)$$

3-DISCRETIZACION Y METODO DE LAS COLUMNAS.

El método de las columnas propone discretizar las ecuaciones diferenciales en la dirección Z por medio de diferencias finitas, quedando así por resolver un problema de una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden sobre la dirección radial de la tubería. La solución de este problema reportará el perfil de temperaturas del fluido a la salida de un volumen de control en la tubería de longitud dz, resolviendo la ecuación en la columna de salida z+dz en base a la información de la columna z. De allí viene el nombre de éste método, como Método de las Columnas (MOC, según sus siglas en inglés).

Partiendo de la ecuación (11) (se pueden presentar desarrollos similares para (16) y (25)), y discretizando en Z, se tiene:

$$\frac{\partial \theta}{\partial Z} = \frac{\theta_i^{z+dz} - \theta_i^z}{\Delta Z} \quad (29)$$

sustituyendo en (11) y considerando que la ecuación diferencial ahora es ordinaria en η tenemos:

$$(1 - \eta^2) \frac{\theta_i^{z+dz} - \theta_i^z}{\Delta Z} = \frac{2}{\eta} \frac{d\left(\eta \frac{d\theta}{d\eta}\right)}{d\eta} \quad (30)$$

Desarrollando la derivada, agrupando y considerando un esquema implícito, se obtiene:

$$\left[2 \frac{d^2 \theta}{d\eta^2} + \frac{2}{\eta} \frac{d\theta}{d\eta} \right]^{z+dz} - (1 - \eta^2) \frac{\theta_i^{z+dz}}{\Delta Z} + (1 - \eta^2) \frac{\theta_i^z}{\Delta Z} = 0 \quad (31)$$

Ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, no homogénea, con coeficientes variables. Esta ecuación puede ser resuelta por medio de una discretización en θ por un método numérico ya programado. Así, por medio de librerías computacionales se resuelve el problema en la columna de salida, en base a la información de la columna de entrada.

4-MOC EN VERSION DE MARCHA Y VERSION DIRECTA.

Se proponen dos versiones diferentes del MOC:

- Por medio de un proceso de marcha, en el que para resolver el problema en la estación z+dz se toma la información del paso anterior. Esta versión del método será llamada versión de marcha.
- Se emplea como información inicial la propuesta en Z=0, resolviendo solo una vez la ecuación diferencial en la estación Z deseada. Esta versión del método será llamada versión directa.

La segunda versión es menos precisa que la primera, pero por el otro lado es mucho más rápida ya que es solo necesario resolver una ecuación diferencial. Se obtuvieron soluciones por ambas versiones del método, observándose que el error cometido por la solución directa era inicialmente pequeño, y que aumentaba a medida que aumentaba la variable Z.

5-METODOLOGIA:

Se resolvieron las ecuaciones diferenciales correspondientes a los tres casos según el MOC en su versión de marcha y en su versión directa empleando 21,50 y 100 nodos de distribución variable en la solución en η . En el MOC en su versión de marcha, Z se inició en el origen y el paso se calculó como 1/10 del intervalo logarítmico por el que marcha Z, iniciándose el valor de ΔZ como 10^{-7} . En el caso del MOC en su versión directa, Z se inició en el origen y el paso fue el necesario para llegar a la columna o estación deseada. Para cada columna se calculó

a) La temperatura volumétrica media, definida como:

$$T_v = \frac{\int_0^R T(r) V(r) 2\pi r dr}{\int_0^R V(r) 2\pi r dr} \quad (32)$$

, en sus variables originales.

b) El Nu local y el Nu promedio hasta la zona de interés, por medio de la ecuación:

$$Nu_m = \frac{1}{Z} \int_0^Z Nu_x dZ \quad (33)$$

Donde Nu_x es:

$$Nu_x = 2 \frac{\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(Z, 1)}{\theta_b(Z)} \quad \text{Para casos A y B.} \quad (34)$$

$$Nu_x = \frac{2}{\phi_s - \phi_b} \quad \text{Para caso C.} \quad (35)$$

Los resultados obtenidos se comparan con las soluciones de Shah y London (1978) en el caso del problema de Graetz clásico con temperatura ó calor definido en las paredes, y con las soluciones de Johnstun (1991) en el caso de un fluido Bingham con perfil de velocidades tipo pistón.

Es de notar que el programa empleado para resolver la ecuación diferencial de segundo orden resultante de la aplicación del MOC emplea un paso variable, razón por la cual era probable que el MOC en su versión de marcha requiriera información de la etapa de partida en lugares distintos a los lugares donde fue calculada la solución numérica. De esta forma, se aproximó el perfil numérico obtenido a un polinomio de interpolación, también generado por rutinas computacionales preensambladas.

6-RESULTADOS.

Tabla 1 - Valores de Temperatura Volumétrica media, Nusselt local y Nusselt promedio para el problema de Graetz con condición de temperatura constante en la pared, comparativamente con Shah y London (1978).

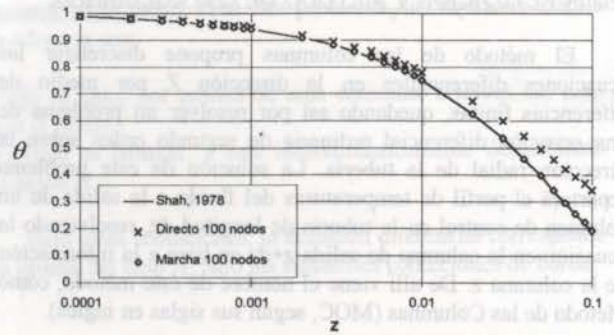
Z	θ		Nux		Num	
	Shah, 1978	Imp 100 Nodos	Shah, 1978	Imp 100 Nodos	Shah, 1978	Imp 100 Nodos
0.000001	0.9994	0.9993	106.54	106.69	160.36	159.36
0.000002	0.9990	0.9990	84.34	84.64	127.05	126.68
0.000005	0.9981	0.9981	61.88	62.06	93.33	94.35
0.00001	0.9971	0.9970	48.91	49.00	73.87	74.44
0.00005	0.9915	0.9915	28.25	28.35	42.81	43.07
0.0001	0.9866	0.9866	22.26	22.32	33.82	33.96
0.0005	0.9618	0.9618	12.82	12.87	19.50	19.59
0.001	0.9403	0.9403	10.13	10.15	15.38	15.46
0.005	0.8362	0.8365	6.00	6.03	8.94	8.98
0.01	0.7511	0.7514	4.92	4.93	7.16	7.18
0.05	0.3953	0.3975	3.71	3.72	4.64	4.66
0.1	0.1897	0.1922	3.66	3.65	4.16	4.16

Tabla 2 - Valores de Nusselt local y Nusselt promedio para la extensión del problema de Graetz con condición de flujo de calor constante en la pared.

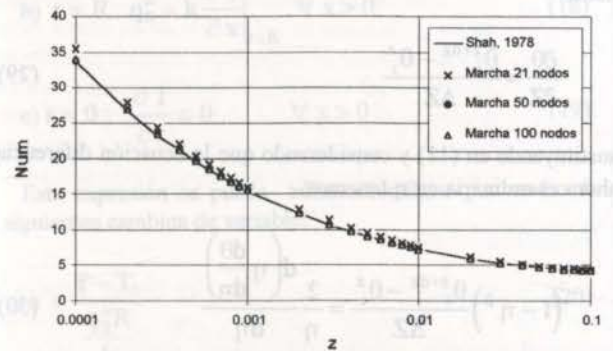
Z	Nux		Num	
	Shah, 1978	Imp. 100 Nodos	Shah, 1978	Imp. 100 Nodos
0.000001	129.203	128.771	194.2	181.426
0.000005	75.19	75.264	113.2	110.729
0.00001	59.51	59.543	89.68	89.585
0.00005	34.511	34.566	52.12	52.176
0.0001	27.275	27.300	41.26	41.243
0.0005	15.813	15.840	23.9	23.933
0.001	12.538	12.550	18.91	18.936
0.005	7.4937	7.508	11.08	11.103
0.01	6.1481	6.155	8.896	8.911
0.05	4.5139	4.520	5.747	5.761
0.1	4.3748	4.372	5.082	5.089

Tabla 3 - Valores de Temperatura Volumétrica Media, Nusselt Local y Nusselt Promedio para un Fluido Bingham Tipo Pistón Hidrodinamicamente Desarrollado en una tubería circular isotérmica.

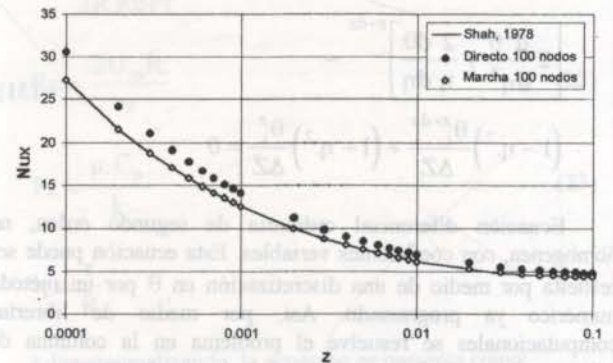
2Z	θ		Nux		Num	
	Johnston, 1991	Imp 100 Nodos	Johnston, 1991	Imp 100 Nodos	Johnston, 1991	Imp 100 Nodos
0.0001	0.96828	0.96830	81.3650	83.278	161.154	160.356
0.0002	0.95527	0.95633	58.008	62.680	114.415	115.306
0.0004	0.93697	0.93828	41.502	44.424	81.376	83.827
0.001	0.90109	0.90214	26.876	27.813	52.074	54.040
0.002	0.86132	0.86537	19.531	21.253	37.322	38.831
0.004	0.80629	0.81084	14.372	15.423	26.914	28.393
0.01	0.70144	0.70501	9.884	10.233	17.731	18.682
0.02	0.5904	0.60360	7.744	8.401	13.174	13.850
0.04	0.44708	0.46228	6.437	6.852	10.063	10.684
0.1	0.21785	0.23145	5.817	5.888	7.62	7.989



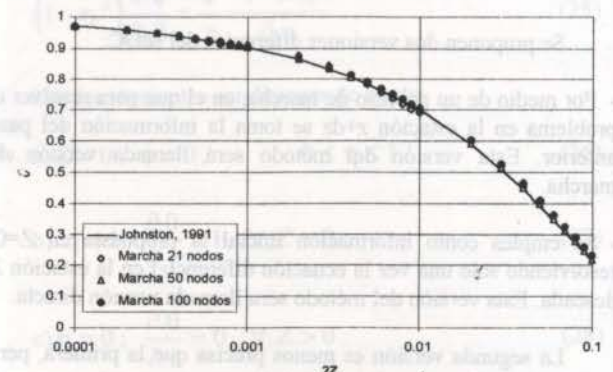
GRAFICA # 1 - TEMPERATURA VOLUMETRICA MEDIA PARA EL PROBLEMA DE GRAETZ CON TEMPERATURA CONSTANTE EN LA PARED UTILIZANDO 100 NODOS



GRAFICA # 2 - NUSSLETT PROMEDIO PARA EL PROBLEMA DE GRAETZ CON TEMPERATURA CONSTANTE EN LA PARED UTILIZANDO EL METODO DE MARCHA



GRAFICA # 3 - NUSSLETT LOCAL PARA EL PROBLEMA DE GRAETZ CON CONDICION DE FLUJO DE CALOR CONSTANTE EN LA PARED UTILIZANDO 100 NODOS



GRAFICA # 4 - TEMPERATURA VOLUMETRICA MEDIA PARA UN FLUIDO BINGHAM TIPO PISTON CON CONDICION DE TEMPERATURA CONSTANTE EN LA PARED UTILIZANDO EL METODO DE MARCHA

7-DISCUSION DE RESULTADOS

Del grupo de corridas que se muestran en las tablas y figuras anteriores podemos presentar las siguientes ideas.

7.1-Solución del Problema de Graetz (Flujo laminar desarrollado en tubería circular) con temperatura y calor constantes, y problema de transferencia de calor en tuberías circulares con flujo Bingham por el método MOC: Como se puede notar en las tablas 1, 2 y 3 presentadas, el MOC de marcha se compara favorablemente con los resultados presentados por Shah y London (1978) y Johnston (1991), presentando desviaciones menores del 1% sobre las temperaturas, y errores levemente mayores en el Nu, errores que decrecen a medida que aumenta la posición en la dirección Z.

7.2 Efecto del número de nodos: Como se puede ver en la gráfica 4, El aumento del número de nodos en la dirección η mejora los resultados en el método de marcha. En el cálculo de la temperatura volumétrica (fig. 4) y mas marcadamente en el cálculo de el Nusselt (figuras 2) la respuesta obtenida por la discretización en η de 21 nodos presentan desviaciones, mientras que a partir de 50 nodos la solución se sigue el comportamiento de la solución teórica. Es de notar que la solución se desvia mas en el caso del Nusselt debido a que para evaluarlo es necesario evaluar la derivada de la solución en $\eta=1$, mientras que en el cálculo de la temperatura volumétrica la integración del perfil compensa los errores cometidos en la solución. La precisión numérica de esta derivada depende fuertemente del número de puntos de la solución en la dirección de la pared, especialmente en las primeras etapas de la marcha, donde los gradientes son muy pronunciados.

7.4 Diferencias entre las versiones directa y de marcha: La gráfica 1 nos permite comparar la solución por el método de marcha y el método directo, pudiendose observar que el método directo, a pesar de ser mucho mas rápido que el de marcha, presenta un error que va creciendo a medida que la solución se aleja del origen. No es tan marcado este error en el caso del calculo del Nusselt (gráfica 3), debido a que los gradientes en el fluido en contacto con la superficie de la tubería son función principalmente de la dirección η , y con mucha menor intensidad de la dirección Z.

8-CONCLUSIONES.

1- El Método de las Columnas (MOC) se presenta como una opción a la solución de problemas de ecuaciones diferenciales bidimensionales de orden uno en una variable y orden n en la otra, permitiendo el empleo de técnicas numéricas mixtas de solución al problema, empleando un método numérico más preciso en la dirección en la que los gradientes de las funciones involucradas son mas pronunciados, y rutinas preprogramadas para calcularlo.

2- En el caso particular del problema de Graetz, se probó la eficiencia del MOC, mostrándose una correcta aproximación a los resultados empleando una discretización variable en Z y una discretización de 100 puntos en la dirección η .

3- La discretización es un parámetro importante a la hora de obtener resultados confiables, y queda a juicio del investigador.

4- El método de marcha es más preciso que el método directo, mostrando ambos las mismas tendencias y presentando el método directo la posibilidad de obtener una respuesta acotada al problema de manera rápida.

REFERENCIAS:

- 1 Bennett, C. O., Myers, J. E. "Momentum, Heat and Mass Transfer", 1974. Mc Graw Hill, New York, Second Edition.
- 2 Liskovets, O. A., 1965. "The Method of Lines (Review), Differential Equations", 1
- 3 Welty, J. R., Wicks, C. E. y Wilson, R.E., 1982. "Fundamentos de Transferencia de Momento Calor y Masa". Editorial Limusa, México.
- 4 Shah, R. K., y London, A. L. "Advances in Heat Transfer. Laminar Flow Forced Convection in Ducts", 1978. Academic Press, New York.
- 5 Jhonston, Peter R. "Axial Conduction and the Graetz Problem for a Bingham Plastic in Laminar Tube Flow", 1991. Int. Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 34, # 4/5, pp. 1209-1217.
- 6 IMSL Computer Library for Fortran Subroutines, IMSL Inc, Houston, Texas, 1982.

ABSTRACT.

This work presents an alternative method to discretize and solve problems in partial differential equations, which has been called "Method of Columns". To prove the method, the problem of internal convection heat transfer in a cylindrical tube (knew as the Graetz problem) is solved for different conditions (parabolic flow with constant initial temperature in contact with a constant temperature wall, or constant heat flux at the wall, and piston-like flux in contact with constant temperature wall). The results obtained are compared with specialized bibliography, showing good agreement.

UNSTEADY FORCED CONVECTION IN THE THERMAL ENTRANCE REGION



Silvia Cheroto, Carlos A. C. Santos*, and Sadik Kakaç

Dep. of Mechanical Engineering, University of Miami, Coral Gables, FL 33124 USA

*Dep. of Mechanical Technology, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Pb 58059-900, Brazil



SUMMARY

A Theoretical study of unsteady laminar forced convection for a thermally developing flow between parallel plates, subjected to a general boundary condition of the fifth kind that accounts for both external convection and wall heat capacitance effects, is presented. The flow is subjected to a periodic variation of inlet temperature and to provide hybrid analytical-numerical solution, the generalized integral transform technique is used.

INTRODUCTION

The study of thermally unsteady forced convection between parallel plate channels has received considerable attention. Kakaç et al (1990) presented an analysis of the periodic forced convection problem using the generalized integral transform technique, using one auxiliary problem similar to the classical Graetz problem. In this work, the periodic analysis is performed by using two coupled equations simultaneously. This technique allows the solution of the problem with two coupled equations in the real domain instead of one equation in the complex domain. The advantage of this approach is that it can be extended for solving non linear problems without a complicated computational scheme. In addition, a filtering technique is developed to improve the solution and accelerate the convergence.

The physical quantities of practical relevance such as centerline temperature, bulk temperature, wall temperature and Nusselt numbers are estimated. In order to validate the method of solution, results are compared with other theoretical work and also with experimental findings.

LITERATURE SURVEY

A number of research works recently have been reported on transient forced convection inside ducts and channels, especially in laminar flow. Sparrow and de Farias (1968) presented an analysis to the periodic forced convection problem in a parallel-plate channel with sinusoidal variation of inlet temperature and slug flow velocity profile, while considering the effects of wall conjugation. The effects of a spatially variable velocity profile to fully developed laminar flow were accounted for in the work of Cotta and Özisik (1986), where the generalized integral transform technique was used in order to provide analytical solutions.

Kakaç et al. (1990) studied an unsteady laminar forced convection problem in the thermal entrance region of a rectangular duct with fully developed flow by the generalized integral transform technique. Theoretical studies for the variation of temperature amplitudes at the centerline of a rectangular duct, under a boundary condition of the fifth kind and sinusoidal variation of the inlet temperature were done. The

results were compared with experimental findings to verify the approach.

Santos and Cotta (1993) made use of the generalized integral transform technique to provide an analytical approach to the solution of laminar forced convection problem inside externally finned circular tubes, subjected to a fifth kind boundary condition and Biot number varying axially. The most complete literature survey about the generalized integral transform technique (G.I.T.T.) was done by Cotta (1993).

PROBLEM FORMULATION

Unsteady forced convection with fully developed laminar flow inside the thermal entrance region a parallel-plate channel was considered, which is subjected to periodic variations of the fluid inlet temperature. The thermal response of the system to the inlet periodic perturbations is sought after the initial transient has disappeared, while at the internal fluid-solid interface, a general boundary condition of the fifth kind, that accounts for both external convection and wall heat capacitance effects, is imposed. Figure 1 shows the geometry and coordinate system for the theoretical analysis.

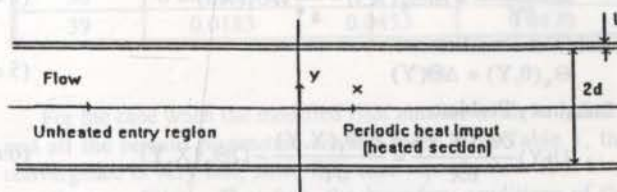


Figure 1 - Geometry of the channel for theoretical analysis.

The dimensionless governing equations for this problem are represented by the energy equation and related boundary conditions as:

$$\frac{\partial \Theta(X, Y, \tau)}{\partial \tau} + U(Y) \frac{\partial \Theta(X, Y, \tau)}{\partial X} = \frac{\partial^2 \Theta(X, Y, \tau)}{\partial Y^2} \quad (1.a)$$

$$\frac{\partial \Theta(X, 0, \tau)}{\partial Y} = 0 \quad (1.b)$$

$$\frac{\partial \Theta(X, 1, \tau)}{\partial Y} + Bi \Theta(X, 1, \tau) + \frac{1}{a^*} \frac{\partial \Theta(X, 1, \tau)}{\partial \tau} = 0 \quad (1.c)$$

and inlet condition as

$$\Theta(0, Y, \tau) = \Delta \Theta(Y) e^{i\Omega \tau} \quad (1.d)$$

where the dimensionless groups are given by:

$$Y = \frac{y}{d}; \quad X = \frac{x D_h}{d^2 Re Pr}; \quad U(Y) = \frac{3}{2}(1 - Y^2)$$

$$\tau = \frac{\alpha t}{d^2}; \quad \Theta(X, Y, \tau) = \frac{T(x, y, t) - T_w}{T_w - T_c}; \quad \Delta \Theta(Y) = \frac{\Delta T_c}{\Delta T_c}$$

$$Bi = \frac{h_e d}{k_f}; \quad a^* = \frac{(\rho c)_f d}{(\rho c)_w L}; \quad \Omega = \frac{d^2 \beta}{\alpha}; \quad Re = \frac{\bar{u} d}{\nu}$$

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (2)$$

THEORETICAL ANALYSIS

The initial condition is not necessary since we are only interested in solutions for large times, after the initial transients have disappeared. Then, only the periodic solution of the problem is sought. For such cases, the solution can be assumed as:

$$\Theta(X, Y, \tau) = \tilde{\Theta}(X, Y) e^{i\Omega \tau} \quad (3)$$

But since $\tilde{\Theta}(X, Y)$ represents a complex quantity, it can be represented by a combined complementary function consisting of real and imaginary parts, as:

$$\tilde{\Theta}(X, Y) = \Theta_R(X, Y) + i \Theta_I(X, Y) \quad (4)$$

where the subscripts R and I represent the real and imaginary parts, respectively, and i is the imaginary number.

This complementary formulation should be substituting into the governing equations, after substituting the periodic solution, and then the problem can be divided into real and imaginary problems, as:

Real Problem:

$$U(Y) \frac{\partial \Theta_R(X, Y)}{\partial X} = \frac{\partial^2 \Theta_R(X, Y)}{\partial Y^2} + \Omega \Theta_I(X, Y) \quad (5.a)$$

$$\frac{\partial \Theta_R(X, 0)}{\partial Y} = 0 \quad (5.b)$$

$$\frac{\partial \Theta_R(X, 1)}{\partial Y} + Bi \Theta_R(X, 1) - \frac{1}{a^*} \Omega \Theta_I(X, 1) = 0 \quad (5.c)$$

and inlet condition as:

$$\Theta_R(0, Y) = \Delta \Theta(Y) \quad (5.d)$$

Imaginary Problem:

$$U(Y) \frac{\partial \Theta_I(X, Y)}{\partial X} = \frac{\partial^2 \Theta_I(X, Y)}{\partial Y^2} - \Omega \Theta_R(X, Y) \quad (6.a)$$

$$\frac{\partial \Theta_I(X, 0)}{\partial Y} = 0 \quad (6.b)$$

$$\frac{\partial \Theta_I(X, 1)}{\partial Y} + Bi \Theta_I(X, 1) + \frac{1}{a^*} \Omega \Theta_R(X, 1) = 0 \quad (6.c)$$

and inlet condition as:

$$\Theta_I(0, Y) = 0 \quad (6.d)$$

The use of the preceding analysis leads to the formulation of two separate, but complementary problems, real and imaginary ones, defined by Eqs.(5) and (6), respectively.

The use of the generalized integral transform technique allows the selection of two appropriate similar auxiliary eigenvalue problems; one for the real part and the other for the imaginary part, which are defined as follows:

Real Part:

$$\frac{d^2 \Psi_{n,R}(Y)}{dY^2} + \mu_{n,R}^2 U(Y) \Psi_{n,R}(Y) = 0 \quad (7.a)$$

$$\frac{d \Psi_{n,R}(0)}{dY} = 0 \quad (7.b)$$

$$\frac{d \Psi_{n,R}(1)}{dY} + Bi \Psi_{n,R}(1) = 0 \quad (7.c)$$

Imaginary Part:

$$\frac{d^2 \Psi_{n,I}(Y)}{dY^2} + \mu_{n,I}^2 U(Y) \Psi_{n,I}(Y) = 0 \quad (8.a)$$

$$\frac{d \Psi_{n,I}(0)}{dY} = 0 \quad (8.b)$$

$$\frac{d \Psi_{n,I}(1)}{dY} + Bi \Psi_{n,I}(1) = 0 \quad (8.c)$$

where $\Psi(Y)$'s and μ 's are the eigenfunctions and eigenvalues, respectively. Also, since the problems are similar, only one need to be solved.

The solution of the eigenvalue problem involves difficulties associated with the calculation of the first eigenvalue, which is the most important one, since some numerical methods have a risk of missing some of the eigenvalues, especially the first. In order to solve this problem, the advanced sign-count method (Mikhailov and Vulchanov, 1983) is used, which provides safe, guaranteed and automatic computation of as many eigenfunctions and eigenvalues as desired.

The auxiliary eigenvalue problem allow the definition of the integral transform pairs for the functions $\Theta_R(X, Y)$ and $\Theta_I(X, Y)$, respectively, as:

$$\Theta_R(X, Y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Psi_{n,R}(Y)}{N_{n,R}^{1/2}} \bar{\Theta}_{n,R}(X) \quad (9.a)$$

$$\bar{\Theta}_{n,R}(X) = \frac{1}{N_{n,R}^{1/2}} \int_0^1 U(Y) \Psi_{n,R}(Y) \Theta_R(X, Y) dY \quad (9.b)$$

$$\Theta_I(X, Y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Psi_{n,I}(Y)}{N_{n,I}^{1/2}} \bar{\Theta}_{n,I}(X) \quad (10.a)$$

$$\bar{\Theta}_{n,I}(X) = \frac{1}{N_{n,I}^{1/2}} \int_0^1 U(Y) \Psi_{n,I}(Y) \Theta_I(X, Y) dY \quad (10.b)$$

where Eqs. (9.a) and (10.a) are the inversion formulas and Eqs. (9.b) and (10.b) are the transform formulas. Also, a symmetrical kernel is used and N 's are the normalization integrals.

By making use of the integral transform pairs and operating on the real and imaginary problems given by Eqs.(5) and (6), the integral transformation can be formulated, as can be seen in Cotta (1993). The resulting system of ordinary differential equations to be solved for the temperature field is given by:

$$\frac{d \bar{\Theta}_{n,R}(X)}{dX} + \mu_{n,R}^2 \bar{\Theta}_{n,R}(X) = \Omega \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{K1_{m,n}}{a^*} + K2_{m,n} \right] \bar{\Theta}_{m,I}(X) \quad (11)$$

$$\frac{d \bar{\Theta}_{n,I}(X)}{dX} + \mu_{n,I}^2 \bar{\Theta}_{n,I}(X) = -\Omega \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{K1_{m,n}}{a^*} + K2_{m,n} \right] \bar{\Theta}_{m,R}(X) \quad (12)$$

with inlet conditions given by:

$$\bar{\Theta}_{n,R}(0) = \frac{1}{N_{n,R}^{1/2}} \int_0^1 \Psi_{n,R}(Y) U(Y) \Delta \Theta(Y) dY \quad (13)$$

$$\bar{\Theta}_{n,I}(0) = 0 \quad (14)$$

and $K1$ and $K2$ are given as:

$$K1_{m,n} = \frac{\Psi_{m,I}(1) \Psi_{n,R}(1)}{N_{m,I}^{1/2} N_{n,R}^{1/2}} \quad (15)$$

$$K2_{m,n} = \int_0^1 \frac{\Psi_{m,I}(Y) \Psi_{n,R}(Y)}{N_{m,I}^{1/2} N_{n,R}^{1/2}} dY \quad (16)$$

In order to solve the original problem, two coupled equations are needed to be solved simultaneously. The computational impossibility to solve the infinity system compels the truncation in any sufficient large order and it is solved for the desired accuracy, once the related eigenvalue problem is solved for the eigenvalues.

The above system is solved numerically by the subroutine DIVPAG from IMSL library (1989). This subroutine has automatic control of local error, what keeps the system in a prescribed tolerance given by the user.

After getting the temperature distribution along the channel, quantities of practical relevance for the design of thermal equipment can be calculated. After that, we can compare our results with other works. For all the cases, the Prandtl number is kept constant equal to 0.7. The other parameters, as Reynolds number, fluid-to-wall thermal capacitance ratio, modified Biot number, and dimensionless inlet frequency, vary.

After solve the problem, we try to improve the convergence of the temperature distribution, since our convergence, for specific cases, are slow. In order to do that, a filtering scheme is implemented. The main idea in the filtering approach is to reduce or eliminate the influence of source terms in the energy equation and associated boundary conditions. We can do that by extracting simpler formulation from the original problem. For the present study, the following filtering strategy is proposed:

$$\Theta(X, Y, \tau) = \Theta_s(X, Y, \tau) + \Theta_p(X, Y, \tau) \quad (17)$$

The problem involving one part of the solution for the temperature distribution, $\Theta_s(X, Y, \tau)$, has analytical solution. It was solved in Cheroto (1995) by the generalized integral transform technique and the solution is in the form:

$$\Theta_s(X, Y, \tau) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\Psi_j(Y) \bar{f}_j}{N_j^{1/2}} \bar{f}_j e^{-\mu_j^2 X} e^{i\Omega \tau} \quad (18)$$

where

$$\bar{f}_j = \int_0^1 \Psi_j(Y) U(Y) \Delta \Theta(Y) dY \quad (19)$$

Equation (17) should be substituted into the main equation and related boundary conditions given by Equations (1.a,b,c,d). After that, the solution procedure is in the same way as it is without the filter, and the auxiliary eigenvalue problems are the same ones. The resulting system of ordinary differential equations to be solved for the temperature field is now more complex, since now we have more coefficients, and it is given by:

$$\frac{d\bar{\Theta}_{j,R}(X)}{dX} + \mu_{j,R}^2 \bar{\Theta}_{j,R}(X) = \Omega \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{K1_{m,j}}{a^*} + K2_{m,j} \right] \bar{\Theta}_{m,I}(X) \quad (20)$$

$$\frac{d\bar{\Theta}_{j,I}(X)}{dX} + \mu_{j,I}^2 \bar{\Theta}_{j,I}(X) = -\Omega \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{K1_{m,j}}{a^*} + K2_{m,j} \right] \bar{\Theta}_{m,R}(X) - \Omega \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{K1_{m,j}}{a^*} + K2_{m,j} \right] \bar{f}_j e^{-\mu_j^2 X} \quad (21)$$

and inlet conditions as

$$\bar{\Theta}_{j,R}(0) = \bar{\Theta}_{j,I}(0) = 0 \quad \text{at } X = 0 \quad (22)$$

The coefficients $K1_{m,j} = K1_{m,n}$ and $K2_{m,j} = K2_{m,n}$ since the eigenfunctions of real and imaginary auxiliary eigenvalue problems are the same.

RESULTS AND DISCUSSION

The computer program for solving the differential equations systems is developed in FORTRAN 77 based on the use of the subroutine DIVPAG from IMSL library, and the tolerance used of the order of $10E-4$.

Table 1 shows the convergence of the values of the dimensionless centerline temperature amplitude which is computed from different truncation orders of the system. The results are shown for various positions along the channel, from the inlet to the outlet. The outlet position is selected large enough to simulate a thermally developed situation. The values shown in this table are for conditions of uniform variation in the periodic inlet temperature across the channel, Reynolds number equal to 452 (laminar), Prandtl number equal to 0.7 (this value is used in all calculations), dimensionless inlet frequency equal to 0.06491, modified Biot number equal to 10 and fluid-to-wall thermal capacitance ratio equal to $5E-5$. From this table it can be seen that the values are not completely converged, needing a greater truncation order of the system, but computational limitations make this undesirable. The difficulty in achieve convergence is due to the fact that the original problem is not well represented by the auxiliary problem. However, the results are still in good agreement with other studies (Kakaç et al. 1990). The convergence of bulk temperature amplitude has the same behavior.

Table 1 - Convergence of centerline temperature amplitude for $Re=452$, $Pr=0.7$, $\Omega=0.06491$, $a^*=5E-5$, $Bi=10$, uniform variation of periodic inlet temperature (uniform profile).

Position	Nc=5	Nc=35	Nc=45
1	0.9800	0.9984	0.9986
3	0.8640	0.9188	0.9205
6	0.6341	0.7272	0.7307
9	0.4597	0.5658	0.5702
12	0.3331	0.4396	0.4443
15	0.2414	0.3415	0.3461
18	0.1749	0.2653	0.2697
21	0.1267	0.2061	0.2101
24	0.0918	0.1601	0.1637
27	0.0665	0.1244	0.1275
30	0.0482	0.0966	0.0993
33	0.0349	0.0751	0.0774
36	0.0253	0.0583	0.0603
39	0.0183	0.0453	0.0470

For the case when the modified Biot number tends to infinity and all the remain parameters are the same as in Table 1, the convergence is very fast, since this case reproduces a first kind boundary condition. Therefore, the boundary conditions of the auxiliary eigenvalue problem reproduce exactly the boundary conditions of the original problem. This case is shown in Table 2. A modified Biot number tending to infinity makes the original problem homogeneous and is a special case in which the results are always excellent and the convergence is very fast. It can be seen that the values of the dimensionless centerline temperature amplitude are converged for the truncation order of a system equal to 5 and increasing the truncation order only increases the computational costs without making any improvement in the solution.

Table 2 - Convergence of centerline temperature amplitude for $Re=452$, $Pr=0.7$, $\Omega=0.06491$, $a^*=5E-5$, $Bi=\infty$, uniform variation of periodic inlet temperature (uniform profile).

Position	$Nc=5$	$Nc=25$	$Nc=45$
1	0.9990	0.9990	0.9990
3	0.9277	0.9277	0.9277
6	0.7471	0.7471	0.7471
9	0.5908	0.5908	0.5908
12	0.4665	0.4665	0.4665
15	0.3683	0.3683	0.3683
18	0.2908	0.2908	0.2908
21	0.2296	0.2296	0.2296
24	0.1813	0.1813	0.1813
27	0.1431	0.1431	0.1431
30	0.1130	0.1130	0.1130
33	0.0892	0.0892	0.0892
36	0.0704	0.0704	0.0704
39	0.0556	0.0556	0.0556

Figure 2 shows the comparison between the values of the dimensionless centerline temperature amplitude obtained in the present work and the results obtained by using the work done by Kakaç et al. (1990), for different values of modified Biot numbers. As it can be seen, the results between the two approaches are in good agreement with each other. Since in this case the dimensionless inlet frequency Ω is equal to zero, the problem represents completely the steady-state case of the classical Graetz problem with a boundary condition of the third kind, which can still be transformed into one of the first or second kind, depending on the limit values of the modified Biot number (infinity or zero).

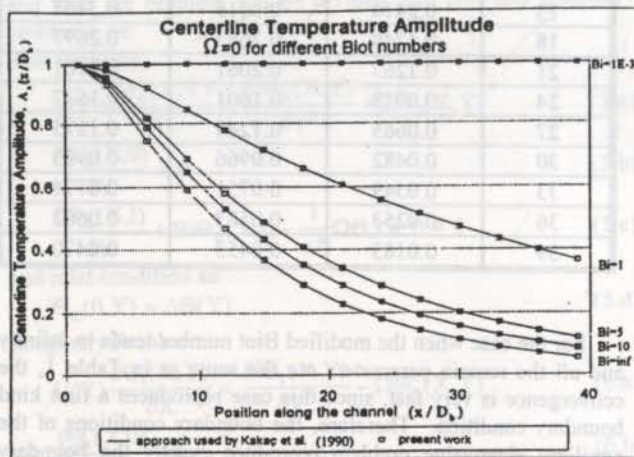


Figure 2 - Comparison between two different approaches for the dimensionless centerline temperature amplitude for $Re=452$, $Pr=0.7$, and $a^*=5E-5$, uniform variation in the periodic inlet temperature.

Figure 3 shows the comparison between the results of the present and the experimental as well as theoretical results from Kakaç et al. (1990) for the dimensionless centerline temperature amplitude with non-uniform variation in the periodic inlet temperature (parabolic inlet) profile across the channel. The two

theoretical results are in agreement. The experimental results are close to the theoretical ones, but not in completely agreement. It seems that in the entrance of the channel, as the Reynolds number increases, the discrepancy between the theoretical and experimental results increased as well.

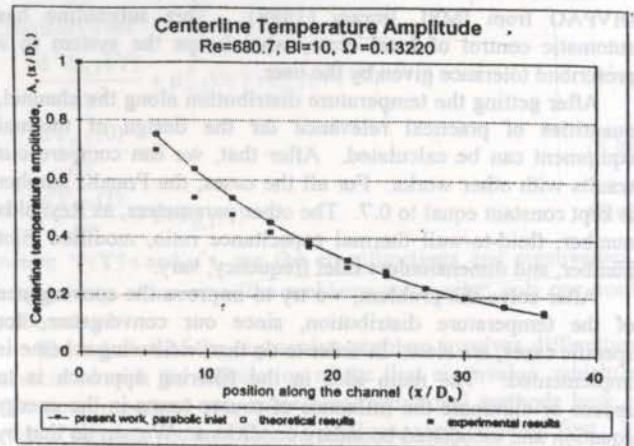


Figure 3 - Comparison of theoretical and experimental results (Kakaç et al. 1990) of dimensionless centerline temperature amplitude for $Re=680.7$, $Pr=0.7$, $a^*=5E-5$, $Bi=10$, and $\Omega=0.13220$.

The phase lag, Φ , shows the delay in the thermal wave information through the channel at each location. The phase lag of centerline temperature is given by the arc-tangent of the imaginary part of the centerline temperature divided by the real part of the centerline temperature. Figure 4 shows the comparison of the phase lags of the present work with the phase lags by using the work done by Kakaç et al. (1990), for relevant parameters and different values of the dimensionless inlet frequency as $\Omega=0.06491$, 0.12982 , 0.19473 and 0.25964 (equivalent to 1Ω , 2Ω , 3Ω and 4Ω , respectively), for uniform variation in the periodic inlet temperature profile. The agreement between the two approaches is excellent.

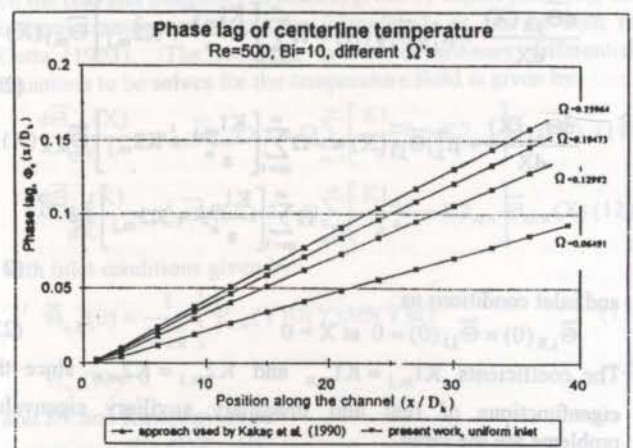


Figure 4 - Comparison of theoretical values of phase lag of dimensionless centerline temperature amplitude for $Re=500$,

$Pr=0.7, Bi=10, a^*=8.5E-3$, and for different values of the dimensionless inlet frequency Ω .

Figure 5 shows the effects of the fluid-to-wall thermal capacitance ratio, a^* , on the amplitude of the dimensionless wall temperature. The wall amplitudes decay faster as the value of a^* decreases, but this fact is only noticed for a^* less than 1. For small values of a^* , the heat stored inside the walls is greater than the heat transferred to the outside by external convection and therefore the dimensionless wall temperature amplitude decays quickly. With greater a^* , the information carried by the thermal wave is sensed almost entirely by the wall at the same location. Although the result is not presented here, we concluded that the differences between the dimensionless wall temperature amplitude for different a^* 's are smaller for greater values of modified Biot number ($Bi=10$). For a larger value of the modified Biot number, the heat carried by external convection and the heat stored inside the wall are of the same order and the influence of a^* is not as strong as for $Bi=1$.

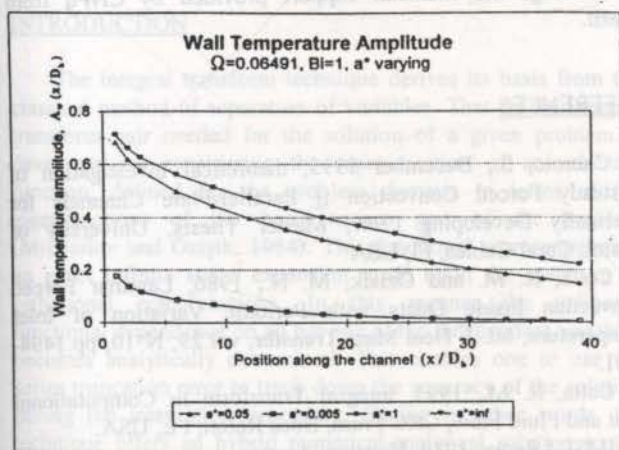


Figure 5 - Effects of the fluid-to-wall thermal capacitance ratio (a^*) on the dimensionless wall temperature amplitude for $Re=452, Pr=0.7, Bi=1$, and $\Omega=0.06491$.

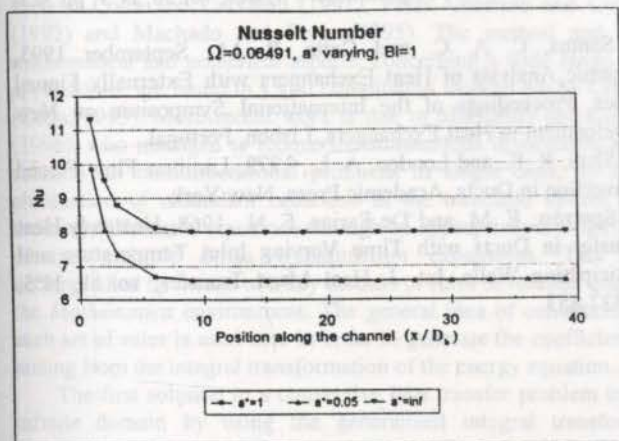


Figure 6 - Nusselt number for different values of the fluid-to-wall thermal capacitance ratio (a^*), for $Re=452, Pr=0.7, Bi=1$ and $\Omega=0.06491$, uniform variation in the periodic inlet temperature profile.

Figure 6 shows the effect of the fluid-to-wall thermal capacitance ratio, a^* , on the variation of the Nusselt number along the channel. The parameter a^* varied as $a^*=0.05, a^*=1$, and a^* tending to infinity. As a^* decreases, the value of the Nusselt number decreases, but it is only sensed for a^* equal or less than 0.05. Although it is not shown here, we observed that the influence of a^* in the Nusselt number is less stronger for greater values of the modified Biot number, as $Bi=10$.

Table 3 shows the convergence of the values of the dimensionless centerline temperature amplitude for different truncation orders of the system. The case here is exactly the same as in Table 1, but now the results are obtained by using the filtering technique. Although the filter scheme reduced the computational time, the improvement in the solution is not what was expected. The values are still not converged. One option could be an integral balance approach and also a combined integral balance with filtering technique. The dimensionless bulk temperature amplitude has the same behavior.

Table 3 - Convergence of centerline temperature amplitude for $Re=452, Pr=0.7, \Omega=0.06491, a^*=5E-5, Bi=10$, uniform variation of periodic inlet temperature (uniform profile), with filtering approach.

Position	$Nc=5$	$Nc=25$	$Nc=45$
1	0.9758	1.0033	0.9987
3	0.8783	0.9228	0.9259
6	0.6581	0.7301	0.7404
9	0.4824	0.5770	0.5809
12	0.3539	0.4487	0.4549
15	0.2643	0.3491	0.3561
18	0.1955	0.2627	0.2783
21	0.1431	0.1989	0.2173
24	0.1051	0.1550	0.1699
27	0.0742	0.1305	0.1327
30	0.0588	0.1055	0.1034
33	0.0434	0.0691	0.0804
36	0.0333	0.0582	0.0622
39	0.0235	0.0504	0.0480

CONCLUDING REMARKS

The dimensionless centerline temperature amplitude variation along the channel exhibited a similar behavior to the dimensionless bulk temperature amplitude. At small values of modified Biot number, both exhibited an almost constant value over the entire length of the channel.

The phase lags increase significantly with the dimensionless inlet frequency, Ω . If the increase in the parameter Ω is interpreted as a decreasing value of the thermal diffusivity of the fluid, the fluid heat capacity can be regarded as a factor controlling the fluid temperature variation. That is, the thermal storage in the fluid "delays" the information sensed at each axial location downstream with respect to the inlet disturbance carried by the thermal wave.

NOMENCLATURE

Latin Symbols

a^* thermal capacitance ratio for fluid to wall =

	$(\rho c_p)_f d / (\rho c)_w L$
A	dimensionless temperature amplitude function
Bi	modified Biot number = $(h_e d / k_f)$
C_p	specific heat of the fluid, KJ/(kg.K)
c	wall specific heat, KJ/(kg.K)
d	half distance between the parallel-plates, m
D_h	hydraulic diameter = $(4d)$, m
h	the heat transfer coefficient outside the walls, $W/(m^2 \cdot K)$
h_e	the equivalent heat transfer coefficient between inner wall and ambient fluid = $(1/h + L/k_w)$, $W/(m^2 \cdot K)$
i	imaginary number $\sqrt{-1}$
k_f	fluid thermal conductivity, W/m.K
L	wall thickness, m
N	normalization integral
Nc	truncation order of the system
Nu	Nusselt number
Pr	Prandtl number = (ν / α)
Re	Reynolds number = $(\bar{u} d / \nu)$
T	temperature, K
T_w	mean wall temperature along the channel, K
$T(x,y,t)$	the temperature distribution along the channel, K
T_∞	the ambient temperature, K
$\Delta T(y)$	inlet temperature amplitude profile
ΔT_c	centerline inlet temperature amplitude
T_{c0}	centerline inlet temperature, K
t	time variable, s
$u(y)$	velocity profile across the plates, m/s
\bar{u}	mean velocity, m/s
$U(Y)$	dimensionless velocity profile = $(u(y) / \bar{u})$
x	axial coordinate, m
X	dimensionless axial coordinate = $((D_h / d)^2 (\alpha x / \bar{u} D_h^2))$
y	normal coordinate, m
Y	dimensionless normal coordinate = (y / d)

Greek Symbols

α	thermal diffusivity of the fluid = $(k_f / \rho c_p)$, m^2 / s ; or dimensionless decay index
β	inlet frequency, Hz
ρ_f	density of the working fluid, kg / m^3
ρ_w	equivalent density of the wall, kg / m^3
Ω	dimensionless inlet frequency = $(d^2 \beta / \alpha)$
Φ	phase lag
τ	dimensionless time = $(\alpha t / d^2)$
μ	eigenvalue
Ψ	eigenfunction (corresponding to nth or jth or mth eigenvalue)

V	dynamic viscosity of the fluid, m^2 / s
Θ	dimensionless temperature
$\Delta \Theta(Y)$	dimensionless temperature amplitude profile across the inlet
$\bar{\Theta}$	quasi-steady dimensionless temperature

Subscripts

b	bulk value
c	centerline value
f	working fluid value
j,m,n	order of the eigenvalue problem
w	wall value
∞	ambient value
I	imaginary part of the complex value
R	real part of the complex value

ACKNOWLEDGMENTS

The authors (S. Cheroto and C. A. C. Santos) gratefully acknowledge the financial support provided by CNPq from Brazil.

REFERENCES

- Cheroto, S., December 1995, theoretical Investigation of Unsteady Forced Convection in Parallel-Plate Channels for Thermally Developing Flow, Master Thesis, University of Miami, Coral Gables, FL, USA.
- Cotta, R. M. and Özisik, M. N., 1986, Laminar Forced Convection Inside Ducts with Periodic Variation of Inlet Temperature, Int. J. Heat Mass Transfer, vol.29, N°10, pp.1494-1501.
- Cotta, R. M., 1993, Integral Transform in Computational Heat and Fluid Flow, CRC Press, Boca Raton, FL, USA.
- IMSL Library, 1989, Houston, Texas.
- Kakaç, S., Li, W. and Cotta, R. M., 1990, Unsteady Laminar Forced Convection in Ducts with Periodic Variation of Inlet Temperature, J. of Heat Transfer, vol.112, N° 4, pp.913-920.
- Mikhailov, M. D. and Vulchanov, N. L., 19983, Computational Procedure for Sturm-Liouville Problems, reprinted from J. of Computational Physics, vol.50, N°3, pp.323-336.
- Santos, C. A. C. and Cotta, R. M., September 1993, Dynamic Analysis of Heat Exchangers with Externally Finned Tubes, Proceedings of the International Symposium on New Development in Heat Exchangers, Lisbon, Portugal.
- Shah, R. K. and London, A. L., 1978, Laminar Flow Forced Convection in Ducts, Academic Press, New York.
- Sparrow, E. M. and De Farias, F. N., 1968, Unsteady Heat Transfer in Ducts with Time Varying Inlet Temperature and Participating Walls, Int. J. Heat Mass Transfer, vol.11, N°5, pp.837-853.



Figure 2: Dimensionless temperature distribution for different values of the dimensionless inlet frequency Ω (for $\beta = 0.1$, $\beta = 0.5$, $\beta = 1.0$). The curves show the effect of inlet frequency on the temperature profile across the channel.



GENERALIZED INTEGRAL TRANSFORM SOLUTION TO THE LAMINAR THERMAL BOUNDARY-LAYER PROBLEM FOR FLOW PAST A CYLINDER

Manuel A. H. Bolivar[♦], Paulo L. C. Lage^{*} and Renato M. Cotta[♦]

[♦] Programa de Engenharia Mecânica, EE/COPPE/UFRJ
Cidade Universitária, CP 68.503, Rio de Janeiro, RJ, 21945-970, Brasil

^{*} Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ
Cidade Universitária, CP 68.502, Rio de Janeiro, RJ, 21945-970, Brasil



SUMMARY

The solution of the constant-property thermal boundary-layer equations, in its primitive variables, for the flow past a cylinder is obtained by application of the Generalized Integral Transform Technique (GITT), using a diffusion-based eigenvalue problem. The boundary condition at infinity was imposed at a finite but far enough distance from the surface. By choosing different finite distances to impose the boundary conditions for the momentum and energy equations, it was possible to achieve accurate results for the velocity and temperature profiles, separation points, and local Nusselt numbers.

INTRODUCTION

The integral transform technique derives its basis from the classical method of separation of variables. That is, the integral transform pair needed for the solution of a given problem is developed by considering the representation of an arbitrary function, defined for the problem domain, in terms of the eigenfunctions of the homogeneous part of the problem (Mikhailov and Özişik, 1984). This functional representation is an exact infinite series expansion made upon the spectrum of orthogonal eigenfunctions. In this manner the unknown functional dependence on all but one of the independent variables becomes analytically determined. This enables one to use the series truncation error to track down the accuracy of the solution during the integration procedure. Stating in other words, the technique offers an hybrid numerical-analytical solution to the considered problem.

Several boundary value problems of convective heat transfer, parabolic diffusion, and involving the Navier-Stokes equations have been solved systematically by applying the integral transform technique as described in various references, specifically dealing with the internal convection phenomenon, such as Cotta and Carvalho (1991), Pérez Guerrero and Cotta (1992) and Machado and Cotta (1995). The method and its mathematical and numerical aspects, concerning a wide range of applications, are found in a vast compilation worked out by Cotta (Cotta, 1993). More recent work is due to Mikhailov and Cotta (1996), who managed to reduce the summations involved in the solution of multidimensional problems to single ones, by the elimination of redundant equations in the truncated system of ordinary differential equations through an appropriate re-ordering of the multiple series eigenfunction expansions. This is accomplished by means of a key module of rules developed under the *Mathematica* environment. The general idea of constructing such set of rules is used here in order to generate the coefficients arising from the integral transformation of the energy equation.

The first solution to a convective heat transfer problem in a infinite domain by using the generalized integral transform technique has been carried out by Lage and Rangel (1994). They solved the laminar boundary-layer equations for flow past a sphere, truncating the domain at a finite distance, H , from the sphere surface, where a zero first derivative of the velocity field was then imposed. In our turn, Lage and Rangel's (1994) approach is extended to solve the constant-property thermal boundary-layer equations, in its primitive variables, for the flow past a cylinder, using a diffusion-based eigenvalue problem.

ANALYSIS

Consider the constant-density thermal boundary-layer equations for flow over two-dimensional bodies as given by Schlichting (1979). Neglecting curvature effects, they can be written in the following dimensionless form

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} = 0 \quad (1)$$

$$U \frac{\partial U}{\partial \xi} + V \frac{\partial U}{\partial \eta} = g(\xi) + \frac{\partial^2 U}{\partial \eta^2} \quad (2)$$

$$U \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} + V \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} = \frac{1}{Pr} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \eta^2} \quad (3)$$

subject to the following boundary conditions

$$\eta = 0, U = 0, V = 0, \Theta = 0$$

$$\eta \rightarrow \infty, U = U_e(\xi) \rightarrow 2 \sin \xi \text{ or } \partial U / \partial \eta \rightarrow 0 \text{ and } \partial \Theta / \partial \eta \rightarrow 0 \quad (4)$$

$$\xi = 0, U = 0, \partial U / \partial \xi = 0, \partial \Theta / \partial \xi = 0 \text{ (axial symmetry)}$$

where

$$g(\xi) = U_e \frac{dU_e}{d\xi} = 2 \sin(2\xi), \quad (5)$$

and $\xi = x/R$ is the dimensionless tangential coordinate, $U = u/u_\infty$ is the dimensionless tangential velocity, $\eta = \sqrt{Re} y/R$ is the dimensionless normal coordinate, $V = \sqrt{Re} v/u_\infty$ is the dimensionless normal velocity, $\Theta = (T - T_s)/(T_\infty - T_s)$ is the dimensionless temperature, $Re = u_\infty R/\nu$ is the Reynolds number, $Pr = \nu/\alpha$ is the Prandtl number, u_∞ is the free-stream velocity, T_s is the temperature at the cylinder surface, T_∞ is the outer-flow temperature, R is the cylinder radius, ν is the kinematic viscosity, r is the surface-axis of symmetry distance and $U_e = u_e/u_\infty$ is the dimensionless tangential velocity of the outer-flow (ideal flow).

The integral transform pair consists of the finite integral transform and its inversion formula, and can be developed by

considering the following auxiliary homogeneous problem for the space variable function $\Psi(\eta)$ defined in a finite region with an upper limit H . This is the new position for the application of the boundary conditions at "infinity". In order to alleviate the numerical stiffness due to the different thicknesses of the momentum and thermal boundary-layers, the boundary conditions for the velocity and temperature fields are imposed at two different finite distances from the surface, namely H_d and H_t , respectively

$$\eta = H_d, \partial U / \partial \eta = 0 \quad \text{and} \quad \eta = H_t, \partial \Theta / \partial \eta = 0 \quad (6)$$

Then, the auxiliary homogeneous problems become

$$\frac{d^2 \Psi_k^d(\beta_k, \eta)}{d\eta^2} + \beta_k^2 \Psi_k^d(\beta_k, \eta) = 0$$

$$\eta = 0, \Psi_k^d = 0, \eta = H_d, \frac{\partial \Psi_k^d}{\partial \eta} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{d^2 \Psi_k^t(\mu_k, \eta)}{d\eta^2} + \mu_k^2 \Psi_k^t(\mu_k, \eta) = 0$$

$$\eta = 0, \Psi_k^t = 0, \eta = H_t, \frac{\partial \Psi_k^t}{\partial \eta} = 0 \quad (8)$$

These homogeneous problems were built in considering the diffusion terms arising in the equations of momentum and energy conservation, and are called *Sturm-Liouville like* problems (or systems). Their solutions are nontrivial only for certain values of the parameters $\beta^2 \equiv \beta_k^2$ and $\mu^2 \equiv \mu_k^2$ ($k=1, 2, \dots, \infty$), called *eigenvalues*. The corresponding nontrivial solutions $\Psi^d(\beta_k, \eta) \equiv \Psi_k^d(\eta)$ and $\Psi^t(\mu_k, \eta) \equiv \Psi_k^t(\eta)$ ($k=1, 2, \dots, \infty$) are called *eigenfunctions*. Therefore we have one eigenvalue problem related to the equation of momentum and another to the equation of energy, which have the same form, differing only in the point of application of the second boundary condition.

We now consider the representation of the desired potentials $U(\xi, \eta) \in \Theta(\xi, \eta)$, in terms of the eigenfunctions $\Psi_k^d(\eta)$ and $\Psi_k^t(\eta)$, respectively, of the auxiliary problems over the region $[0, H]$ in the form

$$U(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathcal{X}(\xi) \Psi_k^d(\eta) \quad (9)$$

$$\Theta(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathcal{Z}(\xi) \Psi_k^t(\eta) \quad (10)$$

where

$$\Psi_k^d(\beta_k, \eta) = \sin(\beta_k \eta), \quad \beta_k = (2k+1) \frac{\pi}{2H_d}, \quad k=1, 2, \dots \quad (11)$$

$$\Psi_k^t(\mu_k, \eta) = \sin(\mu_k \eta), \quad \mu_k = (2k+1) \frac{\pi}{2H_t}, \quad k=1, 2, \dots \quad (12)$$

whose norms are $N_k^d = 0.5H_d$ and $N_k^t = 0.5H_t$, for every k , and the summations are taken over all discrete spectra of eigenvalues β_k and μ_k .

In order to determine the expansion coefficients, $\mathcal{X}(\xi)$ and $\mathcal{Z}(\xi)$, arising in Eqs. (9) and (10), we need to use the orthogonality property of the eigenfunctions involved, which corresponds to the finite integral transform pairs

$$U(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Psi_k^d(\eta)}{N_k^{d/2}} \bar{U}_k(\xi) \quad (13a)$$

$$\bar{U}_k(\xi) = \int_0^{H_d} \frac{\Psi_k^d(\eta)}{N_k^{d/2}} U(\xi, \eta) d\eta \quad (13b)$$

$$\Theta(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Psi_k^t(\eta)}{N_k^{t/2}} \bar{\Theta}_k(\xi) \quad (14a)$$

$$\bar{\Theta}_k(\xi) = \int_0^{H_t} \frac{\Psi_k^t(\eta)}{N_k^{t/2}} \Theta(\xi, \eta) d\eta \quad (14b)$$

Using Eq. (13a), we can transform the continuity equation, Eq. (1), to express the dimensionless normal velocity in the form

$$V(\xi, \eta) = - \sum_{k=1}^{\infty} f_k(\eta) \frac{d\bar{U}_k(\xi)}{d\xi} \quad (15)$$

where f is defined in the Appendix.

The integral transformation process, applied to the system stated by Eqs. (2) and (3), starts on expressing the non-linear terms using Eqs. (13a), (14a) and (15). Then the integral transformation of Eqs. (2) and (3) leads to the following infinite coupled system of non-linear ordinary differential equations

$$\sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} (A_{ijk}^d - F_{ikj}^d) \bar{U}_j \frac{d\bar{U}_k}{d\xi} = -V_s(\xi) \sum_{k=1}^{\infty} C_{ik}^d \bar{U}_k + g(\xi) P_i - \beta_i^2 \bar{U}_i, \quad i=1, 2, \dots \quad (16)$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} A_{ijk}^t \bar{U}_j \frac{d\bar{\Theta}_k}{d\xi} = -V_s(\xi) \sum_{k=1}^{\infty} C_{ik}^t \bar{\Theta}_k - \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} F_{ijk}^t \frac{d\bar{U}_j}{d\xi} \bar{\Theta}_k - \frac{\mu_i^2}{Pr} \bar{\Theta}_i, \quad i=1, 2, \dots \quad (17)$$

where $A^d, A^t, F^d, F^t, C^d, C^t$, and P are also defined in the Appendix.

The solution of the problem through numerical integration along the body's surface variable, ξ , is possible only after truncating the resulting infinite system of equations to a finite one, by choosing some value for the last eigenfunction used in the expansion, say N . Moreover, it can be seen that Eqs. (16) and (17) vanish identically at $\xi = 0$, that is, when $U = 0$, for every i . Clearly, the integration cannot be started at $\xi = 0$. In order to overcome this difficulty, Lage and Rangel (1994) have used the solution for the stagnation point flow to start the integration at some arbitrary value of ξ , greater than zero. The same procedure is used in the present work. Considering the ideal velocity distribution in potential irrotational flow past a circular cylinder

$$u_e(x) = 2u_{\infty} \sin\left(\frac{x}{R}\right) = 2u_{\infty} \sin \xi \quad (18)$$

the dimensionless free-stream velocity, the tangential velocity and the temperature fields, in the two-dimensional laminar boundary-layer, can be expressed in series expansions by using the

Blasius's method (Schlichting, 1979). The solution for the two-dimensional stagnation flow is given by the first term in each one of the series expansions, that is

$$U_e = 2\xi \quad (19)$$

$$U = 2\xi f_1' \quad (20)$$

$$\Theta = h_0 \quad (21)$$

Substituting these expressions into Eqs. (2) and (3), we obtain the following system of ordinary differential equations which determines the solution to the stagnation point flow

$$\frac{1}{2} f_1'' + f_1 f_1'' + 1 - f_1'^2 = 0 \quad (22)$$

$$\frac{1}{2 Pr} h_0'' + f_1 h_0' = 0 \quad (23)$$

with the following boundary conditions

$$\eta = 0: f_1 = 0, f_1' = 0, h_0 = 0 \quad (24)$$

$$\eta \rightarrow \infty: f_1' = 1, h_0 = 1,$$

where f_1 is the dimensionless stream function, h_0 is the dimensionless temperature field for the stagnation flow and the primes denote differentiation relative to η . In the numerical solution of Eqs. (22) and (23), the boundary conditions at infinity are also imposed at a finite value H , which was chosen as the largest value among H_d and H_t .

NUMERICAL PROCEDURE

For a chosen value for the Prandtl number, Eqs. (22) and (23) are solved by a finite-difference scheme, based on a non-uniform adaptive grid which is able to generate grid point values for any prescribed accuracy. This numerical solution, with the aid of Eqs. (20) and (21), generates the velocity and temperature profiles at a point close to $\xi = 0$ ($\xi = 0.01$ was usually adopted). A trapezoidal quadrature is then used to carry out the integration of Eqs. (13b) and (14b), to determine the transformed velocity and temperature components, \bar{U}_i and $\bar{\Theta}_i$, from their definitions. In order to calculate these components with good accuracy, there should be enough points per period of each one of the eigenfunctions. This guarantees the achievement of reliable initial values for these quantities. In the cases analyzed here, the number of grid points varied within the range 3000-15000, for required relative tolerances in the transformed components that vary from 10^{-4} ($Pr \leq 1$) to 10^{-6} ($Pr > 1$).

The coupled system of ordinary differential equations given by Eqs. (16) and (17), truncated to N terms in the summations, were treated as a differential algebraic system of equations and its numerical integration was accomplished using DAWRS (Differential-Algebraic Wave-Form Relaxation Solver) (Secchi et al., 1991). The numerical results obtained by using analytical (user supplied) and finite-difference approximation for the system Jacobian have been compared. Typically, the results for the transformed components were equal up to the fifth figure.

The integration of the system was performed up to the separation point, requiring a relative precision of 10^{-6} for the transformed components. Since the boundary-layer equations are not valid past the separation point, the integration was stopped

somewhere behind it. The value for the separation point was obtained by an extrapolation procedure over the values for the shear stress calculated in the last few steps of the integration. This procedure is different from the work of Lage and Rangel (1994) where the separation point was determined only after the solver fails to integrate to a chosen value of ξ . The introduction of this interpolation process was effective in reducing the execution time of each simulation, even for large N . Although the system could not be integrated past the separation point, it was possible to reach very exact values for the separation point. Indeed, the results obtained for the normal derivative of the dimensionless tangential velocity at the surface and at a point close to the separation point, were typically of the order of 10^{-1} and 10^{-2} .

The values chosen for H_d and H_t have been varied in accordance to those used in Lage's work until convergence has been achieved. In fact, from the physical interpretation of Pr , it follows that the value of Pr strongly influences the relative growth of the velocity and thermal boundary-layers. Moreover, for laminar boundary-layers, it is reasonable to expect the following relation between the velocity (δ) and the thermal (δ_t) boundary-layer thicknesses: $\delta/\delta_t = Pr^n$, where n is a positive exponent (Incropera and de Witt, 1990). When $\delta_t < \delta$, the exponent is approximately 1/3 (Schlichting, 1955). Thus, the relation $(H_d/H_t) = Pr^{1/3}$ has been used as a guideline to choose the values of H_d and H_t .

The global Nusselt numbers based on the cylinder diameter, Nu_D ($D=2R$), were calculated through numerical integration of the local values using the trapezoidal quadrature. About 200 points along ξ were necessary to obtain an accuracy of 1%. The values of H_d and H_t that lead to reliable results, as well as the values obtained for Nu_D/Re_D ($Re_D = 2 Re$), for several Prandtl numbers, are shown in Table 1.

RESULTS AND DISCUSSION

The numerical solution of the thermal boundary-layer equations for the flow past a cylinder have been carried out for several values of the Prandtl number from 0.5 to 10, and for various values of N . Some results for the velocity and temperature profiles and for the Nusselt number are given below.

Figures 1 and 2 show the convergence behavior of the dimensionless velocity profiles, $U(\eta)$, at $\xi = \pi/6$ and $\pi/2$, respectively, with increasing N values. Figures 3 and 4 show the convergence behavior of the dimensionless temperature profiles, $\Theta(\eta)$, at $\xi = \pi/6$ and $\pi/2$, respectively, for $Pr = 0.5$, whereas Figures 5 and 6 show the corresponding results for $Pr = 10$. Lage and Rangel (1994) observed that the series expansions of the dimensionless velocity profile for even and odd values of N converge to the exact solution from below and from above, respectively. From Figures 1 to 6, it can be seen that the same feature is valid for the velocity profile but is not observed for the temperature profile. However, we still continue to detect a

Table 1 - Values of H_d , H_t and Nu_D/Re_D for several Prandtl numbers

Pr	H_d	H_t	Nu_D/Re_D
0.5	8.0	11.6	0.334
0.7	8.0	9.0	0.379
1.0	8.0	8.0	0.434
5.0	8.0	4.7	0.776
10.0	8.0	3.7	0.985

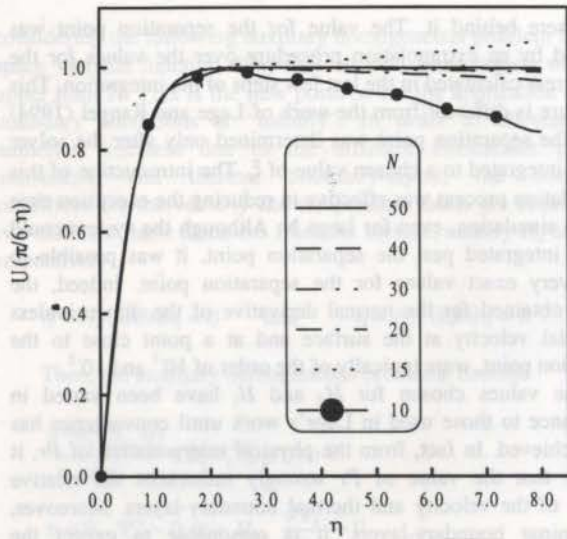


Figure 1. Dimensionless tangential velocity profile at $\xi = \pi/6$

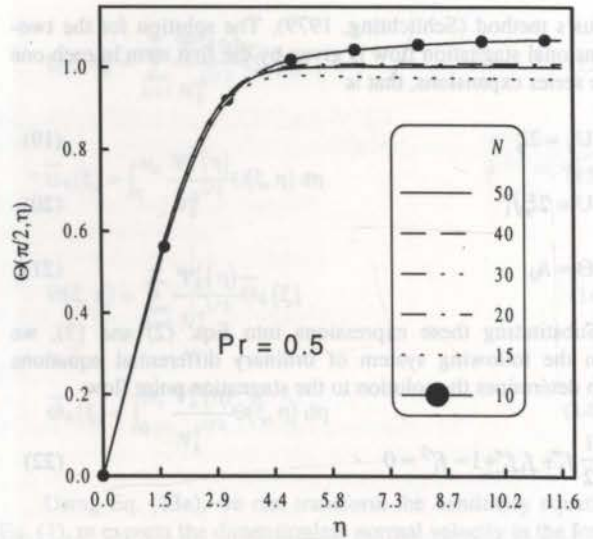


Figure 4. Dimensionless temperature profile at $\xi = \pi/2$

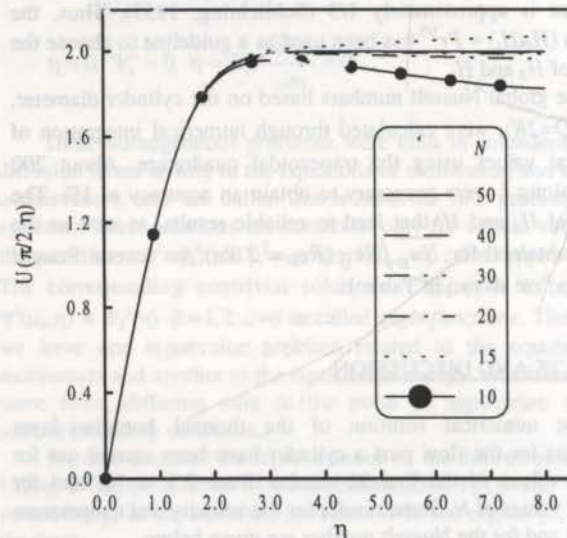


Figure 2. Dimensionless tangential velocity profile at $\xi = \pi/2$

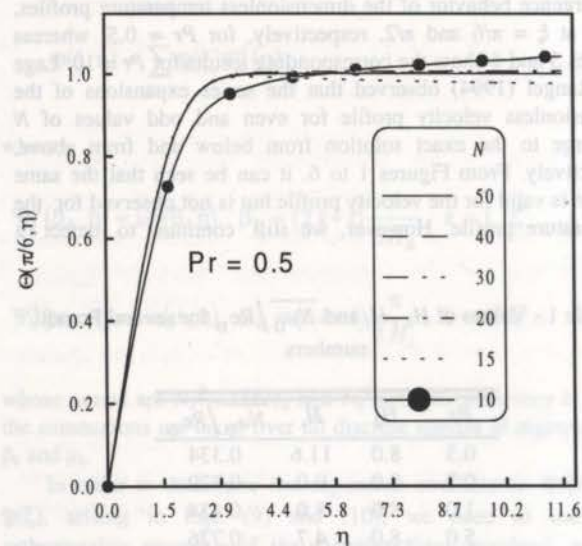


Figure 3. Dimensionless temperature profile at $\xi = \pi/6$

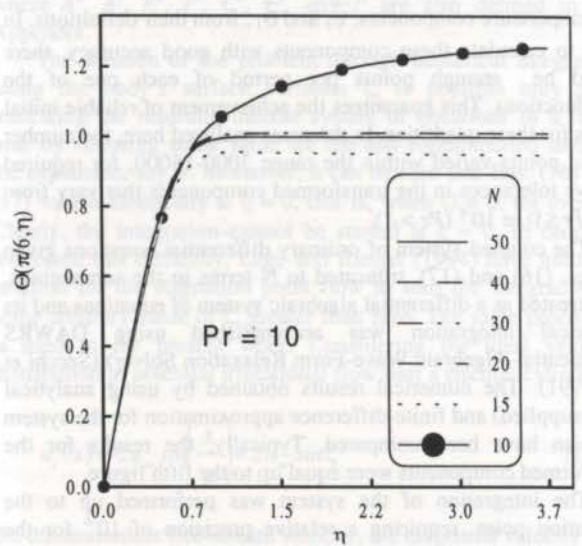


Figure 5. Dimensionless temperature profile at $\xi = \pi/6$

slightly better convergence behavior in the even- N series.

Tables 2 and 3 give the $U(\eta)$ and $\Theta(\eta)$ profiles for $Pr = 0.5$ at $\xi = \pi/2$, for several values of N , respectively. In terms of accuracy, the convergence pattern can be inferred by direct comparison of the U and Θ values at the outermost boundary against the ideal flow solution. This is possible because these values have not been imposed by the boundary conditions of the integral transform method. It must be observed that the solutions for low N -orders afford quite well representation of the profiles, and three correct figures are obtained for both profiles for values of N between 30 and 50.

As in Lage and Rangel (1994), the separation point is taken as being the one where the tangential velocity derivative at the surface reached a minimum value. The values predicted for the separation point converge to the final value of 104.7° very quickly (its value is 104.9° for $N=15$ and 104.7° for $N \geq 20$). Moreover, this converged value agrees remarkably well with the most accurate value obtained by finite-differences for the flow past a circular cylinder in potential flow (Schlichting, 1987), which is 104.5° .

The convergence of the local Nusselt number for $Pr = 0.7$,

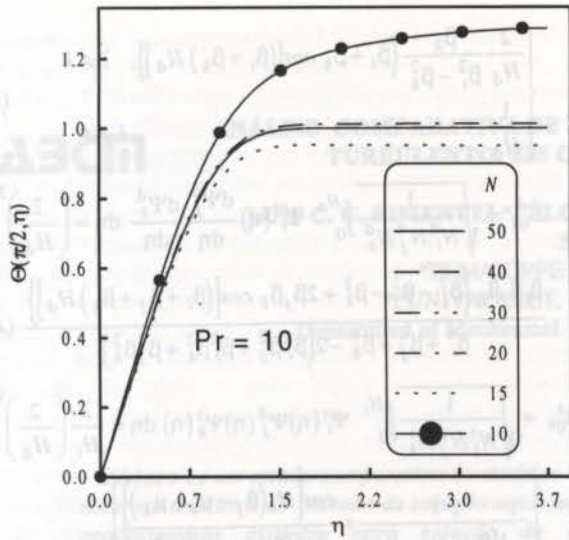


Figure 6. Dimensionless temperature profile at $\xi = \pi/2$

Table 2 - Dimensionless tangential velocity profiles at $\xi = \pi/2$ ($Pr = 0.5, H_d = H_t = 8.00$).

η	U					
	N					
	10	15	20	30	40	50
0.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.40	0.5433	0.5369	0.5336	0.5334	0.5335	0.5334
0.80	1.0333	1.0304	1.0260	1.0260	1.0261	1.0261
1.20	1.4245	1.4284	1.4223	1.4227	1.4230	1.4230
1.60	1.6937	1.7032	1.6959	1.6969	1.6973	1.6974
2.00	1.8496	1.8670	1.8576	1.8593	1.8599	1.8601
2.40	1.9244	1.9517	1.9394	1.9419	1.9427	1.9430
2.80	1.9528	1.9907	1.9743	1.9779	1.9789	1.9794
3.20	1.9579	2.0081	1.9863	1.9911	1.9925	1.9931
3.60	1.9515	2.0166	1.9887	1.9948	1.9967	1.9975
4.00	1.9403	2.0226	1.9876	1.9953	1.9976	1.9986
4.80	1.9148	2.0335	1.9826	1.9938	1.9972	1.9985
5.60	1.8855	2.0449	1.9770	1.9919	1.9963	1.9981
8.00	1.8252	2.0688	1.9658	1.9882	1.9948	1.9973

Table 3 - Dimensionless temperature profiles at $\xi = \pi/2$ ($Pr = 0.5, H_d = H_t = 8.00$).

η	Θ					
	N					
	10	15	20	30	40	50
0.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.40	0.1436	0.1487	0.1490	0.1489	0.1487	0.1486
0.80	0.2869	0.2974	0.2980	0.2977	0.2974	0.2972
1.20	0.4279	0.4431	0.4445	0.4441	0.4435	0.4433
1.60	0.5615	0.5799	0.5825	0.5819	0.5811	0.5808
2.00	0.6814	0.6999	0.7043	0.7035	0.7026	0.7021
2.40	0.7822	0.7973	0.8039	0.8029	0.8018	0.8013
2.80	0.8612	0.8697	0.8793	0.8779	0.8766	0.8761
3.20	0.9191	0.9191	0.9317	0.9299	0.9285	0.9279
3.60	0.9595	0.9497	0.9654	0.9631	0.9616	0.9610
4.00	0.9868	0.9669	0.9854	0.9827	0.9811	0.9804
4.80	1.0172	0.9788	1.0021	0.9987	0.9970	0.9963
6.40	1.0415	0.9778	1.0073	1.0029	1.0011	1.0004
8.00	1.0541	0.9749	1.0079	1.0030	1.0012	1.0004

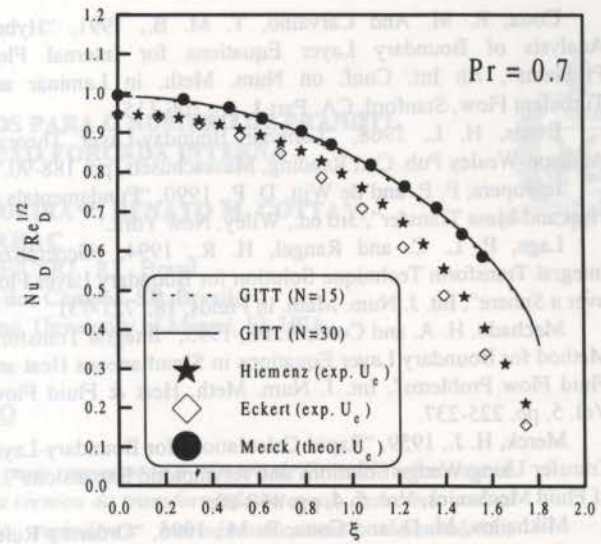


Figure 7. Local Nusselt number for $Pr = 0.7$.

based on the cylinder diameter, is shown by the results for $N = 15$ and 30 in Fig. 7. This figure also shows the results obtained by Merck (1958), using Meksyn's wedge method, with U_e according to the potential theory, as in our work. The results obtained from Frössling formula using the Eckert's and Hiemenz's experimental profiles for U_e (Evans, 1968) are also depicted in Fig. 7 for illustration. The agreement between our results and those obtained by Merck (1958) is very good.

The global Nusselt number obtained through numerical integration are shown in Table 1, which correlate according to $Nu_D = aRe_D^{0.5} Pr^b$, where $a = 0.43$ and $b = 0.36$. This correlation is similar to several others presented in the literature for the laminar thermal boundary-layer. For instance, Zhukauskas (1987) gives a correlation based on experimental data with $a = 0.52$ and $b = 0.37$ for $40 < Re_D < 10^3$. Our value for a is somewhat smaller due to the neglect of the heat transfer in the wake region.

CONCLUSIONS

The generalized integral transform technique has been applied to the solution of the thermal boundary-layer equations for flow past a circular cylinder. The condition at infinity was set to a finite but far enough distance from the surface. Moreover, by choosing different finite distances to impose the boundary conditions for the momentum and energy equations, it was possible to achieve accurate results for the temperature and velocity profiles, separation points and local Nusselt numbers.

Acknowledgments. Part of this work has been supported by the NACAD/COPPE through allocation of supercomputer resources. The *Mathematica* rules for the analytical integration of some coefficients were kindly provided by Prof. M. D. Mikhailov. One of the authors' (P. L. C. Lage) would like to acknowledge the financial support from CNPq, grant number 523777/94-9. This work was also supported by CAPES, CNPq and FINEP.

REFERENCES

Cotta, R. M., 1993, "Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow", CRC Press, Boca Raton, Florida.

Cotta, R. M. and Carvalho, T. M. B., 1991, "Hybrid Analysis of Boundary Layer Equations for Internal Flow Problems", 7th Int. Conf. on Num. Meth. in Laminar and Turbulent Flow, Stanford, CA, Part 1, pp. 106-115.

Evans, H. L., 1968, "Laminar Boundary-Layer Theory", Addison-Wesley Pub. Co., Reading, Massachusetts, pp. 188-90.

Incropera, F. P. and de Witt, D. P., 1990, "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", 3rd ed., Wiley, New York.

Lage, P. L. C. and Rangel, H. R., 1994, "Generalized Integral Transform Technique Solution for Boundary Layer Flow over a Sphere", Int. J. Num. Meth. in Fluids, 18, 721-731.

Machado, H. A. and Cotta, R. M., 1995, "Integral Transform Method for Boundary Layer Equations in Simultaneous Heat and Fluid Flow Problems", Int. J. Num. Meth. Heat & Fluid Flow, Vol. 5, pp. 225-237.

Merck, H. J., 1959, "Rapid Calculations for Boundary-Layer Transfer Using Wedge Solutions and Asymptotic Expansions", J. of Fluid Mechanics, Vol. 5, 4, pp. 460-80.

Mikhailov, M. D. and Cotta, R. M., 1996, "Ordering Rules for Double and Triple Eigenseries in the Solution of Multidimensional Heat and Fluid Flow Problems", Int. Comm. Heat & Mass Transfer, Chicago, Illinois, Vol. 23, 2, pp. 299-303.

Mikhailov, M. D. and Özişik, M. N., 1984, "Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion", John Wiley & Sons, New York.

Pérez Guerrero, J. S. and Cotta, R. M., 1992, "Integral Transform Method for Navier-Stokes Equations in Stream Function-Only Formulation", Int. J. Num. Meth. In Fluids, Vol. 5, pp. 399-409.

Secchi, A. R., Morari, M. and Bisciaia Jr., E. C., 1991, "DAWRS: a Differential-Algebraic System Solver by the Waveform Relaxation Method", Proc. AIChE Meeting, Los Angeles, CA.

Schlichting, H., 1979, "Boundary Layer Theory", 7th ed., McGraw-Hill, New York, chapters IX and XII.

Schlichting, H., 1955, "Boundary Layer Theory", McGraw-Hill, New York, pp. 263-279.

Zhukauskas, A., 1987, "Convective Heat Transfer in Cross Flow", in S. Kakaç, R. K. Shah and W. Aung, eds., Handbook of Single-Phase Convective Heat Transfer. John Wiley & Sons, New York.

APPENDIX

$$f_k = \frac{1}{N_k^{d/2}} \int_0^{\eta} \Psi_k^d(\eta) d\eta = \sqrt{\frac{2}{H_d}} \frac{1}{\beta_k} (1 - \cos \beta_k \eta) \quad (A1)$$

$$P_k = \frac{1}{N_k^{d/2}} \int_0^{H_d} \Psi_k^d(\eta) d\eta = \sqrt{\frac{2}{H_d}} \frac{1}{\beta_k} \quad (A2)$$

$$A_{ijk}^d = \sqrt{\frac{1}{N_i^d N_j^d N_k^d}} \int_0^{H_d} \Psi_i^d(\eta) \Psi_j^d(\eta) \Psi_k^d(\eta) d\eta = \left(\frac{2}{H_d}\right)^{3/2} \frac{-2\beta_i \beta_j \beta_k + \beta_i (\beta_j^2 - \beta_j^2 - \beta_k^2) \cos[(\beta_i + \beta_j + \beta_k) H_d]}{\beta_i^4 + \beta_j^4 + \beta_k^4 - 2(\beta_i^2 \beta_j^2 + \beta_i^2 \beta_k^2 + \beta_j^2 \beta_k^2)} \quad (A3)$$

$$F_{ijk}^d = \sqrt{\frac{1}{N_i^d N_j^d N_k^d}} \int_0^{H_d} \Psi_i^d(\eta) f_j(\eta) \frac{d\Psi_k^d}{d\eta} d\eta = \sqrt{\frac{2}{H_d}} \frac{1}{\beta_j} C_{ik}^d - \frac{1}{\beta_j^2} E_{ijk}^d \quad (A4)$$

$$C_{ik}^d = \sqrt{\frac{1}{N_i^d N_k^d}} \int_0^{H_d} \Psi_i^d(\eta) \frac{d\Psi_k^d}{d\eta} d\eta =$$

$$\begin{cases} \frac{2}{H_d} \frac{\beta_k}{\beta_i^2 - \beta_k^2} \{ \beta_i + \beta_k \cos[(\beta_i + \beta_k) H_d] \}, & i \neq k \\ \frac{1}{H_d}, & i = k \end{cases} \quad (A5)$$

$$E_{ijk}^d = \sqrt{\frac{1}{N_i^d N_j^d N_k^d}} \int_0^{H_d} \Psi_i^d(\eta) \frac{d\Psi_j^d}{d\eta} \frac{d\Psi_k^d}{d\eta} d\eta = \left(\frac{2}{H_d}\right)^{3/2} \frac{\beta_i \beta_j \beta_k \{ \beta_i^2 - \beta_j^2 - \beta_k^2 + 2\beta_j \beta_k \cos[(\beta_i + \beta_j + \beta_k) H_d] \}}{\beta_i^4 + \beta_j^4 + \beta_k^4 - 2(\beta_i^2 \beta_j^2 + \beta_i^2 \beta_k^2 + \beta_j^2 \beta_k^2)} \quad (A6)$$

$$A_{ijk}^t = \sqrt{\frac{1}{N_i^t N_j^t N_k^t}} \int_0^{H_t} \Psi_i^t(\eta) \Psi_j^t(\eta) \Psi_k^t(\eta) d\eta = \frac{2}{H_t} \left(\frac{2}{H_d}\right)^{1/2} \left\{ \begin{aligned} & \frac{1}{4(\beta_j - \mu_i - \mu_k)} + \frac{\cos[H_t(\beta_j - \mu_i - \mu_k)]}{4(\beta_j - \mu_i - \mu_k)} \\ & + \frac{1}{4(\beta_j + \mu_i - \mu_k)} - \frac{\cos[H_t(\beta_j + \mu_i - \mu_k)]}{4(\beta_j + \mu_i - \mu_k)} \\ & + \frac{1}{4(\beta_j - \mu_i + \mu_k)} - \frac{\cos[H_t(\beta_j - \mu_i + \mu_k)]}{4(\beta_j - \mu_i + \mu_k)} \\ & - \frac{1}{4(\beta_j + \mu_i + \mu_k)} + \frac{\cos[H_t(\beta_j + \mu_i + \mu_k)]}{4(\beta_j + \mu_i + \mu_k)} \end{aligned} \right\} \quad (A7)$$

$$F_{ijk}^t = \sqrt{\frac{1}{N_i^t N_k^t}} \int_0^{H_t} \Psi_i^t(\eta) f_j(\eta) \frac{d\Psi_k^t}{d\eta} d\eta = \sqrt{\frac{2}{H_d}} \frac{1}{\beta_j} C_{ik}^t - \frac{1}{\beta_j^2} E_{ijk}^t \quad (A8)$$

$$C_{ik}^t = \sqrt{\frac{1}{N_i^t N_k^t}} \int_0^{H_t} \Psi_i^t(\eta) \frac{d\Psi_k^t}{d\eta} d\eta = \begin{cases} \frac{2}{H_t} \frac{\mu_k}{\mu_i^2 - \mu_k^2} \{ \mu_i + \mu_k \cos[(\mu_i + \mu_k) H_t] \}, & i \neq k \\ \frac{1}{H_t}, & i = k \end{cases} \quad (A9)$$

$$E_{ijk}^t = \sqrt{\frac{1}{N_i^t N_j^t N_k^t}} \int_0^{H_t} \Psi_i^t(\eta) \Psi_j^t(\eta) \frac{d\Psi_k^t}{d\eta} d\eta = \frac{2}{H_t} \left(\frac{2}{H_d}\right)^{1/2} \left\{ \begin{aligned} & \frac{1}{4(\beta_j - \mu_i - \mu_k)} + \frac{\cos[H_t(\beta_j - \mu_i - \mu_k)]}{4(\beta_j - \mu_i - \mu_k)} \\ & + \frac{1}{4(\beta_j + \mu_i - \mu_k)} - \frac{\cos[H_t(\beta_j + \mu_i - \mu_k)]}{4(\beta_j + \mu_i - \mu_k)} \\ & + \frac{1}{4(\beta_j - \mu_i + \mu_k)} - \frac{\cos[H_t(\beta_j - \mu_i + \mu_k)]}{4(\beta_j - \mu_i + \mu_k)} \\ & - \frac{1}{4(\beta_j + \mu_i + \mu_k)} + \frac{\cos[H_t(\beta_j + \mu_i + \mu_k)]}{4(\beta_j + \mu_i + \mu_k)} \end{aligned} \right\} \quad (A10)$$



ANÁLISE COMPARATIVA DE MODELOS PARA O NÚMERO DE PRANDTL TURBULENTO EM CONVECÇÃO FORÇADA INTERNA

LUÍS C. G. PIMENTEL*, ÉLCIO NOGUEIRA, RENATO M. COTTA*, SADIK KAKAÇ**

*PEM/COPPE - DEM/EE/UFRJ, RJ, Brasil

**UNIVAP/ICET, São José dos Campos, SP, Brasil

Department of Mechanical Engineering, University of Miami, Fl, USA



RESUMO

Efetuu-se um estudo comparativo de modelos utilizados para representar o número de Prandtl turbulento. A natureza analítica do método de solução aqui empregado, a técnica da transformada integral, associada a dois procedimentos distintos para solução do escoamento turbulento hidrodinamicamente desenvolvido, possibilitaram isolar o número de Prandtl turbulento como principal fonte de desvios observados no número de Nusselt, avaliado teórica e experimentalmente. O estudo permitiu estabelecer, dentro de um critério de erro compatível com o apresentado pelas correlações, os modelos que apresentam um melhor desempenho nas simulações para vários fluidos de interesse em engenharia.

INTRODUÇÃO

O estudo teórico dos mecanismos de transferência de calor, com modelo de turbulência baseado no conceito de viscosidade turbulenta, está intimamente ligado à disponibilidade de modelos realísticos para o número de Prandtl turbulento (Pr_t). Apesar dos recentes avanços na simulação numérica direta de escoamentos turbulentos tenderem a tornar o conceito obsoleto num futuro não muito distante, nos dias atuais inúmeros problemas de interesse em engenharia carecem de soluções de baixo custo computacional, que os novos procedimentos ainda não oferecem (Kays, 1994).

Na minuciosa revisão de modelos de Pr_t aplicáveis a fluidos de interesse na área de engenharia, Reynolds (1975) apresentou e discutiu algumas inconsistências entre os vários modelos até então disponíveis na literatura, principalmente para a região próxima à parede do duto, onde as medidas experimentais e os resultados de simulação numérica direta apresentam grandes discrepâncias (Kays, 1994).

Jischa e Rieke (1979) estabeleceram algumas características importantes para o número de Prandtl turbulento. Segundo os autores, para número de Prandtl molecular (Pr) muito menor que a unidade (metais líquidos), o Pr_t é muito dependente do número de Reynolds e do Prandtl molecular e assume valores maiores que a unidade. Por outro lado, em $Pr > 1$, o Pr_t assume valores menores que a unidade e parece apresentar grande variação na direção normal ao escoamento principal.

No presente estudo utilizou-se a técnica da transformada integral como método de solução da equação de energia para convecção forçada interna em dutos de seção circular, na região de entrada térmica, associado a dois procedimentos distintos utilizados para solução do campo de velocidade (Nogueira, 1993; Pimentel e Cotta, 1993). A natureza analítica do método, e o sucesso anterior na utilização desses modelos de viscosidade turbulenta, permitiram isolar o número de Prandtl turbulento como principal fonte dos desvios observados entre o número de Nusselt teórico e o proveniente de correlações empíricas bem estabelecidas. Assim, foi possível, em um primeiro momento, estabelecer, dentro de um critério de erro compatível com o apresentado pelas correlações, os modelos que apresentam uma melhor performance em cada faixa do número de Prandtl molecular. Efetuou-se, portanto, uma análise da região de entrada

térmica para metais líquidos, gases e óleos; o efeito do número de Reynolds e das condições de contorno sobre o número de Prandtl turbulento também foi considerado na análise. Com base nos resultados provenientes do estudo efetuado, foram detectadas as características necessárias aos modelos de Pr_t para que possam representar adequadamente os mecanismos de transferência de calor.

ANÁLISE TEÓRICA

O problema de convecção forçada interna em dutos de seção circular, na região de entrada térmica, é representado na forma adimensional pela equação de energia (Nogueira, 1993):

$$\left(\frac{1}{r}\right)^2 C R U(R) \frac{\partial \theta(R, Z)}{\partial Z} = \frac{\partial}{\partial R} \left[R E_h [R, U(R)] \frac{\partial \theta(R, Z)}{\partial R} \right]$$

$$0 \leq R \leq 1, \quad Z > 0 \tag{1a}$$

com as seguintes condições de entrada e de contorno

$$\theta(R, 0) = F(R), \quad 0 \leq R \leq 1 \tag{1b}$$

$$\frac{\partial \theta(0, Z)}{\partial R} = 0, \quad Z > 0 \tag{1c}$$

$$\alpha^* I_0 \left[\theta(R, Z) + \frac{T^*}{\Delta T} \right] + \beta^* E_h [R, U(R)] \frac{\partial \theta(R, Z)}{\partial R} = \Phi(Z),$$

$$R = 1; \quad Z > 0 \tag{1d}$$

onde

$$E_h [R, U(R)] = 1 + \frac{Pr \epsilon_m [R, U(R)]}{Pr_t \nu} \tag{2.a}$$

$$Z = \frac{\alpha z}{u_l^2}, \quad \theta(R, Z) = \frac{T(r, z) - T^*}{\Delta T} \quad (2. b - c)$$

$$F(R) = \frac{f_0(r) - T^*}{\Delta T} \quad (2. d)$$

e

$$R = \frac{r}{r_w}, \quad l_0 = r_w, \quad l_n = 2r_w \quad (2. f - h)$$

Para temperatura prescrita na parede tem-se que:

$$T^* = T_w(z), \quad \Delta T = f_0(0) - T^* \quad (3. a - b)$$

e para fluxo prescrito tem-se que:

$$T^* = f_0(0), \quad \Delta T = \frac{\phi(z)l_n}{k} \quad (3. c - d)$$

$U(R)$ e $\theta(R, Z)$ representam os campos adimensionais de velocidade e temperatura, respectivamente. Os parâmetros α^* e β^* possibilitam a simulação da condição na parede do tubo (para $\alpha^* = 1$ e $\beta^* = 0$, tem-se condição de temperatura prescrita, e para $\alpha^* = 0$ e $\beta^* = 1$, tem-se fluxo prescrito). O raio do tubo corresponde a r_w , e $C=2.0$ para todas as condições analisadas neste trabalho.

A solução do problema (1) acima depende da solução do problema hidrodinâmico, representado através das grandezas $U(R)$ e $\varepsilon_m[R, u(R)]/\nu$, e de um modelo adequado para o número de Prandtl turbulento (Pr_t). Se assumirmos que a solução do campo de velocidade é conhecida e satisfatória, o único parâmetro desconhecido para a solução do problema em questão é o número de Prandtl turbulento. Assim, uma escolha adequada para o Pr_t possibilitará a solução do campo térmico. Neste trabalho emprega-se os perfis de velocidade como calculado por Nogueira (1993) e Pimentel e Cotta (1993), e determina-se o campo de temperatura através da aplicação da técnica da transformada integral (Cotta, 1993). Vários modelos para o número de Prandtl turbulento foram considerados para essa análise comparativa.

A determinação do campo térmico possibilita a obtenção do coeficiente de transferência de calor, ou o seu número adimensional equivalente (número de Nusselt), ou seja (Nogueira, 1993):

$$Nu(Z) = \frac{h(z)l_n}{k} = \left(\frac{l_n}{l_0} \right) \frac{\phi(Z)}{\theta(l, Z) - \theta(Z)} \quad (4)$$

Foram consideradas, para comparações com o número de Nusselt teórico acima, diversas correlações empíricas obtidas da literatura.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os diferentes comportamentos do número de Prandtl turbulento (Pr_t), como sugerido por Jischa and Rieke (1979), motivou o estudo dos modelos de Pr_t para cada faixa do número de Prandtl molecular (Pr).

Um cuidadoso estudo teórico-experimental foi desenvolvido por Lawn (1977) sobre metais líquidos ($Pr \ll 1$). Reynolds (1975) apresentou uma lista de modelos para Prandtl turbulento que supostamente são aplicáveis a esta classe de fluidos.

As figuras (1) e (2) apresentam uma comparação entre o número de Nusselt calculado através da utilização de diferentes modelos para Pr_t e o proveniente da utilização da correlação empírica de Notter e Sleicher (1972), para as situações de temperatura e fluxo de calor prescritos na parede do tubo, respectivamente. Observa-se, nestes casos, que os modelos de Pr_t analisados apresentam grande discrepância na região próxima a parede. No entanto, o número de Nusselt teórico, principalmente para número de Reynolds inferiores a 10^5 ($Re_d < 10^5$), não são afetados drasticamente por essas diferenças. De fato, o modelo sugerido por Reynolds (1975), para a região próxima ao centro do duto, apresentou o melhor desempenho em toda a faixa do número de Reynolds analisado. O modelo de Reynolds apresentou maiores desvios no número de Nusselt para números de Reynolds elevados, ou seja, em $10^5 < Re_d < 10^6$ (8% - 11%), em relação à faixa $10^4 < Re_d < 10^5$ (1% - 5%). Constatamos, portanto, que o sucesso do modelo de Reynolds (1975) e os bons resultados encontrados através da utilização dos modelos de Kays (1994) e Na e Habib (1973) em baixos números de Reynolds, sugerem, como observado por Kader (1981), que a correta determinação do coeficiente de transferência de calor, em metais líquidos, não é afetada pelo processo de difusão turbulenta próximo a parede do duto. Nesta região o transporte molecular de energia suplanta o transporte difusivo turbulento, principalmente em baixos valores para o número de Reynolds. De acordo com Kader (1981), somente na região definida por $Y^+ > 2/Pr$ o transporte difusivo turbulento participa no mecanismo global de transporte de energia.

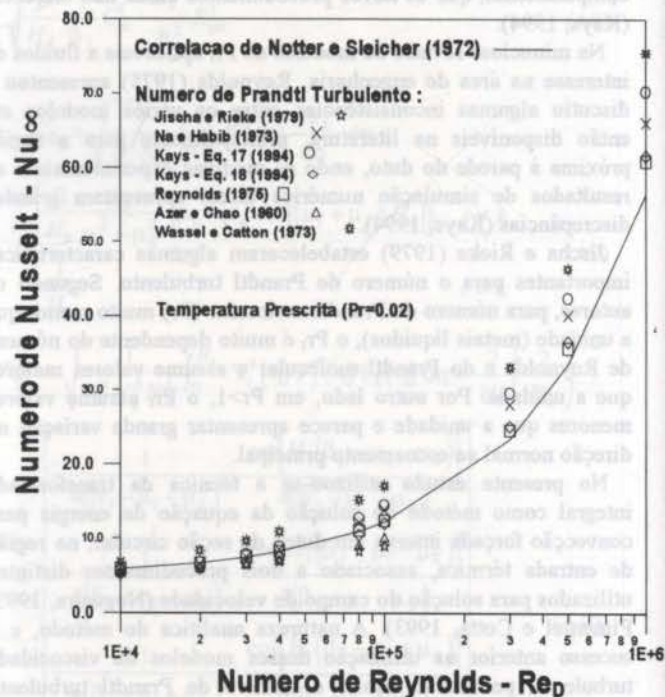


Figura 1 - Nusselt Infinito para Temperatura de Parede Uniforme ($Pr=0.02$)

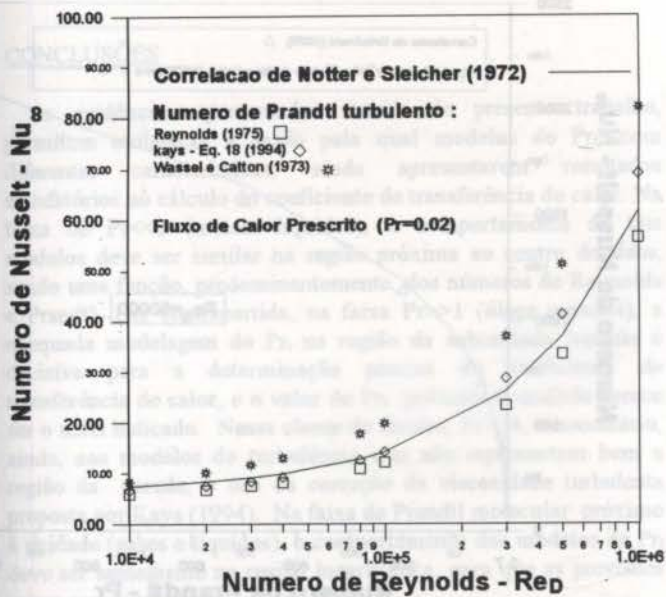


Figura 2 - Nusselt Infinito para Fluxo de Calor Uniforme na Parede do Tubo ($Pr=0.02$)

Os resultados apresentados através das figuras (3) e (4) confirmam a boa performance do modelo de Reynolds (1975), ao serem utilizados procedimentos distintos daquele para a determinação do campo hidrodinâmico (Pimentel e Cotta, 1993; Nogueira, 1993). Os maiores desvios observados para o número de Nusselt teórico local, em relação à correlação proposta por Das et al. (1995), ocorre em $z/D = 1$, com diferenças percentuais da ordem de 7% para a condição de temperatura prescrita na parede e 10% para a condição de fluxo de calor prescrita na parede.

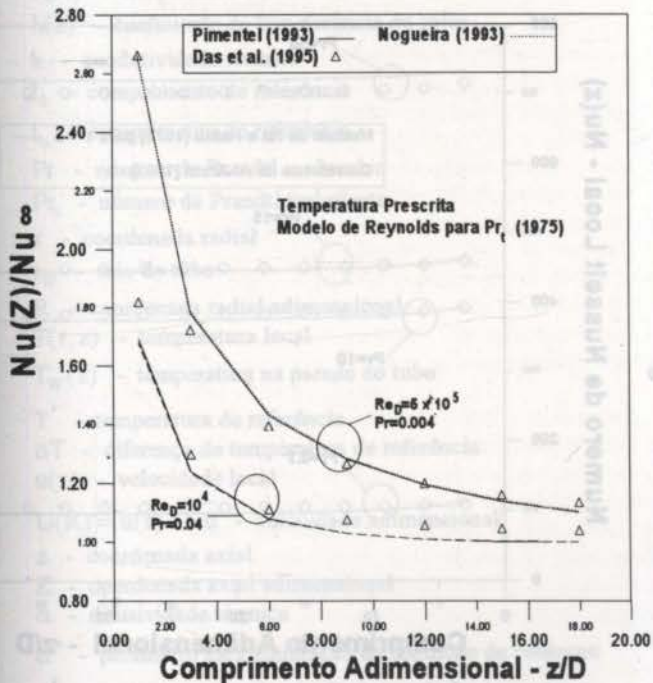


Figura 3 - Nusselt Local para Temperatura Uniforme na Parede do Tubo ($Pr=0.004$ e $Pr=0.04$)

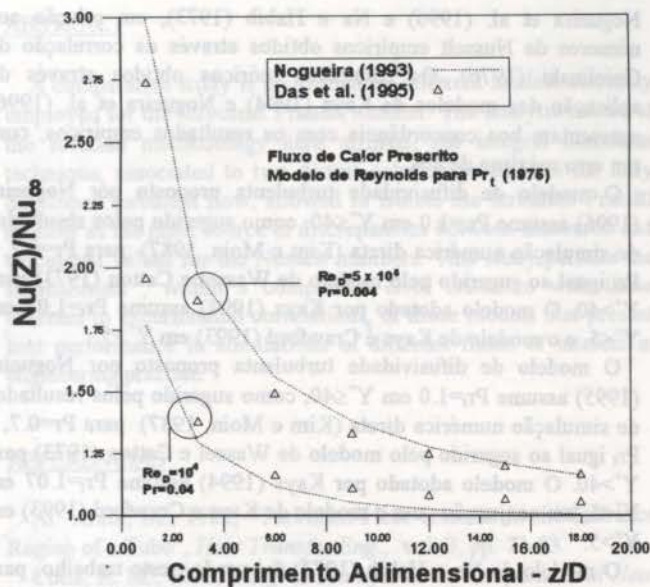


Figura 4 - Nusselt Local para Fluxo de Calor Uniforme na Parede do Tubo ($Pr=0.004$ e $Pr=0.04$)

Como sugerem Youssef et al. (1992), a influência das condições de contorno sobre a parcela do fluxo de calor devido à difusividade turbulenta, e conseqüentemente sobre o Pr_t , parece ser notório próximo à superfície sólida; no entanto, como discutido anteriormente, nessa região o transporte molecular de energia suplanta o transporte difusivo turbulento. Assim, nessa classe de fluidos, uma correção no Pr_t devido as condições de contorno não levaria a uma apreciável modificação do coeficiente de transferência de calor.

Segundo Kader e Yaglon (1972), a espessura da subcamada condutiva para $Pr \approx 1$ pode ser estabelecida por:

$$Y_1^+ \approx 10/Pr^{1/3}, \text{ para } Pr \approx 1 \quad (5)$$

Para valores mais elevados do número de Prandtl, Kader (1981) recomenda a seguinte expressão para a determinação da espessura da subcamada condutiva:

$$Y_1^+ \approx 12/Pr^{1/3}, \text{ para } 500 \leq Pr \leq 40 \times 10^3 \quad (6)$$

As relações apresentadas acima demonstram que para fluidos com número de Prandtl próximo da unidade ($Pr \approx 1$), a determinação precisa da variação do Pr_t na região logarítmica é vital para determinação correta dos parâmetros relacionados à transferência de calor. Para números de Prandtl elevados ($Pr \gg 1$), quando a subcamada condutiva está imersa na subcamada viscosa, a determinação precisa do comportamento do Pr_t na região $Y^+ < 5$ é decisiva para a correta determinação do número de Nusselt.

Os trabalhos de Laufer (1954) e Klebanoff (1965) sobre a estrutura do escoamento turbulento, e os bons resultados obtidos por Kays (1994) para o número de Nusselt em $Pr \gg 1$, sugerem que a variação da viscosidade turbulenta na região $Y^+ < 5$ deve ser estabelecida por:

$$(\varepsilon_m/\nu) = 10^{-3} Y^+ \quad (7)$$

em oposição à variação $Y^+{}^4$, sugerida pelo fator de amortecimento ("damping") de Van Driest. Assim, na Figura 5, são apresentados os números de Nusselt teóricos calculados com a Eq. (7) para $Y^+ < 5$, segundo os modelos de Pr_t utilizados nos trabalhos de

Nogueira et al. (1996) e Na e Habib (1973), em relação aos números de Nusselt empíricos obtidos através da correlação de Gnielinski (1976). Os resultados teóricos obtidos através da aplicação dos modelos de Kays (1994) e Nogueira et al. (1996) apresentam boa concordância com os resultados empíricos, com um erro máximo de 4%.

O modelo de difusividade turbulenta proposto por Nogueira (1996) assume $Pr_t=1.0$ em $Y^+ \leq 40$, como sugerido pelos resultados de simulação numérica direta (Kim e Moin, 1987) para $Pr=0.7$, e Pr_t igual ao sugerido pelo modelo de Wassel e Catton (1973) para $Y^+ > 40$. O modelo adotado por Kays (1994) assume $Pr_t=1.07$ em $Y^+ < 5$, e o modelo de Kays e Crawford (1993) em $Y^+ > 5$.

O modelo de difusividade turbulenta proposto por Nogueira (1995) assume $Pr_t=1.0$ em $Y^+ \leq 40$, como sugerido pelos resultados de simulação numérica direta (Kim e Moin, 1987) para $Pr=0.7$, e Pr_t igual ao sugerido pelo modelo de Wassel e Catton (1973) para $Y^+ > 40$. O modelo adotado por Kays (1994) assume $Pr_t=1.07$ em $Y^+ < 5$, em conjunção com o modelo de Kays e Crawford (1993) em $Y^+ > 5$.

O modelo de Na e Habib (1973) foi usado neste trabalho, para análise, além da faixa de valores de Pr sugerida pelos autores, a partir de ajustes com resultados experimentais ($Pr < 15$). Apesar disso o modelo apresentou resultados satisfatórios em $Pr < 100$, sugerindo que o uso da correção na parede ($Pr_t \approx 1$), imposta por Nogueira et al. (1996) e Kays (1994), pode estender a faixa de validade do modelo de Na e Habib (1973) a valores mais elevados ao número de Prandtl ($Pr > 15$).

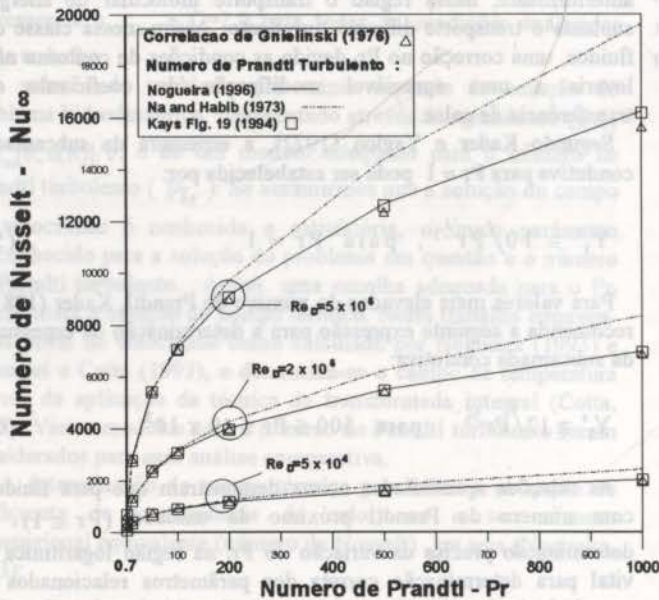


Figura 5 - Nusselt Infinito x Número de Prandtl

As Figuras 6 e 7 mostram, respectivamente, os resultados do número de Nusselt assintótico (Nu_∞) em $0.7 < Pr < 1000$ e uma análise da região de entrada térmica para $0.7 < Pr < 50$. Para estas situações, o modelo proposto por Na e Habib (1973) foi alterado para $Pr_t = 1,07$ em $Y^+ < 5$. As comparações efetuadas através das correlações empíricas para o número de Nusselt local (Al-Arabi, 1982) e o número de Nusselt assintótico (Gnielinski, 1976) confirmam a validade da correção para Pr_t para a região da parede.

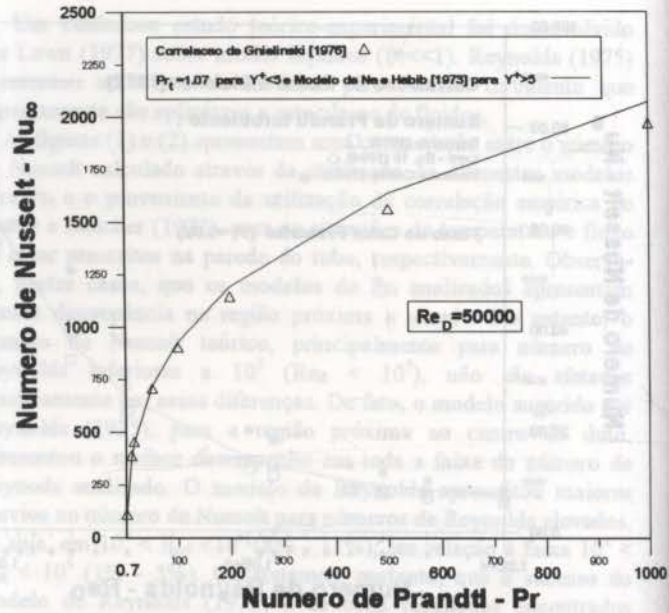


Figura 6 - Nusselt Infinito x Número de Prandtl Calculado pela Correlação de Na e Habib (1973) Modificada

A comprovação de que o modelo de Na e Habib (1973), com a alteração de $Pr_t=1.07$ para $Y^+ < 5$, representa satisfatoriamente a transferência de calor para $Pr > 15$, é bastante atraente, uma vez que o modelo apresentou bons resultados para metais líquidos, gases e líquidos (Figuras 1-5). Entretanto, como já se demonstrou, a alteração do modelo próximo à parede não afeta os resultados obtidos para número de $Pr < 15$, uma vez que a difusividade turbulenta próxima à parede ($Y^+ < 5$) não afeta marcadamente o mecanismo de transferência de calor para estes fluidos.

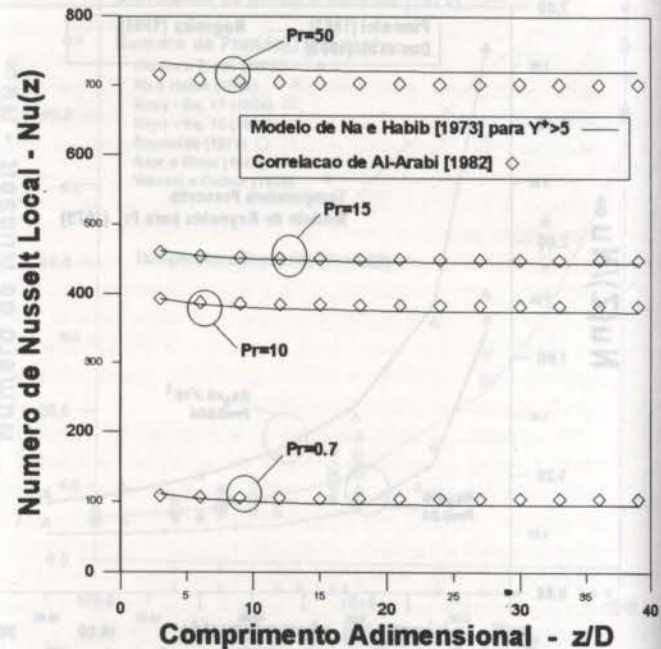


Figura 7 - Número Nusselt Local Calculado pela Correlação de Na e Habib (1973) Modificada

CONCLUSÕES

As evidências apresentadas através do presente trabalho, permitem esclarecer a razão pela qual modelos de Pr_t , com diferentes características, ainda apresentem resultados satisfatórios no cálculo do coeficiente de transferência de calor. Na faixa de $Pr \ll 1$ (metais líquidos), o comportamento da tais modelos deve ser similar na região próxima ao centro do duto, sendo uma função, predominantemente, dos números de Reynolds e Prandtl. Em contrapartida, na faixa $Pr \gg 1$ (óleos pesados), a adequada modelagem do Pr_t na região da subcamada laminar é decisiva para a determinação precisa do coeficiente de transferência de calor, e o valor de Pr_t próximo à unidade parece ser o mais indicado. Nessa classe de fluidos, $Pr \gg 1$, é necessário, ainda, aos modelos de turbulência que não representem bem a região da parede, o uso da correção da viscosidade turbulenta proposta por Kays (1994). Na faixa de Prandtl molecular próximo à unidade (gases e líquidos), o comportamento dos modelos de Pr_t deve ser semelhante na região logarítmica, para que as previsões sejam aproximadamente as mesmas.

Os resultados apresentados sugerem que o modelo de Na e Habib (1973), modificado na região $Y^+ < 5$ pelo valor de $Pr_t = 1$, associado aos procedimentos apresentados por Nogueira et al. (1996) e Pimentel e Cotta (1993), para o cálculo do perfil de velocidade, e a modificação da viscosidade turbulenta proposta por Kays (1994), possibilita a determinação do coeficiente de transferência de calor em toda faixa de valores do número de Prandtl molecular, com razoável precisão.

NOMENCLATURA

- $f_0(r)$ - temperatura de entrada
- $F(R)$ - temperatura de entrada adimensional
- $h(z)$ - coeficiente de transferência de calor
- k - condutividade térmica
- l_0 - comprimento de referência
- l_n - comprimento de referência
- Pr - número de Prandtl molecular
- Pr_t - número de Prandtl turbulento
- r - coordenada radial
- r_w - raio do tubo
- R - coordenada radial adimensional
- $T(r, z)$ - temperatura local
- $T_w(z)$ - temperatura na parede do tubo
- T^* - temperatura de referência
- ΔT - diferença de temperatura de referência
- $u(r)$ - velocidade local
- $U(R) = u(r) / Cu$ - velocidade adimensional
- z - coordenada axial
- Z - coordenada axial adimensional
- α - difusividade térmica
- α^* - parâmetro para simulação da condição de contorno
- β^* - parâmetro para simulação da condição de contorno
- $\theta(R, Z)$ - temperatura adimensional
- $\phi(z)$ - fluxo de calor na parede do tubo

ABSTRACT

A comparative study is performed on different models currently employed for the turbulent Prandtl number. The analytic nature of the solution methodology here utilized, the integral transform technique, associated to two distinct solution procedures for fully developed turbulent flow, allowed to isolate the turbulent Prandtl number as the main source of discrepancies between measured and calculated values for the Nusselt numbers. This study permits the establishment, within a compatible error criterium with those inherent to experimental correlations, of those models that present best performance in simulations of different fluids of interest in engineering practice.

REFERÊNCIAS

- Al Arabi, M., 1982, "Turbulent Heat Transfer in the Entrance Region of a Tube", *Heat Transfer Eng.*, vol. 3, pp. 73-83.
- Cotta, R. M., 1993, *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*, CRC Press, Boca Raton, FL.
- Das, S. K., Spang, B. and Roentzel, W., 1995, "Flow Length Effect in Heat Exchangers with Turbulent Flow at Low Prandtl Number", *Int. Comm. Heat & Mass Transfer*, vol. 22, pp. 671-681.
- Ficonenko, G. K., 1954, "Hydraulic Resistance in Pipes", *Teploenergetika*, vol. 1, pp. 40-44.
- Gnielinski, V., 1976, "New Equation for Heat and Mass Transfer in Turbulent Pipe and Channel Flow", *Int. Chem. Eng.*, vol. 16, pp. 359-368.
- Jischa, M. and Rieke, H. B., 1979, "About the Prediction of Turbulent Prandtl and Schmidt Number from Modeled Transport Equations", *Int. J. Heat & Mass Transfer*, vol. 22, pp. 1547-1555.
- Kader, B. A., 1977, "Turbulent Heat and Mass Transfer at $Pr \gg 1$ and Laws of Turbulent Diffusion Decay at Solid Wall", *Izv. Akad. Nauk SSSR, Mech. Zhid. Gaza, Noz*, pp. 172-175.
- Kader, B. A., 1981, "Temperature and Concentration Profiles in Fully Turbulent Boundary Layers", *Int. J. Heat & Mass Transfer*, vol. 24, pp. 1541-1544.
- Kader, B. A. and Yaglon, A. M., 1972, "Heat and Mass Transfer Laws for Fully Turbulent Wall Flows", *Int. J. Heat & Mass Transfer*, vol. 15, pp. 2329-2351.
- Kays, M. W., 1994, "Turbulent Prandtl Number - Where are we?", *J. Heat Transfer*, vol. 16, pp. 284-295.
- Kays, M. W., and Crawford, M. E., 1993, *Convective Heat and Mass Transfer*, Third Edition, McGraw-Hill, New York.
- Kim, J. and Moin, P., 1987, "Transport of Passive Scalars in a Turbulent Channel Flow", *Proce. of the Sixth International Symposium on Turbulent Shear Flows*, Toulouse, France, pp. 85-96.
- Klebanoff, P. S., 1965, "Characteristics of Turbulence in a Boundary Layer with Zero Pressure Gradient", *NACA Rep. n° 1247*.
- Laufer, J., 1954, "The Structure of Turbulence in Fully Developed Pipe Flow", *NACA Rep. n° 1174*.
- Lawn, C. J., 1977, "Turbulent Temperature Fluctuations in Liquid Metals", *Int. J. Heat & Mass Transfer*, vol. 20, pp. 1035-1044.
- Na and Habib, 1973, "Heat Transfer in Turbulent Pipe Flow Based on a New Mixing Length Model", *Appl. Scient Research*, vol. 28, pp. 302-314.
- Nogueira, E., 1993, "Solução Analítica para Escoamento e Transferência de Calor em Regime Bifásico Anular Vertical", Tese de Doutorado, PEM/COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.



TRANSFERÊNCIA DE CALOR E MASSA NO RESFRIAMENTO DE UMA SUPERFÍCIE VERTICAL ATRAVÉS DA EVAPORAÇÃO DE UM FILME LÍQUIDO ESCOANDO EM PARALELO COM AR



Maria Regina da Silva Galetti

Coordenação de Reatores

Comissão Nacional de Energia Nuclear, Rio de Janeiro, RJ

Pedro Carajilescov

Departamento de Engenharia Mecânica

Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ

SUMÁRIO

O presente trabalho consiste na análise numérica da transferência de calor e massa que ocorre na interface entre um filme líquido e uma mistura ar-vapor, escoando em um canal formado por duas placas planas verticais paralelas, uma aquecida e a outra isolada termicamente, onde, sobre a placa aquecida escoam laminarmente um filme líquido de água, com evaporação, na presença de ar escoando por convecção forçada laminar co-corrente. São apresentados resultados para os números de Nusselt devido à troca de calor sensível e latente e para o número de Sherwood observados na interface das fases.

INTRODUÇÃO

O processo de transferência conjunta de calor e massa, em um filme líquido escoando, aquecendo e evaporando, juntamente com um escoamento de uma mistura ar-vapor, representa um mecanismo eficiente de remoção de calor, o qual vem sendo considerado para a remoção do calor residual do vaso de contenção de reatores nucleares, após a ocorrência de um acidente. Um grande aumento na transferência de calor ocorre devido à presença da força de empuxo de difusão térmica, resultante de gradientes de temperatura, e da força de empuxo de difusão mássica, devido aos gradientes de concentração de espécies que, junto com a evaporação do filme líquido, causam a transferência de calor latente.

Processos nos quais o escoamento de um único fluido é induzido apenas pela força de empuxo decorrente de diferenças de temperatura tem sido estudados em detalhes (Kettleborough, 1972 e Sparrow et al, 1984). Os efeitos da difusão mássica foram considerados, entre outros, por Gebhart e Pera (1971), que investigaram escoamentos laminares em placas planas paralelas. Chen e Yuh (1980) analisaram a transferência de calor e massa em escoamentos laminares por convecção natural ao longo de um cilindro vertical, onde, como Gebhart e Pera, as velocidades interfaciais surgidas pela difusão de espécies foram desprezadas. Nessas análises, considerou-se que a concentração da espécie que se difunde na mistura gasosa é constante. No entanto, trata-se de uma hipótese muito restritiva no caso de escoamentos internos onde a pressão varia ao longo do canal.

Chang et al (1986) e Lin e Chang (1985), considerando a variação de pressão ao longo do canal, investigaram o papel da transferência de calor latente, associado com a vaporização de um filme líquido de água, aquecido e mantido a uma temperatura uniforme, escoando na superfície interna de um tubo, em escoamentos por convecção natural. Foi considerado filme líquido extremamente fino, podendo ser tratado como uma condição de contorno. Essa hipótese implica em filme de água estacionário e à mesma temperatura uniforme da parede do tubo. Lin et al (1988) analisaram escoamentos de ar por convecção forçada, novamente impondo a restrição de filme líquido fino, concluindo que a transferência de calor é dominada pelo transporte de calor latente associado com a vaporização do filme líquido, implicando acréscimo na transferência de calor através da difusão de massa associada com a evaporação do filme líquido.

A hipótese de filme líquido restringe o cálculo da transferência de calor e massa apenas ao ar, limitando sua aplicação. Entretanto, o filme líquido, apesar de fino, possui espessura finita e os efeitos de transporte de momento e de energia, na transferência de calor e massa para o ar, devem ser considerados, uma vez que o filme líquido não é estacionário e possui uma distribuição de temperatura não uniforme. Tais considerações se encontram em Yan e Lin (1991) e em Yan (1992). No primeiro estudo, é analisado o resfriamento por evaporação de um filme líquido finito escoando laminarmente ao longo de um canal vertical de placas planas paralelas, isoladas termicamente, com escoamento laminar de ar por convecção natural. Novamente, conclui-se que a transferência de calor, no lado do ar, é dominada pelo transporte de calor latente. No segundo trabalho, é analisada a evaporação de um filme líquido finito em um escoamento laminar por convecção mista, onde a transferência de calor e massa é determinada num canal vertical de placas planas paralelas, sendo uma placa isolada termicamente e a outra submetida a um fluxo de calor uniforme, por onde escoam o filme líquido. Comparação com os resultados obtidos pelo modelo onde se despreza a espessura do filme líquido mostra que tal hipótese é válida apenas para vazões de líquido extremamente baixas, tornando-se inadequada à medida que a vazão aumenta, principalmente nas regiões próximas à entrada do canal. Novamente, a vaporização do filme líquido ao longo da interface domina a transferência de calor e massa.

Nas análises citadas, foram adotadas as aproximações de camada limite, tanto para o filme líquido quanto para o escoamento de gás. No líquido, os termos de inércia, na equação de momento, foram considerados desprezíveis em relação aos termos de difusão. Comum aos modelos, também, está a solução em separado dos escoamentos do filme líquido e da mistura gasosa, então, impondo as chamadas "matching conditions" na interface, que expressam a continuidade da velocidade, da temperatura e da tensão cisalhante.

No presente trabalho, o escoamento de um filme de água escoando em paralelo com uma mistura água-vapor, em um canal formado por duas placas planas verticais paralelas, sendo uma aquecida e a outra isolada, com o filme escoando laminarmente sobre a parede aquecida, é analisado numericamente, obtendo-se os números de Nusselt e de Sherwood na interface das fases.

MODELO NUMÉRICO

Considere um canal vertical, de paredes planas paralelas, de altura H e espaçamento b . Sobre a parede aquecida, submetida a um fluxo de calor constante q'' , escoam um filme líquido, com espessura δ , co-corrente com um escoamento de uma mistura gasosa, conforme mostrado na Fig. 2.

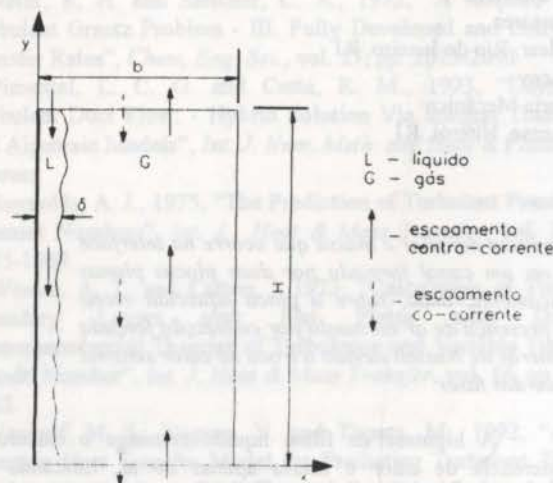


Figura 1 - Geometria do Problema

Considere escoamento bi-dimensional, em regime permanente e fluidos newtonianos. As equações de conservação para um sistema composto por dois fluidos em escoamento monofásico separados por uma interface, podem ser escritas na forma:

Equação de conservação de massa

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

Equação de conservação de quantidade de movimento na direção x

$$\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \quad (2)$$

Equação de conservação de quantidade de movimento na direção y

$$\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} - \rho g + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \quad (3)$$

Equação de conservação de energia:

$$\rho u \frac{\partial T}{\partial x} + \rho v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\rho_g}{c_p} D (c_{p_v} - c_{p_{ar}}) \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial w_v}{\partial x}, \quad (4)$$

Equação de conservação de massa para a fração mássica de vapor

$$\rho_g u \frac{\partial w_v}{\partial x} + \rho_g v \frac{\partial w_v}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_g D \frac{\partial w_v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_g D \frac{\partial w_v}{\partial y} \right). \quad (5)$$

O tratamento para a interface filme líquido-mistura gasosa é feito considerando-se as condições nesta superfície para a velocidade, temperatura, tensão cisalhante e considerando-se o vapor gerado na interface por evaporação. Desta forma, as condições de contorno do escoamento são:

- entrada de líquido

$$0 \leq x \leq \delta_0 \text{ e } y = H \rightarrow u = 0, v = v_{in_l} \text{ e } T = T_{in_l};$$

- entrada da mistura gasosa

$$\delta_0 \leq x \leq b \text{ e } y = H \rightarrow u = 0, v = v_{in_g}, T = T_{in_g} \text{ e } w_v = w_{v_{in}};$$

- parede aquecida

$$x = 0, 0 \leq y \leq H \rightarrow u = v = 0 \text{ e } k_l \frac{\partial T}{\partial x} = q'';$$

- parede isolada

$$x = b, 0 \leq y \leq H \rightarrow u = v = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial w_v}{\partial x} = 0,$$

$$\text{onde } v_{in_l} = \frac{B}{\rho_l \delta_0} \quad (6),$$

$$v_{in_g} = \frac{Re_g \mu_g}{\rho_g 2b} \quad (7)$$

$$\delta_0 = \left(\frac{3\mu_l B}{\rho_l^2 g} \right)^{1/3} \quad (8) \text{ e } w_{v_{in}} = \frac{\phi \frac{\rho_g}{\rho_{ar}}}{1 + \phi \frac{\rho_g}{\rho_{ar}}} \quad (9)$$

Consideram-se as variações das propriedades do líquido com a temperatura. Para a mistura gasosa ar-vapor, cujas propriedades dependem da temperatura e da fração de massa de vapor, foram utilizadas as fórmulas de Fujii et al (1977).

Para a solução, é utilizado o método de volume de controle de Patankar (1980), com as equações de conservação resolvidas simultaneamente para o domínio compreendido pelo filme líquido e pela mistura gasosa. Na região próxima à interface, devido às grandes variações de velocidade, temperatura e fração de massa de vapor, a malha é não uniforme na direção transversal ao escoamento, com uma densidade de pontos nodais bem maior, assim como nas regiões próximas às paredes do canal. O mesmo ocorre nas regiões de entrada de fluido, onde é utilizado, também, uma densidade maior de pontos nodais axialmente.

A espessura da película de líquido na entrada do canal é dada pela Eq. (8). Ao longo do escoamento, a posição da interface deve ser especificada para identificar a região de líquido e de gás no domínio, e assim utilizar-se as respectivas propriedades que descrevem o coeficiente de difusão para cada variável. Esta posição é determinada através de um balanço de massa realizado iterativamente em cada posição axial, considerando a vazão de vapor gerado na interface por evaporação. Com o resultado deste balanço, aproxima-se a estrutura do filme líquido por uma série de degraus, de dimensão axial menor que a do volume de controle daquela posição. Esta situação é mostrada na Fig. 2.

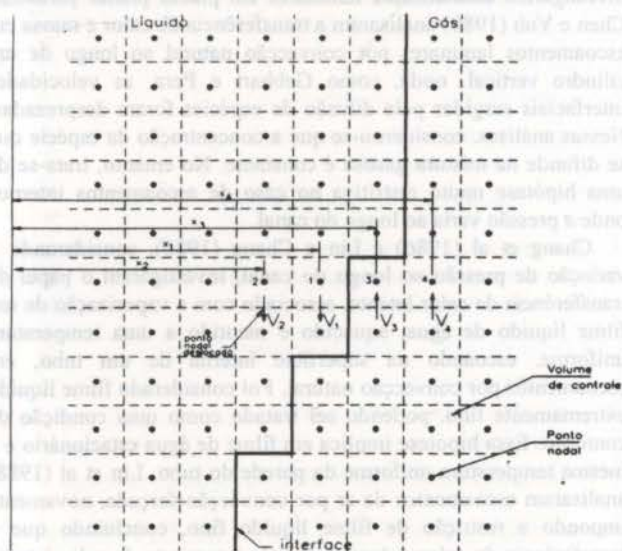


Figura 2 - Esquema da malha computacional próximo à interface
Localização da velocidade axial

As condições de contorno, especificadas na interface, são: velocidade de vapor, tensão cisalhante e vapor gerado por evaporação. A fração de massa de vapor gerado por evaporação do filme líquido, utilizada como condição de contorno para a Eq. (5), é dada pela expressão

$$w_1 = \frac{M_v p_1}{M_{ar}(p - p_1) + M_v p_1} \quad (10)$$

Esta condição considera equilíbrio termodinâmico na interface.

Para a velocidade, a velocidade axial do vapor gerado é desprezada na e a interface é considerada como um plano semi-impermeável, com a solubilidade do ar no filme líquido desprezível. Portanto, a velocidade na interface na direção transversal será:

$$u_1 = -D \left(\frac{\partial w_v}{\partial x} \right)_{1,1} \frac{1}{1 - w_v} \quad (11)$$

A condição de continuidade da tensão cisalhante na interface é:

$$\mu_l \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_{l,1} = \mu_g \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_{g,1} \quad (12)$$

Esta condição é aproximada por:

$$\mu_l \frac{V_1 - V_2}{X_1 - X_2} = \mu_g \frac{V_3 - V_4}{X_3 - X_4} \quad (13)$$

de acordo com as posições mostradas na Fig. 2.

O balanço de energia, na interface, é modelado forçando a temperatura do ponto nodal mais próximo da interface, na região de líquido, a obedecer a equação

$$k_l \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{l,1} = k_g \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{g,1} + m_l'' h_{fg} \quad (14)$$

com o fluxo de vapor gerado na interface expresso por:

$$m_l'' = \rho_g u_l = \rho_g \frac{D}{1 - w_l} \left(\frac{\partial w_v}{\partial x} \right)_1 \quad (15)$$

Esta expressão é aproximada por:

$$k_l \frac{T_1 - T_2}{X_1 - X_2} = k_g \frac{T_3 - T_4}{X_3 - X_4} + \rho_g \frac{D}{1 - w_l} \frac{w_{v3} - w_{v4}}{X_3 - X_4} \quad (16)$$

de acordo com a Fig. 2.

Neste modelo, apenas um ponto nodal simula a interface. Isto implica que a velocidade transversal, na interface, seja calculada no ponto nodal deslocado que se localiza sobre a própria interface. A temperatura na interface é a média entre as temperaturas calculadas para os pontos nodais nas regiões de líquido e gás mais próximos.

A condição de contorno para a parede aquecida pode ser dada pela distribuição de temperatura ou fluxo de calor. Quando a condição é o fluxo de calor, com valores desconhecidos para a temperatura na parede, torna-se necessária a eliminação de sua influência do domínio de cálculo. Isto é feito especificando-se coeficiente de difusão igual a zero para a temperatura na parede aquecida, ao mesmo tempo em que se leva para o interior do domínio o fluxo de calor do contorno, através do termo fonte para a temperatura no volume de controle próximo ao contorno.

Após a obtenção da temperatura para todos os pontos internos, calcula-se a temperatura na parede aquecida como:

$$T_1 = \frac{q_w'' \delta^*}{k} + T_2 \quad (17)$$

onde T_2 é a temperatura do primeiro ponto nodal interno.

Para parede isolada, com coeficiente de difusão nulo para a temperatura, produz-se, automaticamente, fluxo de calor nulo.

Tendo em vista que a equação para a correção de pressão, obtida através da equação da continuidade, considera que as velocidades na fronteira, normais ao contorno, são conhecidas, torna-se necessário especificá-las. Esta especificação é feita impondo-se que o balanço global de massa seja satisfeito.

Através da solução numérica do escoamento considerado, podem ser obtidas diversas relações para a transferência de calor e massa na interface líquido-vapor, conforme definidas a seguir.

Número de Nusselt na Interface:

$$Nu_l \equiv \frac{q_l'' 2b}{k_g (T_l - T_b)} = \frac{k_l \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{l,1} 2b}{k_g (T_l - T_b)} \quad (18)$$

Número de Nusselt Sensível na Interface:

$$Nu_{s,l} \equiv \frac{q_{s,l}'' 2b}{k_g (T_l - T_b)} = \frac{\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{g,1} 2b}{(T_l - T_b)} \quad (19)$$

Número de Nusselt Latente na Interface:

$$Nu_{L,l} \equiv \frac{q_{L,l}'' 2b}{k_g (T_l - T_b)} = \frac{m_l'' h_{fg} 2b}{k_g (T_l - T_b)} = \frac{\rho_g D}{(1 - w_l)} \left(\frac{\partial w_v}{\partial x} \right)_1 \frac{h_{fg} 2b}{k_g (T_l - T_b)} \quad (20)$$

onde T_b é a temperatura de mistura, dada por:

$$T_b = \frac{\int_0^b \rho_g v_g c_p T dx}{\int_0^b \rho_g v_g c_p dx} \quad (21)$$

Pelas definições acima e considerando-se o balanço de energia na interface, tem-se que $Nu_l = Nu_{s,l} + Nu_{L,l}$.

Para o número de Sherwood, que caracteriza a relação entre a transferência de massa por convecção e por difusão, tem-se a seguinte definição:

$$Sh \equiv \frac{h_M 2b}{D} = \frac{m_l'' (1 - w_l) 2b}{D \rho_g (w_l - w_b)} = \left(\frac{\partial w_v}{\partial x} \right)_1 \frac{2b}{(w_l - w_b)} \quad (22)$$

sendo h_M o coeficiente de troca de massa, definido por

$$h_M \equiv \frac{m_l'' (1 - w_l)}{\rho_g (w_l - w_b)} \quad (23)$$

e, w_b , a fração de massa de vapor de mistura, calculada como:

$$w_b = \frac{\int_0^b \rho_g v_g c_p w_v dx}{\int_0^b \rho_g v_g c_p dx} \quad (24)$$

RESULTADOS

Diversos testes preliminares foram realizados com o modelo desenvolvido com o objetivo de se estabelecer o efeito da malha de discretização, da validade dos resultados obtidos e do efeito de se utilizar todas as propriedades variáveis com a temperatura em comparação com a usual hipótese de Boussinesq, onde se impõe apenas a variação da densidade no termo de empuxo, na equação de conservação da quantidade de movimento.

As condições do escoamento, para o teste da malha, são:

Dimensões do canal:

largura: $b = 0,015$ m
altura: $H = 3,0$ m

Película de água:

temperatura na entrada: 20 °C
número de Reynolds: 80

Mistura gasosa ar-vapor:

temperatura na entrada: 20 °C
umidade relativa do ar: 50%
número de Reynolds: 2000

Fluxo de calor na parede: 3000 W/m²

Direção dos escoamentos: vertical, para baixo

Quanto à malha, observou-se que 48 pontos nodais na direção axial e 66 pontos na direção transversal, sendo 16 pontos na película líquida e 50 pontos na mistura gasosa, representa uma malha adequada pois seu refinamento não irá resultar em variações sensíveis para qualquer um dos parâmetros do escoamento.

Devido à ausência de dados experimentais na literatura, com o objetivo de se validar o procedimento adotado, foram efetuadas comparações com os resultados de Yan (1992), o qual despreza a transferência de quantidade de movimento e energia axiais e os termos de inércia, em relação aos termos viscosos, na equação de conservação de quantidade de movimento, na direção axial, além de adotar aproximações de camada limite para a mistura gasosa. Os resultados observados foram considerados satisfatórios, conforme mostrado, por exemplo, na Fig. 3, para a temperatura da mistura gasosa, ao longo do canal.

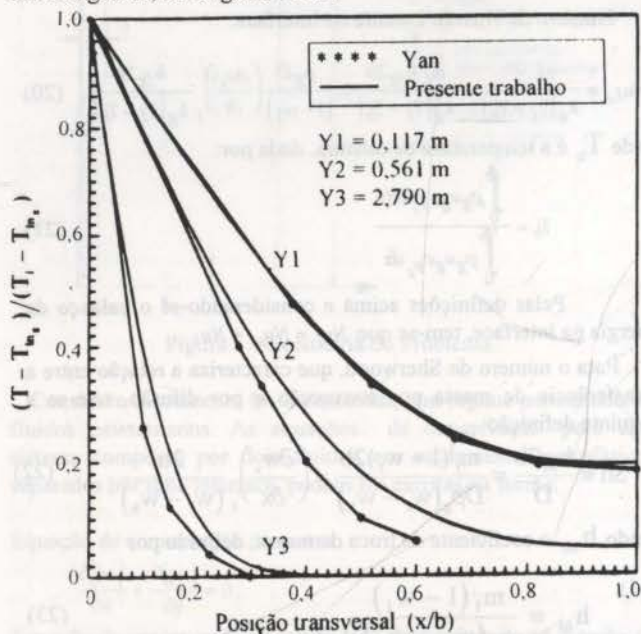


Figura 3 - Perfil de temperatura da mistura gasosa.

Fig. 4 mostra uma comparação para o perfil de velocidade da mistura gasosa para duas posições axiais, considerando-se a utilização da hipótese de Boussinesq (linha pontilhada) e o modelo atual (linha cheia), para um fluxo de calor na parede de 5000 W/m^2 . Observe que, próximo à interface, a força de empuxo, devido à variação de densidade, irá se opor ao escoamento. No entanto, no caso da hipótese de Boussinesq, a densidade média da mistura, no canal, será maior e, por consequência, menores velocidades, uma vez que a vazão é mantida constante, ao contrário do que ocorre quando a densidade da mistura é variável, causando uma aceleração do escoamento, fato este que irá aumentando ao longo da direção axial, assim como com o aumento do fluxo de calor na parede.

Com o modelo desenvolvido, foram realizadas 16 corridas com o objetivo de se analisar o efeito do fluxo de calor na parede aquecida, do número de Reynolds do filme líquido e da mistura gasosa, nos números de Nusselt sensível, Nus, e latente, Nul, dados pelas Eqs. 19 e 20, e no número de Sherwood, Sh (Eq. 22), na interface. Os parâmetros das corridas são mostrados na Tabela 1.

Os resultados observados se encontram nas Figuras 5, 6 e 7.

Observe que, na região de entrada (correspondente a $y=3,0 \text{ m}$), Nus, Nul e Sh tendem para valores infinitos devido aos gradientes infinitos de temperatura e de concentração de vapor de água. Tanto Nus quanto Sh tendem a valores constantes ao longo da direção axial, semelhante ao que ocorre em escoamentos monofásicos em canais. Este fato, no entanto, não se verifica com Nul, particularmente com elevados fluxos de calor, devido ao

aumento da temperatura na interface e devido à redução da espessura do filme líquido, acarretando maior evaporação.

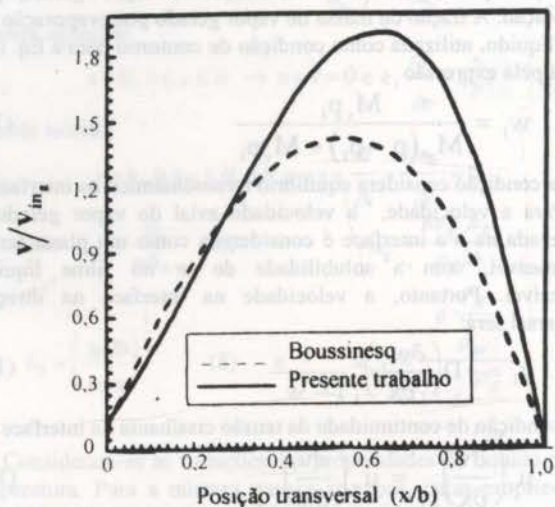


Figura 4 - Efeito da hipótese de Boussinesq no perfil de velocidade da mistura gasosa, na saída do canal.

TABELA 1 - Casos analisados

Caso	Filme líquido Re	Mistura gasosa Re	Fluxo de calor (W/m^2)
1	80	2000	500
2	80	2000	1000
3	80	2000	2000
4	80	2000	3000
5	80	2000	4000
6	80	2000	5000
7	20	2000	1000
8	40	2000	1000
9	60	2000	1000
10	120	2000	1000
11	160	2000	1000
12	80	500	1000
13	80	750	1000
14	80	1000	1000
15	80	1500	1000
16	80	2300	1000

O aumento do número de Reynolds do filme líquido provoca um acréscimo em sua espessura, aumentando a resistência à passagem de calor da parede para o ar. Desta forma, aumento de Re, para o líquido, provoca uma redução na taxa de evaporação na interface, reduzindo Nul. Para menores valores, ocorrerá maior taxa de evaporação na interface que, por sua vez, irá provocar um maior empuxo, nas regiões próximas da interface, que se opõe ao escoamento. Desta forma, menores valores de Re do líquido causam menores valores de Nus e Sh.

O número de Reynolds da mistura gasosa, tem influência apenas na entrada do canal, onde maiores valores tendem a retardar a ocorrência de desenvolvimento dos perfis de velocidade, temperatura e concentração, o que irá se refletir nos números de Nusselt e Sherwood.

Comparando-se os resultados das Figs. 5 e 6, pode-se observar que o processo de transferência de calor devido à evaporação na interface produz números de Nusselt uma ordem de grandeza maiores do que aqueles devido à troca de calor sensível, tornando este processo extremamente eficiente comparado com os processos convencionais de convecção forçada monofásica.

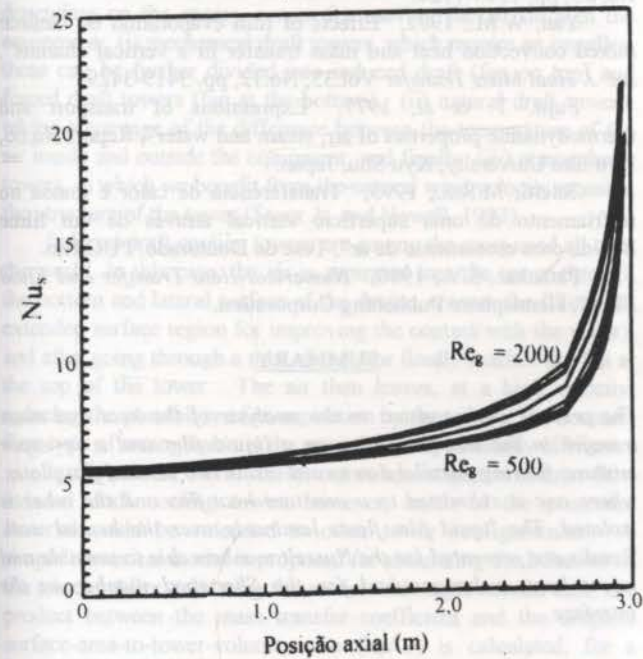
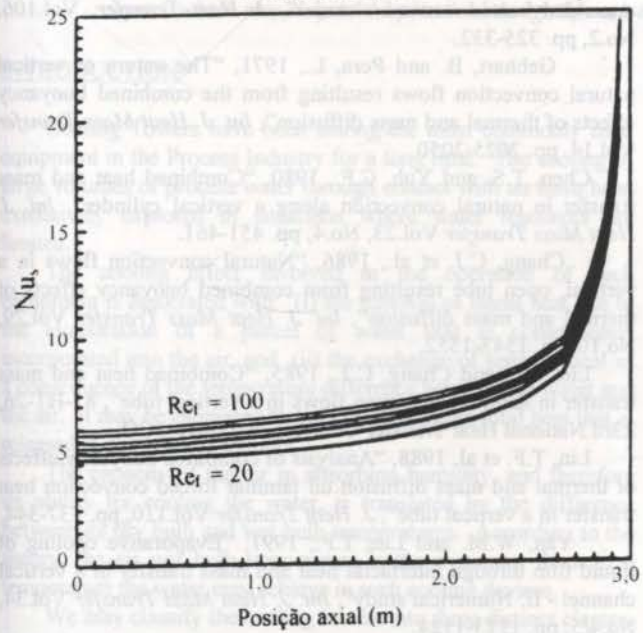
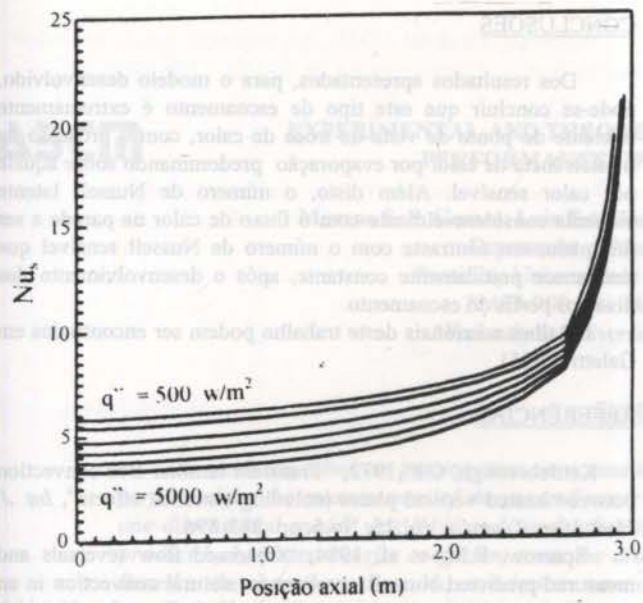


Figura 5 - Distribuição axial do número de Nusselt sensível.

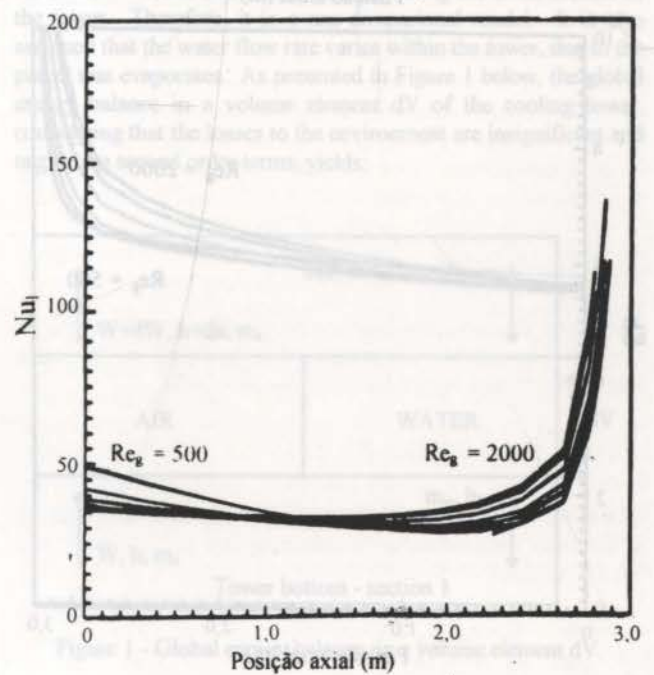
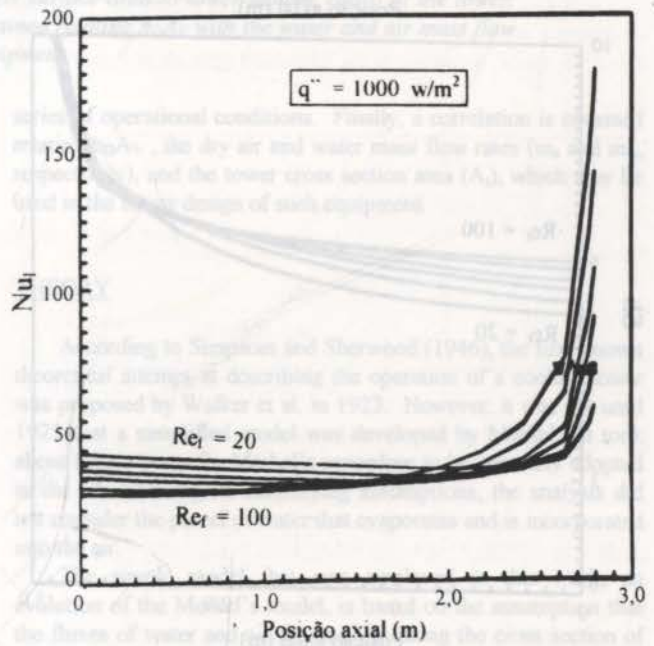
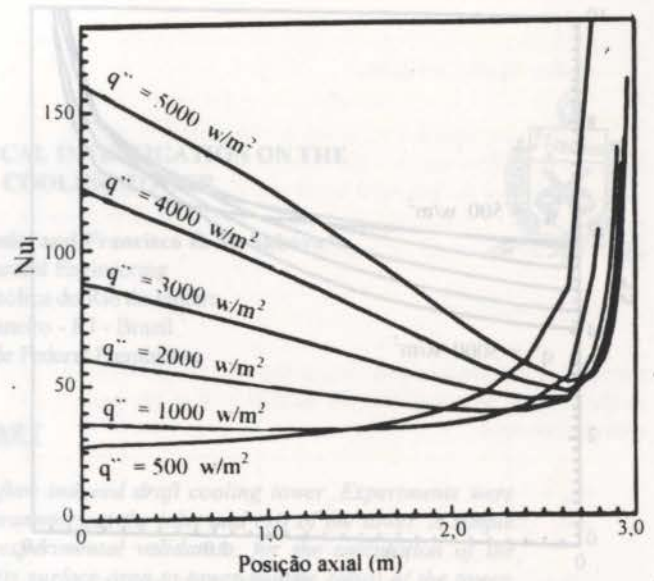


Figura 6 - Distribuição axial do número de Nusselt latente.

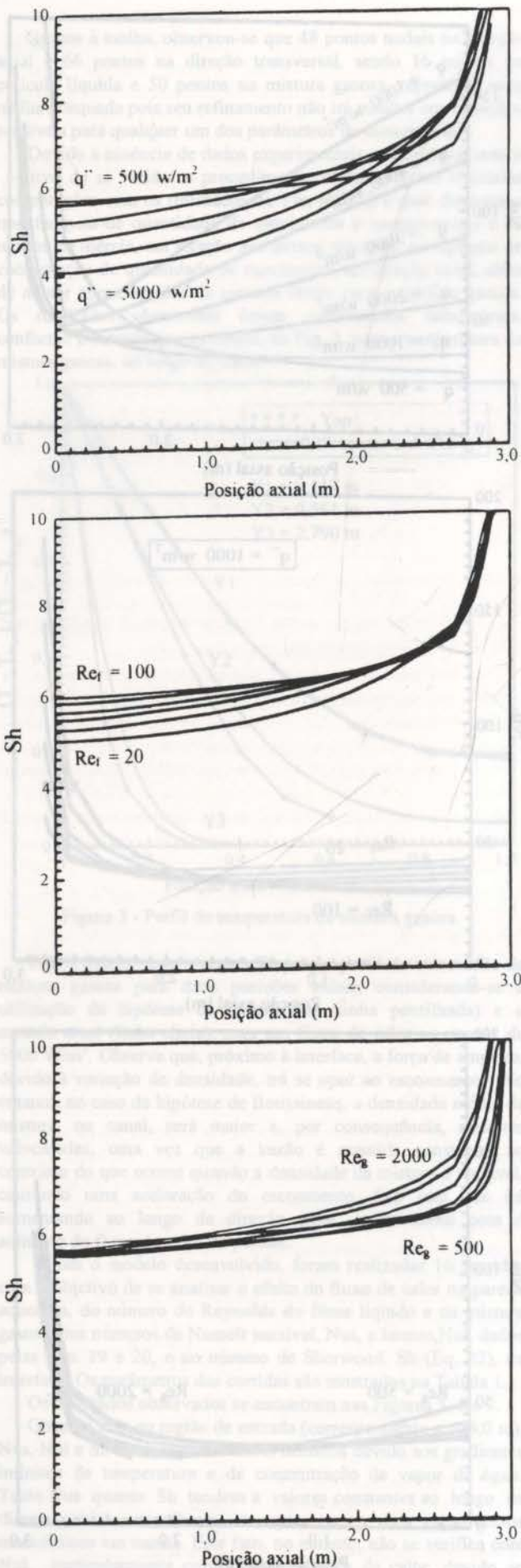


Figura 7 - Distribuição axial do número de Sherwood.

CONCLUSÕES

Dos resultados apresentados, para o modelo desenvolvido, pode-se concluir que este tipo de escoamento é extremamente eficiente do ponto de vista de troca de calor, com o processo de transferência de calor por evaporação predominando sobre aquele por calor sensível. Além disto, o número de Nusselt latente aumenta consideravelmente com o fluxo de calor na parede a ser dissipado, em contraste com o número de Nusselt sensível que permanece praticamente constante, após o desenvolvimento dos diversos perfis do escoamento.

Detalhes adicionais deste trabalho podem ser encontrados em Galetti (1995).

REFERÊNCIAS

- Kettleborough, C.F., 1972, "Transient laminar free convection between heated vertical plates including entrance effects", *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol.15, No.5, pp. 883-896.
- Sparrow, E.M. et al, 1984, "Observed flow reversals and measured-predicted Nusselt numbers for natural convection in an one-sided heated vertical channel", *J. Heat Transfer*, Vol.106, No.2, pp. 325-332.
- Gebhart, B. and Pera, L., 1971, "The nature of vertical natural convection flows resulting from the combined buoyancy effects of thermal and mass diffusion", *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol.14, pp. 2025-2050.
- Chen, T.S. and Yuh, C.F., 1980, "Combined heat and mass transfer in natural convection along a vertical cylinder", *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol.23, No.4, pp. 451-461.
- Chang, C.J. et al., 1986, "Natural convection flows in a vertical, open tube resulting from combined buoyancy effects of thermal and mass diffusion", *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol.29, No.10, pp. 1543-1552.
- Lin, T.F. and Chang, C.J., 1985, "Combined heat and mass transfer in natural convection flows in a vertical tube", 85-HT-26, 23rd National Heat Transfer Conference, Denver, CO.
- Lin, T.F. et al, 1988, "Analysis of combined buoyancy effects of thermal and mass diffusion on laminar forced convection heat transfer in a vertical tube", *J. Heat Transfer* Vol.110, pp. 337-344.
- Yan, W.M. and Lin, T.F., 1991, "Evaporative cooling of liquid film through interfacial heat and mass transfer in a vertical channel - II. Numerical study", *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol.34, No.4/5, pp. 1113-1124.
- Yan, W.M., 1992, "Effects of film evaporation on laminar mixed convection heat and mass transfer in a vertical channel", *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol.35, No.12, pp. 3419-3429.
- Fujii, T. et al, 1977, "Expressions of transport and thermodynamic properties of air, steam and water", Report No.66, Kyu Shu University, Kyu Shu, Japan.
- Galetti, M.R.S., 1995, "Transferência de calor e massa no resfriamento de uma superfície vertical através de um filme líquido com escoamento de ar", Tese de Doutorado, PUC/Rio.
- Patankar, S.V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation.

SUMMARY

The present work consists in the analysis of the heat and mass transfer in the interface between a liquid film and a air-vapor mixture, flowing parallel downward inside two vertical flat plates, where one is submitted to a constant heat flux and the other is isolated. The liquid film flows lamina- rily over the heated wall. Results are presented for the Nusselt numbers due to sensible and latent heat exchanges and for the Sherwood number in the interface.



EXPERIMENTAL AND THEORETICAL INVESTIGATION ON THE PERFORMANCE OF A COOLING TOWER

Marcos S. P. Gomes, Luis F.A. Azevedo, and Francisco E. M. Saboya*

Department of Mechanical Engineering
Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro
22453-900 - Rio de Janeiro - RJ - Brazil

*Presently at Universidade Federal Fluminense



SUMMARY

The work describes an investigation on a counter-flow induced draft cooling tower. Experiments were performed for the measurement of the air and water parameters at the inlet and exit of the tower. A simple one-dimensional model was built and used, after its experimental validation, for the calculation of the product $h_D A_V$ (mass transfer coefficient times the droplets surface-area-to-tower-volume ratio) of the tower. Based in the experimental results, correlations were obtained relating $h_D A_V$ with the water and air mass flow rates, which may help in the practical design of such equipment.

INTRODUCTION

Cooling Towers have been among the most commonly used equipment in the Process Industry for a long time. The cooling of large volumes of process water through contact with air have been extensively explored in situations where water resources are limited.

The cooling effect involved in the operation of such equipment is associated with: (i) the removal of latent heat due to the evaporation of a parcel of water that is consequently incorporated into the air, and (ii) the exchange of sensible heat as a consequence of the temperature difference between the water and the air. It may be estimated that about 80% of the total heat that is released is due to mass transfer.

The capacity of the air in absorbing humidity, and therefore its ability for cooling the water, is translated by the difference between its dry bulb and wet bulb temperatures. According to the theory, the air wet bulb temperature is the minimum theoretical temperature the water may achieve in such cooling devices.

We may classify the cooling towers into three distinct classes, depending on the energy source for moving the air through the equipment: (i) mechanical draft towers, which require an impeller; these can be further divided into induced draft (fan on top) and forced draft towers (fan at the bottom), (ii) natural draft towers, taking advantage of the difference between the temperature of the air inside and outside the equipment, and finally (iii) atmospheric towers, in which we benefit from the natural wind velocity crossing the structure of the tower (Sauer Jr. and Howell, 1993).

Induced draft cooling towers are among the most used all over the world. In this case, the air is aspirated into the tower through the bottom and lateral surface of the device, crosses the filling (an extended surface region for improving the contact with the water), and after going through a mist eliminator finally reaches the fan at the top of the tower. The air then leaves, at a high velocity, reducing the possibility of re-aspiration by the tower. The counter-flow type of arrangement is the most thermodynamically efficient.

In the present work, we set out to investigate a counter-flow induced draft cooling tower, however, much of the presented material could be extended to other tower configurations. A simple numerical model is proposed for simulating the behavior of the tower. After validating the model with experimental data, the product between the mass transfer coefficient and the droplets surface-area-to-tower-volume ratio ($h_D A_V$) is calculated, for a

series of operational conditions. Finally, a correlation is obtained relating $h_D A_V$, the dry air and water mass flow rates (m_a and m_w , respectively), and the tower cross section area (A_t), which may be used in the future design of such equipment.

THEORY

According to Simpsons and Sherwood (1946), the first known theoretical attempt at describing the operation of a cooling tower was proposed by Walker et al. in 1923. However, it was not until 1925 that a simplified model was developed by Merkel. It took about fifteen years for Merkel's procedure to be generally adopted in the US. Among its simplifying assumptions, the analysis did not consider the parcel of water that evaporates and is incorporated into the air.

The simple model that was employed in this work, an evolution of the Merkel's model, is based on the assumption that the fluxes of water and air are uniform along the cross section of the tower. Therefore, it is a one-dimensional model. It is also assumed that the water flow rate varies within the tower, due to the parcel that evaporates. As presented in Figure 1 below, the global energy balance in a volume element dV of the cooling tower, considering that the losses to the environment are insignificant and neglecting second order terms, yields:

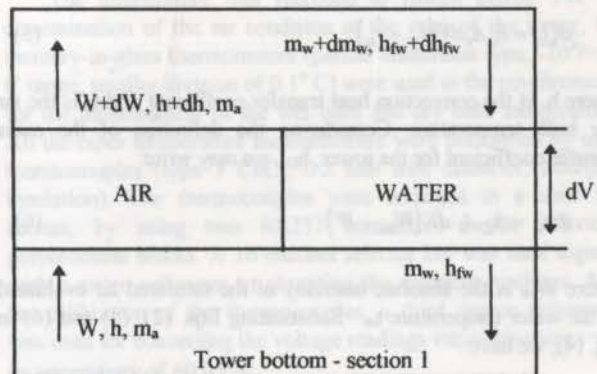


Figure 1 - Global energy balance, in a volume element dV .

$$m_a dh = m_w dh_{fw} + h_{fw} dm_w \quad (1)$$

In the above equation m_a is the dry air mass flow rate, m_w is the water mass flow rate, h is the enthalpy of the moist air, and h_{fw} is the enthalpy of the saturated liquid water evaluated at the water temperature t_w . Considering the parcel of water which evaporates and is assimilated by the air, we may write:

$$dm_w = m_a dW \quad (2)$$

where W is the absolute humidity of the air. Substituting Eq. (2) in Eq. (1), and assuming that the specific heat of the water c_w is constant, we have:

$$\frac{dt_w}{dW} = \frac{m_a}{m_w c_w} \left(\frac{dh}{dW} - h_{fw} \right) \quad (3)$$

Equation (3) above is the first equation of the model. Now let us consider an energy balance on the air side, in a volume element dV of the tower, according to the schematic diagram in Figure 2.

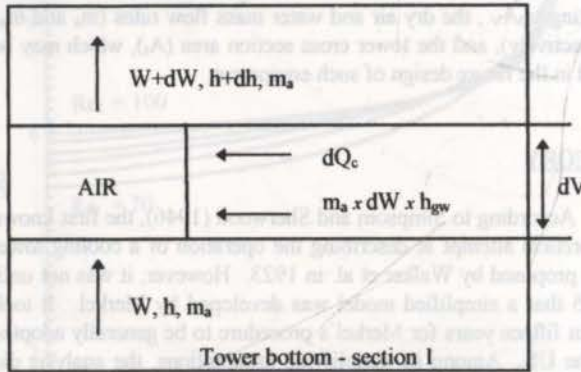


Figure 2 - Energy balance on the air side, in a volume element dV .

We may then write:

$$m_a dh = dQ_c + m_a dW h_{gw} \quad (4)$$

In the above equation Q_c is the heat that is transferred from the water droplets to the air by convection, and h_{gw} is the enthalpy of the saturated water vapor evaluated at the water temperature t_w . By definition, we may write:

$$dQ_c = h_c A_v dV (t_w - t_a) \quad (5)$$

where h_c is the convection heat transfer coefficient and t_a is the air dry bulb temperature. Considering the definition of the mass transfer coefficient for the tower, h_D , we may write:

$$dm_w = h_D A_v dV (W_{sw} - W) \quad (6)$$

where W_{sw} is the absolute humidity of the saturated air evaluated at the water temperature t_w . Substituting Eqs. (2), (5) and (6) in Eq. (4), we have:

$$\frac{dh}{dW} = \frac{h_c}{h_D} \frac{t_w - t_a}{W_{sw} - W} + h_{gw} \quad (7)$$

Following Threlkeld (1970), the empirical correlation below may be employed for calculating the enthalpy of the moist air:

$$h = cp_a t_a + 2501.4 W + 17.863 \quad (8)$$

where the temperature is in Centigrades, and the enthalpy is given in kJ per kg of dry air, we may rewrite Eq. (7) in the following format, in consistent units from now on:

$$\frac{dh}{dW} = Le \left(\frac{h_{sw} - h}{W_{sw} - W} - 2501.4 \right) + h_{gw} \quad (9)$$

In the above equation Le is the Lewis number, defined as:

$$Le = \frac{h_c}{h_D cp_a} = \left(\frac{D}{\alpha} \right)^{2/3} \quad (10)$$

where D and α are the molecular and thermal diffusivities, respectively. Equation (9) is the second equation of the model. From the definition of the mass transfer coefficient, Eq. (6), together with Eq. (2), we may write:

$$h_D A_v = \frac{m_a}{V} \int_{W_1}^{W_2} \frac{dW}{W_{sw} - W} \quad (11)$$

Therefore, by knowing how the difference $W_{sw} - W$ (equivalent to the driving potential for the mass transfer) varies inside the tower, for a given tower volume and dry air mass flow rate, we may calculate the product $h_D A_v$ by integrating Eq. (11). The reason for calculating the product of h_D and A_v together, comes from the difficulty in obtaining the droplets surface-area-to-tower-volume ratio, independently.

In this work, the model equations (3) and (9) were used for the calculation of the properties of the air and water inside the tower, in conformity with experimentally determined conditions at the bottom and top. Starting with the experimental data at the bottom of the tower, the equations were integrated from W_1 to W_2 , where the indexes 1 and 2 refer to the conditions at the bottom and the top, respectively. The modeled values at the top of the tower were then compared with the measured ones. If they were in agreement, it was assumed that the calculated values for the properties inside the tower were also true. This would then allow us to obtain the product $h_D A_v$.

EXPERIMENTAL APPARATUS

Once a theoretical approach was developed for simulating the behavior of the tower, we then set out to design and build an experimental apparatus that would allow us to validate it, and consequently provide the necessary means for calculating the product $h_D A_v$.

Figure 3 below represents a schematic diagram of the experimental system. All the parts, but the fan, were assembled inside a room to provide for stable environmental conditions during the experiments. In the description that follows, the apparatus was divided into three parts: the air and water circuits, and the instrumentation.

Air Circuit. The air entered at the bottom of the tower (item 1 of the schematic diagram in figure 3, 0.4 m wide, 0.9 m in length, and 1.5 m tall, 0.32 m³ of effective tower volume, cross

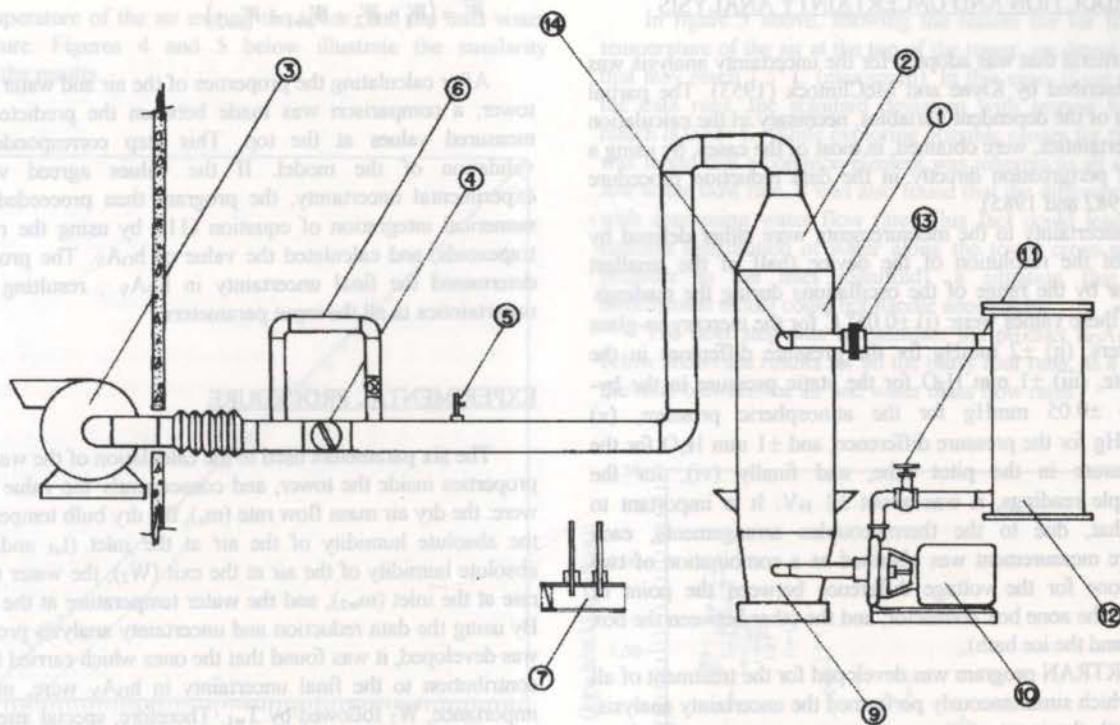


Figure 3 - Schematic diagram of the experimental system.

section area of 0.3275 m^2 , cooling power of 17.45 kW and moved upward through an extended surface filling, exchanging heat and mass with the water which was flowing downwards. After crossing a mist eliminator (2), it exited at the top of the tower, where its dry bulb temperature was recorded. The air was moved through the system by a centrifugal fan (item 3, $36 \text{ m}^3/\text{min}$ @ $700 \text{ mm H}_2\text{O}$, powered by an electric motor with 10 CV) and, after leaving the tower, it flowed through a 0.121 m internal diameter duct and was conducted to the outside of the room. The air flow rate was controlled by a butterfly valve (4) and was measured by employing a pitot tube (5). Part of the air was allowed to flow in a by-pass (6), where the absolute humidity was determined by employing a wet bulb and a dry bulb thermometers. This value together with the dry bulb temperature above the mist eliminator established the condition of the air at the exit of the tower. A heating system controlled the temperature of the duct wall, so it was maintained above the dew point temperature of the exiting air. This guaranteed that no condensation occurred, so the absolute humidity that was detected in (6) was the same as in (2). The air condition at the inlet of the tower was determined by a psychrometer (7), in which the wet bulb and dry bulb temperatures were recorded. Both measurements (6) and (7) were obtained for the air flowing at about 5 m/s , for minimizing radiation effects (Threlkeld, 1970). The atmospheric pressure inside the room was measured by a Mercury Barometer (item 8, smaller division of 0.1 mmHg).

Water Circuit. The water was collected at the bottom of the tower (9), and it was circulated by a centrifugal pump (item 10, powered by a 2 HP electric motor) going through a flow regulating valve (11). It then flowed into an electric heater (item 12 - heating power of 17.5 kW), and passed through an orifice plate (13) where the flow rates were determined. It was then feed into the top of the tower where it was distributed, falling down and exchanging heat and mass with the air, concluding the closed circuit. The water

temperature at the inlet and exit of the tower were measured at locations (14) and (9), respectively.

Instrumentation. The following equipment were used during the experimental investigation:

With respect to the pressure measurements: (i) in the determination of the air flow rate, a capacitive pressure transducer and amplification unit (operational range $0\text{-}10 \text{ mmHg}$, connected to a multimeter, providing a smaller readable division of 0.01 mmHg) were used for detecting the difference between the stagnation and the static pressures in the pitot tube, while a U-tube was used for the measurement of the static pressure (smaller division of 1 mm of H_2O), (ii) in the determination of the water flow rate, a U-tube was used in the measurement of the differential pressure through the orifice plate (smaller division of 1 mmHg), (iii) in the determination of the by-pass pressure, used in the calculation of the absolute humidity at the exit of the tower, the same U-tube of item (ii), above, was employed.

The temperature was recorded in fifteen points. For the determination of the air condition at the inlet of the tower, two mercury-in-glass thermometers (partial immersion type, $-10^\circ\text{+}50^\circ \text{ C}$ range, smaller division of 0.1° C) were used in the psychrometer, for the measurement of the wet bulb and dry bulb temperatures. All the other temperature measurements were performed by using thermocouples (type T CuCt, 0.2 mm wire diameter, fiberglass insulation). The thermocouples were arranged in a zone box format, by using two RS232 connectors inside individual polyurethane blocks. A 16 channel selector key was used together with a micro-voltmeter in obtaining the different readings. After the calibration of the thermocouples, a third degree polynomial was used for converting the voltage readings into temperature with an uncertainty of $\pm 0.05^\circ \text{ C}$.

DATA REDUCTION AND UNCERTAINTY ANALYSIS

The criteria that was adopted for the uncertainty analysis was the one described by Klyne and McClintock (1953). The partial derivatives of the dependent variables, necessary in the calculation of the uncertainties, were obtained, in most of the cases, by using a method of perturbation directly in the data reduction procedure (Moffat, 1982 and 1985).

The uncertainty in the measurements were either defined by the limit of the resolution of the device (half of the smallest division) or by the range of the oscillations during the readings. Typically, these values were: (i) $\pm 0.05^\circ \text{C}$ for the mercury-in-glass thermometers, (ii) $\pm 2 \text{ mmHg}$ for the pressure difference in the orifice plate, (iii) $\pm 1 \text{ mm H}_2\text{O}$ for the static pressure in the by-pass, (iv) $\pm 0.05 \text{ mmHg}$ for the atmospheric pressure, (v) $\pm 0.03 \text{ mmHg}$ for the pressure difference, and $\pm 1 \text{ mm H}_2\text{O}$ for the static pressure in the pitot tube, and finally (vi), for the thermocouple readings, it was about $\pm 1 \mu\text{V}$. It is important to mention that, due to the thermocouples arrangements, each temperature measurement was obtained as a combination of two readings (one for the voltage difference between the point of interest and the zone box connector, and the other between the box connector and the ice bath).

A FORTRAN program was developed for the treatment of all the data, which simultaneously performed the uncertainty analysis. Starting with the input of the pressure, temperature and voltage readings during the experiments, and their respective uncertainties, the program manipulated the data for calculating the mass flow rates, absolute humidities and temperatures at the bottom and top of the tower, and the resulting uncertainty in each one of them.

After that, the program performed a global energy balance for checking the quality of the experimental measurements. The following expression had to be satisfied:

$$m_a h_1 + m_{w2} h_{fw2} = m_a (h_2 - (W_2 - W_1) h_{fw1}) + m_{w2} h_{fw1} \quad (12)$$

In the above equation, the terms on the left and right side correspond to the energy that enters and leaves the tower, respectively. The final uncertainty in each of the terms was taken into account when comparing both sides of the expression.

In a second stage, by starting with the experimental data at the bottom of the tower, and knowing the absolute humidity of the air at the exit, the model equations (3) and (9) were integrated from W_1 to W_2 . For this purpose, a numerical procedure was developed based in the fourth order Runge-Kutta Method (Bajpai and Calus, 1978). The water mass flow rate in the interior of the tower, including the exit section (as part of the initial condition of the problem), was calculated by using the following expression:

$$m_w = m_{w2} - m_a (W_2 - W) \quad (13)$$

During the calculations, for the range of temperatures that were investigated, the specific heat of the water was set equal to $4.19 \text{ kJ/kg}^\circ \text{C}$ (Holman, 1983). The Lewis number was set equal to 0.895, corresponding to the average value for the range of temperatures between 10° and 43°C (Threlkeld, 1970). Following the same reference, the specific heat of the moist air, in $\text{kJ/kg dry air}^\circ \text{C}$, was calculated by:

$$c_{pa} = 1.0048 + 1.884 W \quad (14)$$

Due to the insignificant variations in c_{pa} , for the range of conditions that were investigated, we chose to work with the following average value for the absolute humidity:

$$\bar{W} = (W_1 + W_2 + W_{sw1} + W_{sw2}) / 4 \quad (15)$$

After calculating the properties of the air and water within the tower, a comparison was made between the predicted and the measured values at the top. This step corresponded to the validation of the model. If the values agreed within the experimental uncertainty, the program then proceeded with the numerical integration of equation (11), by using the rule of the trapezoids, and calculated the value of h_{DAV} . The program also determined the final uncertainty in h_{DAV} , resulting from the uncertainties in all the input parameters.

EXPERIMENTAL PROCEDURE

The six parameters used in the calculation of the water and air properties inside the tower, and consequently the value of h_{DAV} , were: the dry air mass flow rate (m_a), the dry bulb temperature and the absolute humidity of the air at the inlet (t_{a1} and W_1), the absolute humidity of the air at the exit (W_2), the water mass flow rate at the inlet (m_{w2}), and the water temperature at the exit (t_{w1}). By using the data reduction and uncertainty analysis program that was developed, it was found that the ones which carried the largest contribution to the final uncertainty in h_{DAV} were, in order of importance, W_2 followed by T_{w1} . Therefore, special attention was given to the measurement of these parameters.

While investigating different operational conditions of the tower, it was concluded that the best approach for obtaining a steady state regime and more stable measurements, was to change the water flow rate while keeping a fixed air flow rate. In general terms, the experimental procedure was: (i) to select the air flow rate via the butterfly valve and the by-pass control, keeping in the last an average velocity of 5 m/s (this was accomplished by a calibrated orifice in the by-pass, through which a pressure drop of $29 \text{ mmH}_2\text{O}$ corresponded to an average velocity of 5 m/s), (ii) to select the water flow rate, (iii) to control the water heating system, verifying the water temperatures at the inlet and exit of the tower, (iv) to adjust the wall heating system, so the wall temperature was kept above the dew point temperature of the exiting air, (v) to observe the system response and, after fine tuning the settings, to wait until a steady state regime was reached (this would take about 1 hour), (vi) then we finally recorded all the experimental measurements. After that, we could return to step (ii), for investigating a different water flow rate or, after having covered all the range of water flow rates, to step (i), for moving to a different air flow condition.

RESULTS

As we have already mentioned, the first step of this investigation was to measure the water and air parameters at the inlet and exit of the tower, for a certain operational condition. Following that, the second step was to simulate the air and water properties inside the equipment. This was accomplished by starting with an initial condition at the bottom of the tower, which has been experimentally determined. We then checked the simulated results at the top of the tower, and calculated the product h_{DAV} .

During the experiments, thirty four runs were selected covering a wide range of conditions (air mass flow rate between 0.219 and 0.323 kg of dry air per second, with an uncertainty of about ± 0.007 ; water mass flow rate between 0.29 and 2.91 kg per second, with an uncertainty of 2%). The model performance was verified by comparing measured and predicted values for the dry

bulb temperature of the air exiting the tower, and the inlet water temperature. Figures 4 and 5 below illustrate the similarity between the results.

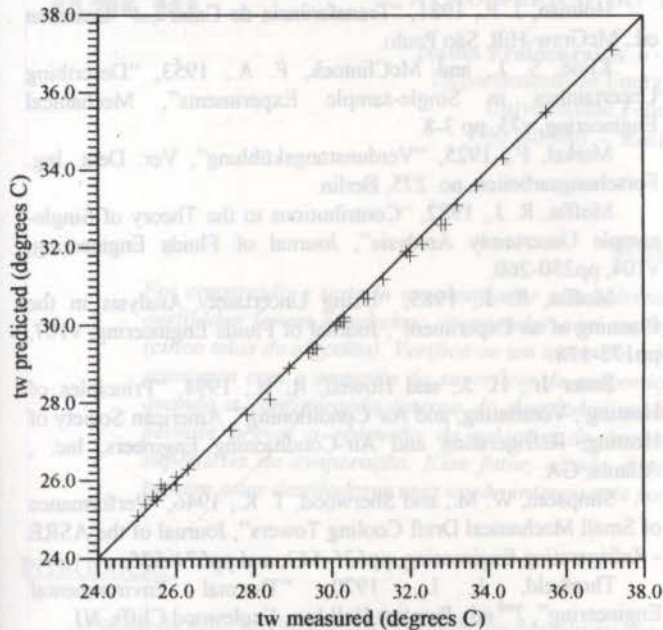


Figure 4 - Comparison between measured and predicted values for the temperature of the water at the inlet (top) of the tower.

As we may observe in Figure 4, there is a good agreement between the measured and modeled values for the temperature of the water at the top of the tower. The standard deviation of the plotted values with respect to a perfect match (line with forty five degrees slope) is 0.15°C .

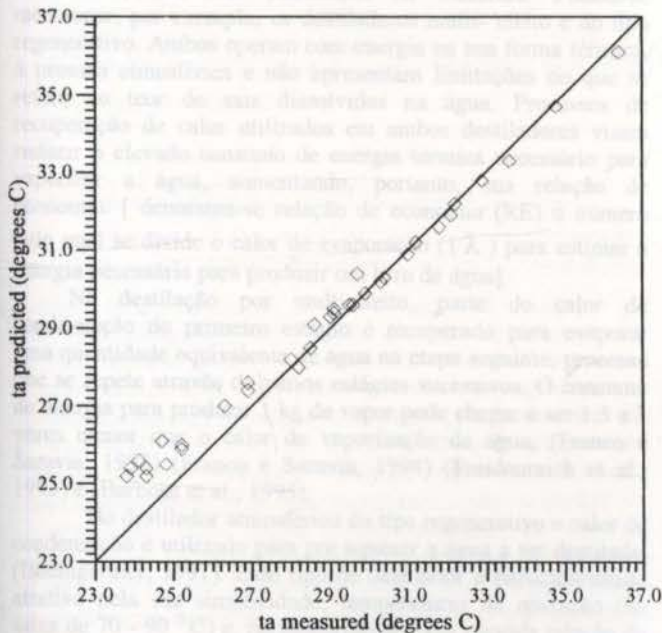


Figure 5 - Comparison between measured and predicted values for the dry bulb temperature of the air at the exit (top) of the tower.

In figure 5 above, showing the results for the dry bulb temperature of the air at the top of the tower, we detect differences that may reach 1.5°C (maximum). In this case, if we consider all the data runs, the standard deviation with respect to a perfect match is 0.65°C . While exploring possible causes for this effect, it was found that a common element was inherent to all of them: the low water flow rate. It was also found that the difference increased with decreasing water flow rate. This fact could lead to a non-uniform distribution of water along the tower cross section (low pressure in the inlet manifold), a situation that our one-dimensional model could not handle adequately.

The next step was to calculate the product $h_D A_V$. Figure 6 below shows the results for all the thirty four runs, as a function of the ratio between the air and water mass flow rates.

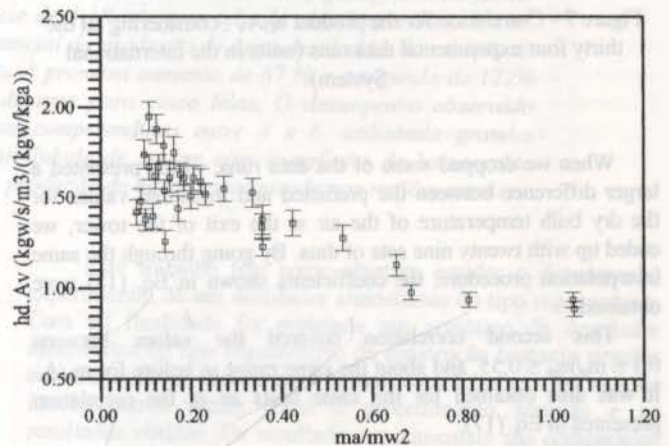


Figure 6 - Product $h_D A_V$ (mass transfer coefficient times the droplets surface-area-to-tower-volume ratio) as a function of the ratio between the air and water mass flow rates.

The uncertainty in the values of $h_D A_V$ are in the range of about 5%. Another way of presenting the same data, is by using a correlation with the following format:

$$h_D A_V = K \left(\frac{m_a}{A_t} \right)^{b_1} \left(\frac{m_a}{m_w} \right)^{b_2} \quad (16)$$

where K , b_1 and b_2 are regression coefficients originated from a least squares best fit interpolation of the experimental data. Figure 7 shows a plot of the best fit correlation for all the thirty four experimental points. In this case, the best fit interpolation provided the coefficients shown below, in Eq. (17). The following units were used: $h_D A_V$ in $\text{kg water} / \text{s} / \text{m}^3 / (\text{kg water} / \text{kg dry air})$, the water and mass flow rates in kg / s , and the tower cross section area in m^2 . The correlation portrayed as equation (17) span over the range $0.1 \leq m_a/m_w \leq 1.1$, and $0.67 \leq m_a/A_t \leq 0.99$.

$$h_D A_V = 1.012 \left(\frac{m_a}{A_t} \right)^{1.094} \left(\frac{m_a}{m_w} \right)^{-0.3192} \quad (17)$$

As we may observe in Figure 7, the advantage of presenting the data in this format is the possibility of concentrating all the information in one single curve, contrary to what we detect by looking at Figure 6.

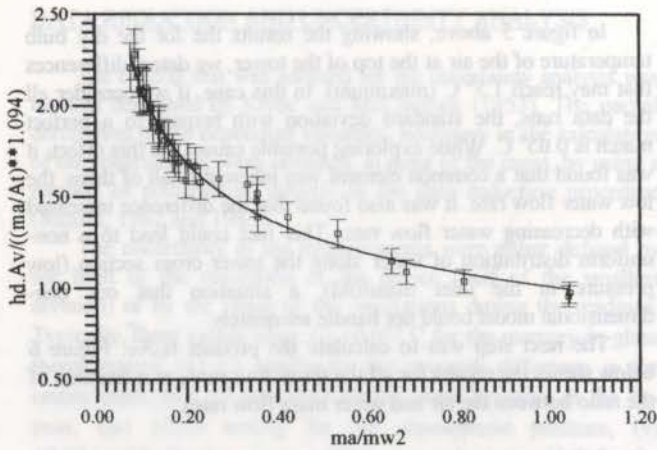


Figure 7 - Correlation for the product $h_D A_V$, considering all the thirty four experimental data runs (units in the International System).

When we dropped some of the data runs, which presented a larger difference between the predicted and measured values for the dry bulb temperature of the air at the exit of the tower, we ended up with twenty nine sets of data. By going through the same interpolation procedure, the coefficients shown in Eq. (18) were obtained.

This second correlation covered the values between $0.1 \leq m_a/m_w \leq 0.55$, and about the same range as before for m_a/A_t . It was also obtained for the same units as in the correlation presented in Eq. (17).

$$h_D A_V = 1.097 \left(\frac{m_a}{A_t} \right)^{0.9861} \left(\frac{m_a}{m_w^2} \right)^{-0.2678} \quad (18)$$

The combined uncertainty in obtaining the product $h_D A_V$ by using the above correlations, Eq. (17) and Eq. (18), resulting from the uncertainty in the calculation of $h_D A_V$ together with the uncertainty in the regression curve (considering two standard deviations), is about 8%.

CONCLUSION

In our investigation of an induced draft counter-current cooling tower, the experimental procedure was complemented by a simple numerical model for the evaluation of the properties of the air and water within the equipment. This was necessary for the calculation of the product $h_D A_V$ for the tower (between the mass transfer coefficient and the droplets surface-area-to-tower-volume ratio). Before its use, the model was experimentally validated. Two correlations were presented, for the product $h_D A_V$, covering different conditions of water and air mass flow rates.

Although the main task of the model in this work was to calculate the properties for the air and water inside the tower, when all the conditions at the inlet and exit are known, it could be easily adapted and used for the prediction of the tower behavior in other situations of practical interest.

REFERENCES

- Bajpai, A. C., and Calus, I. M., 1978, "Numerical Methods for Engineers and Scientists", John Wiley & Sons, 1st ed., New York.
- Holman, J. P., 1981, "Transferência de Calor", 1st Brazilian ed., McGraw-Hill, São Paulo.
- Kline, S. J., and McClintock, F. A., 1953, "Describing Uncertainties in Single-sample Experiments", Mechanical Engineering, v75, pp 3-8.
- Merkel, F., 1925, "Verdunstungskühlung", Ver. Deut. Ing. Forschungsarbeiten, no. 275, Berlin.
- Moffat, R. J., 1982, "Contributions to the Theory of Single-sample Uncertainty Analysis", Journal of Fluids Engineering, v104, pp250-260.
- Moffat, R. J., 1985, "Using Uncertainty Analysis in the Planning of an Experiment", Journal of Fluids Engineering, v107, pp173-178.
- Sauer Jr., H. J., and Howell, R. H., 1994, "Principles of Heating, Ventilating, and Air Conditioning", American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers, Inc., Atlanta, GA.
- Simpson, W. M., and Sherwood, T. K., 1946, "Performance of Small Mechanical Draft Cooling Towers", Journal of the ASRE - Refrigerating Engineering, pp535-543, and pp574-575.
- Threlkeld, J. L., 1970, "Thermal Environmental Engineering", 2nd ed., Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, NJ.
- Walker, W. H., Lewis, W. K., and McAdams, W. H., 1923, "Principles of Chemical Engineering", McGraw Hill Book Co., 1st ed., New York.



DESEMPENHO EXPERIMENTAL DE UM DESTILADOR DE ÁGUA ATMOSFÉRICO DO TIPO REGENERATIVO

Naum Fraidenraich e Elielza M. de S. Barbosa
Departamento de Energia Nuclear - Grupo FAE
Universidade Federal de Pernambuco
50740 540 - Recife - PE - BRASIL



SUMÁRIO

Foi construído e testado um destilador atmosférico do tipo regenerativo. Duas configurações internas do destilador foram estudadas: evaporador com superfície de 1,18 m² (uma tela de algodão) e com 5,9 m² (cinco telas de algodão). Verifica-se um aumento substancial da produção de água destilada e da relação de economia com o aumento da superfície de evaporação. A primeira aumenta de 87 % e a segunda de 122% quando a configuração interna do destilador muda de uma para cinco telas. O desempenho observado permite prever a obtenção de relações de economia compreendidas entre 4 e 6, utilizando grandes superfícies de evaporação. Esse fator, aliado à possibilidade de contar com superfícies de baixo custo tornam estes destiladores uma opção interessante para produção de água dessalinizada nas regiões rurais.

INTRODUÇÃO

O custo da água produzida nos processos de dessalinização que utilizam combustíveis convencionais, depende fortemente do rendimento energético do equipamento.

No caso da destilação solar simples, o rendimento energético e a produtividade são bastantes baixos, requerem da ordem de 1200 Kcal para produzir 1 Kg de água destilada e produzem, em média, 3,5 l/m²/dia. A baixa produtividade constitui, sem dúvida, uma de suas maiores limitações. Nesses destiladores o custo provém necessariamente do custo do equipamento.

Trabalhos sobre outros tipos de destiladores, de melhor rendimento energético e grande simplicidade do ponto de vista construtivo, têm sido publicados na literatura. Podem-se mencionar, por exemplo, os destiladores multi-efeito e do tipo regenerativo. Ambos operam com energia na sua forma térmica, à pressão atmosférica e não apresentam limitações no que se refere ao teor de sais dissolvidos na água. Processos de recuperação de calor utilizados em ambos destiladores visam reduzir o elevado consumo de energia térmica necessário para vaporizar a água, aumentando, portanto, sua relação de economia. [denomina-se relação de economia (RE) o número pelo qual se divide o calor de evaporação (1λ) para estimar a energia necessária para produzir um litro de água].

Na destilação por multi-efeito, parte do calor de condensação do primeiro estágio é recuperado para evaporar uma quantidade equivalente de água na etapa seguinte, processo que se repete através de vários estágios sucessivos. O consumo de energia para produzir 1 kg de vapor pode chegar a ser 1,5 a 2 vezes menor que o calor de vaporização da água, (Franco e Saravia, 1993) (Franco e Saravia, 1994) (Fraidenraich et al., 1993) e (Barbosa et al., 1995).

No destilador atmosférico do tipo regenerativo o calor de condensação é utilizado para pre aquecer a água a ser destilada, (Baumgartner, 1991). Esse tipo de destilador é particularmente atrativo pela sua simplicidade, temperaturas de operação (na faixa de 70 - 90 °C) e, particularmente, pela elevada relação de economia (RE), quando comparado com a destilador solar convencional e o destilador tipo multiefeito. Podemos mencionar, como exemplo, valores de RE igual a 6 obtidos por Baumgartner et al. (1991). No entanto, ainda são poucos os trabalhos com resultados experimentais publicados na literatura sobre esse tipo de destilador.

Este trabalho tem como objetivo estudar o desempenho experimental de um destilador atmosférico do tipo regenerativo. Com tal finalidade foi projetado um protótipo de destilador atmosférico do tipo regenerativo de construção bastante simples e de baixo custo. Apresentam-se suas características físicas e de funcionamento assim como o procedimento adotado e os resultados obtidos. Os resultados experimentais são comparados com previsões teóricas.

DESCRIÇÃO DO DESTILADOR

O protótipo de destilador atmosférico do tipo regenerativo (DESREG-FAE) tem geometria retangular, é construído em madeira e revestido internamente por uma camada aderente de plástico aluminizado. Externamente é isolado com poliuretano rígido (5,0 cm). As dimensões da base são de 1,0x1,0 m² e 1,5 m de altura.

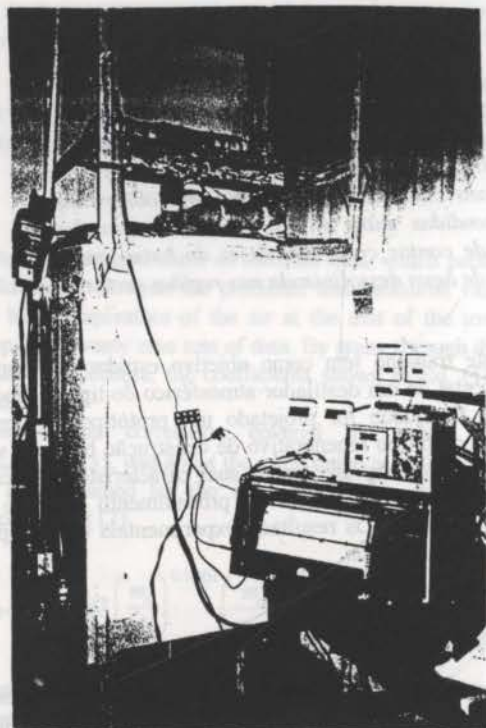
Os componentes mais importantes do destilador são as placas condensadoras e o evaporador. As duas placas condensadoras são constituídas por tubos de cobre verticais soldados em chapas do mesmo material, com uma área de condensação de 1,4 m² por chapa. O evaporador é formado por telas de algodão e sua disposição física permite a inserção de um número variável de telas dispostas verticalmente. Cada tela tem 1,18 m² de área de evaporação (Fig.1).

A alimentação da água salobra é feita através de um dosador localizado na parte superior das telas, servindo também de suporte para as mesmas. A potência necessária para o aquecimento da água é fornecida eletricamente através de duas resistências de nominal de 1500W cada uma e 220V, inseridas num tanque localizado imediatamente acima do conjunto evaporador-condensador. A simulação da fonte energética realizada com as resistências elétricas permite um adequado controle da potência entregue ao fluido salino.

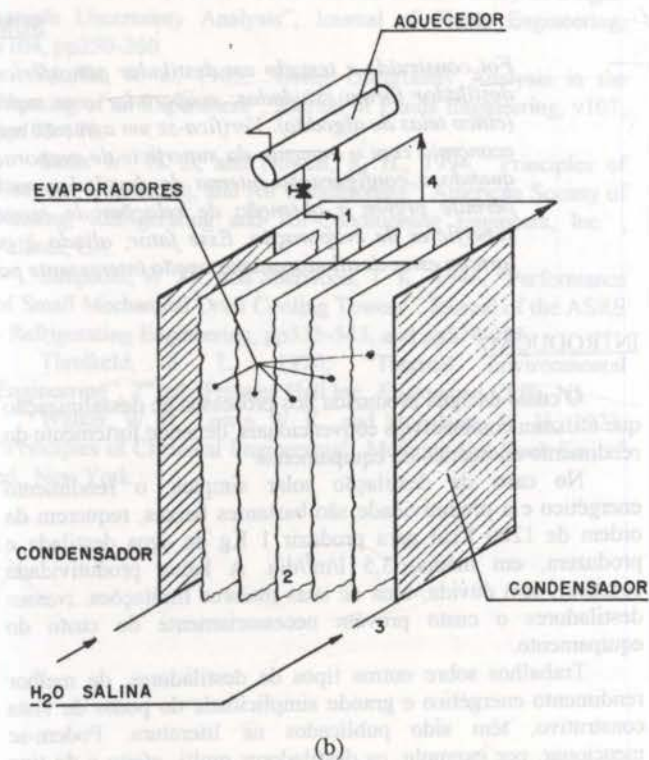
Duas configurações do conjunto evaporador-condensador foram estudadas. Na primeira o conjunto contém uma única tela de evaporação com 1,18 m² e na segunda, o evaporador é formado por cinco telas com uma total de evaporação de 5,9 m². Na Fig. 1 pode-se observar uma vista do equipamento em testes e um esquema da configuração evaporador com cinco telas de algodão.

O processo se inicia quando a água aquecida a uma temperatura (T_1) escorre ao longo das telas, vaporiza-se e ao condensar pré-aquece o fluxo principal da água a ser destilada, a qual ingressa no destilador pela região inferior com (T_3) e circular em contracorrente ao longo dos tubos refrigerando as placas condensadoras. O fluido pré-aquecido (T_4) segue em direção ao tanque de aquecimento onde recebe a energia necessária para atingir uma determinada temperatura de evaporação (T_1).

O destilado produzido assim como o rejeito são recolhidos em canaletas separadas localizadas na parte inferior do equipamento.



(a)



(b)

Figura 1 - Vista do destilador atmosférico regenerativo em testes (a) e esquema da configuração do evaporador com cinco telas (b)

ANÁLISE TEÓRICA DO DESEMPENHO DO DESTILADOR

Nesta seção será feita uma revisão de resultados analíticos relativos ao desempenho do destilador obtidos por Fraidenaich et al., (1995)

Relação de Economia. A relação de custo-benefício energético de um destilador pode ser medida pela relação de economia, **RE**. Este parâmetro mede a potência térmica na forma de água destilada ($\dot{m}\lambda$) por unidade de potência térmica fornecida ao fluxo de água salina (P_{tf}); \dot{m} , representa a taxa de produção de água destilada e λ o calor latente de evaporação.

$$RE = \frac{\dot{m}\lambda}{P_{tf}} \quad (1)$$

Fraidenaich, et al., (1995), analisam um destilador ideal (sem perdas) e mostram que RE pode ser escrito como:

$$RE = \frac{\bar{h}_{ev}}{\bar{h}_t} N_u \quad (2)$$

onde \bar{h}_{ev} e \bar{h}_t são os valores médios, ao longo do evaporador, dos coeficientes evaporativo e total de transferência de calor entre evaporador e condensador. N_u é o número de unidades de transferência de calor, dado por

$$N_u = \frac{\bar{h}_t A}{G C_p} \quad (3)$$

O símbolo A expressa a área de transferência de calor do evaporador, \dot{G} o fluxo de água salina que circula pelo destilador e C_p o calor específico da água.

A partir das Eqs. (2) e (3) podem ser feitas algumas considerações de interesse sobre o custo da água destilada. Este parâmetro depende fortemente do custo operacional do destilador que por sua vez, guarda relação inversa com a relação de economia, RE. Elevadas relações de economia requerem números N_u elevados (Eq.(2)), ou, para uma dada área de transferência de calor A, valores reduzidos do fluxo de água, \dot{G} . Por outro lado, a redução do fluxo de água está limitada pelo processo de transferência de calor entre evaporador e condensador que tende a ser menos efetiva na medida que o fluxo diminui. Isto sugeri, portanto, a necessidade de se estabelecer um valor de compromisso para o parâmetro \dot{G} .

Parâmetros Característicos do Destilador. As temperaturas que determinam o funcionamento do destilador, assim como as temperaturas das fontes quente e fria do ciclo termodinâmico do equipamento estão mostradas na Fig. 2.

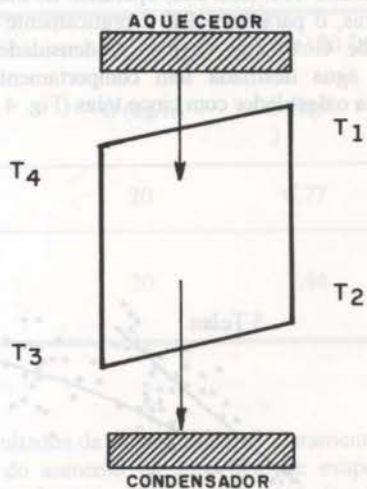


Figura 2 - Temperaturas representativas do ciclo termodinâmico do destilador.

As grandezas físicas que caracterizam o comportamento do destilador como a relação de economia, a densidade de taxa de produção de destilado, a densidade de potência térmica e a densidade de vazão mássica de água salina são determinadas pela diferença de temperatura entre evaporador e condensador (ΔT_{1-4}) e a diferença de temperatura ao longo do evaporador (ΔT_{1-2}), de acordo com as expressões que seguem (Fraidenraich, 1995). (o termo densidade indica que a grandeza física é calculada por unidade de área do evaporador):

Densidade da taxa de produção de água destilada

$$\frac{\dot{m}}{A} = \frac{\bar{h}_{ev} \Delta T_{1-4}}{\lambda} \quad (4)$$

Relação de economia

$$RE = \frac{\bar{h}_{ev} \Delta T_{1-4}}{h_t \Delta T_{1-2}} \quad (5)$$

Densidade de potência térmica

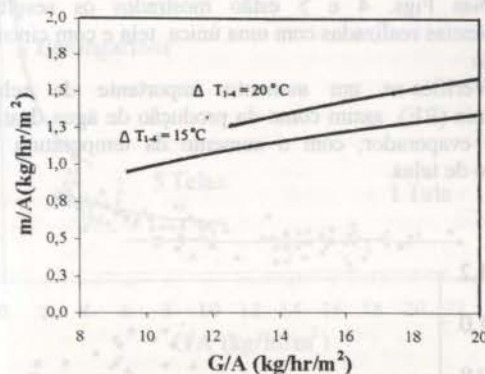
$$\frac{\dot{Q}}{A} = \frac{\bar{h}_t (\Delta T_{1-4})^2}{\Delta T_{1-2}} \quad (6)$$

Densidade de vazão mássica de água salina

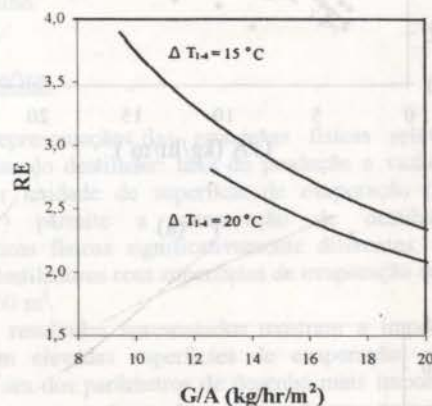
$$\frac{\dot{G}}{A} = \frac{\bar{h}_t \Delta T_{1-4}}{C_p \Delta T_{1-2}} \quad (7)$$

Cabe notar que os coeficientes \bar{h}_{ev} e \bar{h}_t também são função das diferenças ΔT_{1-4} e ΔT_{1-2} .

Valores teóricos da densidade da taxa de produção de água destilada e da relação de economia em função da densidade de vazão mássica de água salina estão representadas na Fig.3, para o caso em que $T_1 = 90^\circ\text{C}$.



(a)



(b)

Figura 3 - Variação de \dot{m}/A (a) e variação de RE (b), com a densidade de vazão de água salina, $T_1 = 90^\circ\text{C}$.

PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

O procedimento experimental adotado envolveu dois conjuntos de testes relativos as duas configurações de evaporador: com uma e com cinco telas. A relação entre a superfície de evaporação e a de condensação é igual a 0,84, no primeiro caso, e igual a 4,21 no segundo.

Objetivando-se estudar o desempenho do destilador, expresso pelos dois parâmetros fundamentais: quantidade de destilado produzido (\dot{m}) e relação de economia (RE), em função da relação entre as áreas de evaporação e condensação e da vazão do fluxo de entrada da água salobra, os testes foram efetuados em dois intervalos de temperatura de evaporação ($T_4 = 70$ a 80°C) e ($T_4 = 80$ a 90°C).

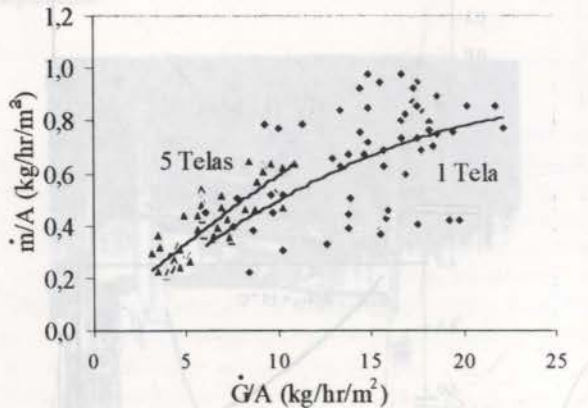
A variação das temperaturas foi acompanhada através de termopares de cobre-constantan distribuídos ao longo do evaporador, do condensador, nas entradas e saídas dos fluxos de água salobra e doce e no tanque de aquecimento.

O destilado produzido foi recolhido e medido em intervalos de 30 minutos, conjuntamente com a vazão do fluxo de alimentação. Finalmente, a monitoração da potência elétrica permite determinar a eficiência de aquecimento do fluxo de água salobra.

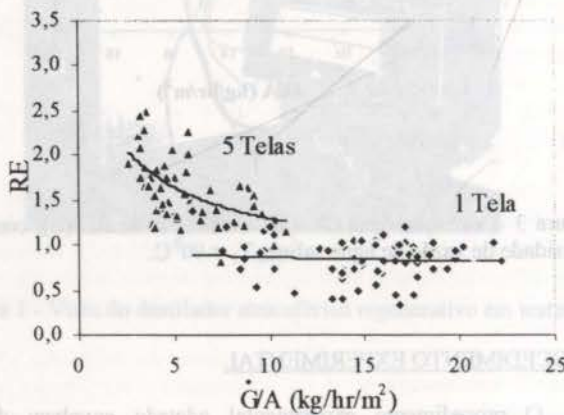
RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Nas Figs. 4 e 5 estão mostrados os resultados de experiências realizadas com uma única tela e com cinco telas de algodão.

Verifica-se um aumento importante da relação de economia (RE), assim como da produção de água destilada por m^2 de evaporador, com o aumento da temperatura T_1 e do número de telas.



(a)



(b)

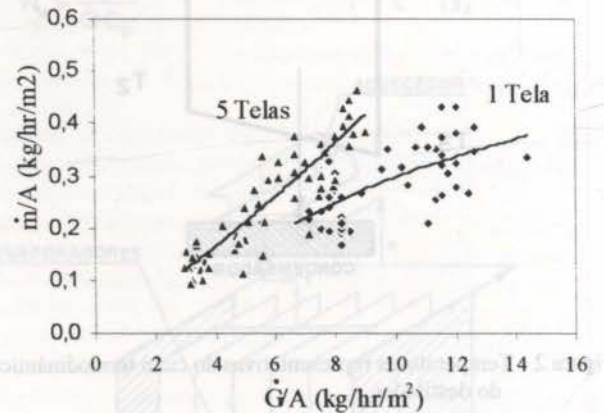
Figura 4 - (a) Densidade da taxa de produção de água destilada e (b) Relação de economia. O destilador opera com uma ou com cinco telas. $T_1 = 80-90^\circ C$.

Quando o destilador opera com cinco telas e a temperatura T_1 se encontra no intervalo de 80 a $90^\circ C$, observam-se valores máximos de RE entre 2 e 2,5, para valores de G/A da ordem de $2,5 \text{ kg/h/m}^2$ (Fig. 4 (a)). O comportamento de RE em função de G/A é similar as previsões da análise teórica, particularmente no que se refere ao aumento desta relação quando a densidade da vazão diminui (G/A). No entanto, os valores experimentais de RE são menores que os previstos teoricamente.

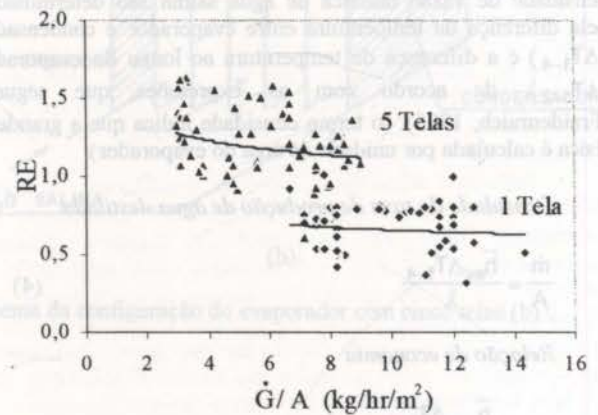
A densidade da taxa de produção de água destilada aumenta com a densidade da vazão, atingindo valores da ordem de $0,60 \text{ kg/h/m}^2$ para G/A igual a 10 kg/h/m^2 (Fig. 4 (a)). Nesta região de trabalho (G/A variando no intervalo de 3 a 11 kg/h/m^2), verifica-se que a relação entre densidade da taxa de

produção de água destilada e densidade da vazão de água salina varia entre 5,7 e 7,4%. As previsões teóricas apresentam resultados entre 8,5 e 10 % (Fraidenraich, 1995).

No destilador com uma tela, operando no mesmo intervalo de temperaturas, o parâmetro RE é praticamente independente dos valores de G/A (Fig. 4 (b)). A densidade da taxa de produção de água destilada tem comportamento similar ao observado para o destilador com cinco telas (Fig. 4 (a)).



(a)



(b)

Figura 5 - (a) Densidade da taxa de produção de água destilada e (b) Relação de economia. O destilador opera com uma ou com cinco telas. $T_1 = 70-80^\circ C$.

Considerações análogas às mencionadas para o intervalo de temperaturas de 80 a $90^\circ C$ podem ser feitas para o comportamento do destilador operando no intervalo de temperaturas de 70 a $80^\circ C$ (Figs. 5 (a) e 5 (b)).

O tipo de representação adotada, decorrente da análise teórica do destilador, permite uma comparação de destiladores regenerativos de dimensões diferentes. No entanto, é de interesse comparar grandezas físicas reais como taxa de produção do destilador com uma e cinco telas, em função da vazão. Na Tab. 1 são mostrados valores típicos dessas grandezas. Mostram-se também valores típicos das relações de economia.

Tabela 1 - Comparação da taxa de produção de água destilada e relação de economia para o destilador operando com uma e cinco telas.

$T_1 = 80 - 90 \text{ } ^\circ\text{C}$			
	\dot{G} (kg/h)	\dot{m} (kg/h)	RE
Uma tela	20	0,77	0,82
Cinco telas	20	1,44	1,87

Os resultados da Tab. 1 ilustram claramente os benefícios decorrentes do aumento da superfície de evaporação. Para a mesma vazão de água salina, a taxa de produção de água destilada aumenta 87% e a relação de economia 128%.

Comparação com resultados de outros autores. Pesquisas pioneiras foram desenvolvidas por Sizmann e Baumgartner (Heschl e Sizmann, 1987) e (Baumgartner et al., 1991). Estes autores desenvolveram um destilador regenerativo (denominado multi-efeito) de dois estágios com 30 m² de superfície de evaporação cada estágio (Baumgartner et al., 1991). Os resultados obtidos foram representados de acordo com o que se descreve na Seção denominada "Parâmetros Característicos do Destilador" e comparados, na Figs. 6 e 7, com os resultados deste trabalho.

Observa-se um comportamento similar entre os resultados de Baumgartner e os resultados deste trabalho, para a densidade da taxa de produção. Os primeiros se localizam numa região de menores valores da densidade da vazão, porém acompanham a tendência dos resultados experimentais obtidos com a configuração de cinco telas.

A relação de economia obtida por Baumgartner apresenta um crescimento acentuado com a redução da densidade de vazão e um comportamento análogo, mas que sugere valores numéricos superiores extrapolado para as densidades de vazão utilizadas neste trabalho (Fig 7).

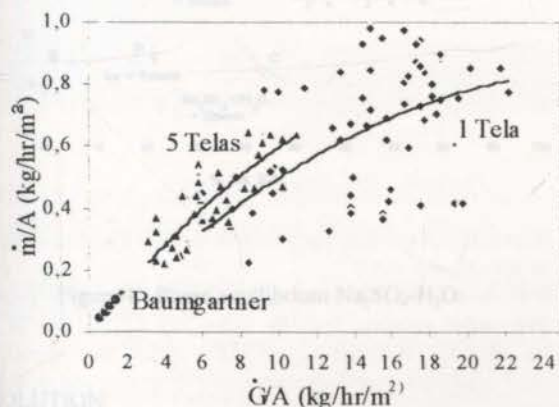


Figura 6. Comparação do resultados correspondentes à taxa de produção (\dot{m}/A) obtidos por Baumgartner (1991) e os autores deste trabalho.

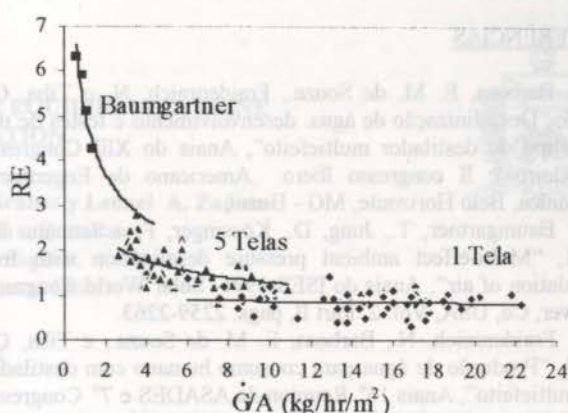


Figura 7. Comparação do resultados correspondentes à relação de economia (RE) obtidos por Baumgartner (1991) e os autores deste trabalho.

CONCLUSÕES

A representação das grandezas físicas relevantes ao desempenho do destilador: taxa de produção e vazão de água salina, por unidade de superfície de evaporação (densidade superficial) permite a comparação de destiladores de características físicas significativamente diferentes, como por exemplo destiladores com superfícies de evaporação de 1,18 m², 5,9 m² e 60 m².

Os resultados apresentados mostram a importância de contar com elevadas superfícies de evaporação, sendo esta dimensão um dos parâmetros de desenho mais importantes dos destiladores regenerativos. A passagem de uma para cinco telas permite elevar substancialmente a relação de economia (128%).

Confirmam-se as previsões teóricas do aumento da relação de economia com a redução da densidade de vazão. Este resultado pode ser obtido mediante o aumento da superfície de evaporação ou redução da vazão. Este último recurso tem limites bastante claros, no que se refere ao processo de troca de calor, que tende a ser menos eficiente na medida que a vazão diminui.

Com relação ao aumento da superfície de evaporação, cobram importância as pesquisas sobre materiais de propriedade superficiais adequadas, boa resistência à passagem de água salina e baixo custo.

O destilador estudado permite prever, utilizando maiores superfícies de evaporação, a obtenção de relações de economia da ordem de 5 ou 6, desempenho este que viabilizaria sua utilização para produção de água potável a preços comparáveis aos de outros desalinizadores que requerem energia elétrica para sua operação. Sendo um equipamento que requer de energia térmica, pode ser operado a partir de energia solar, resíduos de biomassa como bagaço, madeira ou eventualmente biogás.

As previsões teóricas da relação de economia (RE) são, de maneira geral, superiores aos valores obtidos experimentalmente.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem as contribuições dos técnicos Rinaldo Oliveira Melo, na execução dos ensaios; José Martiniano Aguiar e Marcelo Luiz Ferreira na construção do destilador. O projeto de pesquisa em referência conta com o apoio financeiro da FACEPE

REFERÊNCIAS

Barbosa, E. M. de Souza, Fraidenaich, N. e Tiba, C., 1995, "Dessalinização de água: desenvolvimento e testes de um protótipo de destilador multiefeito", Anais do XIII Congresso Brasileiro e II congresso Ibero Americano de Engenharia Mecânica, Belo Horizonte, MG - Brasil.

Baumgartner, T., Jung, D., Kössinger, F. e Sizmann R., 1991, "Multi-effect ambient pressure desalination with free circulation of air", Anais do ISES 1991- Solar World Congress, Denver, Co, USA, Vol. 2, Part II, pags. 2259-2263.

Fraidenaich, N., Barbosa, E. M. de Souza., e Tiba, C., 1993, "Produção de água para consumo humano com destilador de multiefeito", Anais 16ª Reunion da ASADES e 7º Congresso da ALES, pp. 501-508, La Prata, Argentina.

Fraidenaich, N., Costa, G. K. e Barbosa, E. M. de S., 1995, "Desempenho de um destilador de água atmosférico do tipo regenerativo", Anais do XII Congresso e II Congresso Ibero Americano de Engenharia Mecânica, Belo Horizonte, MG-Brasil.

Franco, J. e Saravia, L., 1993, "Ensayo de un destilador atmosférico de tipo multiefeito de tamaño familiar con calentamiento a leña" Anais 16ª Reunion da ASADES e 7º Congresso da ALES, La Prata, Argentina.

Franco, J. e Saravia, L., 1994, "Destilador multietapa con calentamiento a leña". Publicado pelo Inenco, Universidade Nacional de Salta, Salta, Argentina.

Heschl, O. e Sizmann, R., 1987, "Solar sea water desalination with a high efficiency multi-effect solar still", Proceedings, ISES Solar World Congress, Hamburg, pp.2814 - 2818.

Saravia, L.R. e Franco, J., 1993. "Nuevo diseño de destilador atmosférico multieaporativo", Trabalho apresentado na Reunião da Red Iberoamericana de Engenharia para el Medio Rural, Bariloche, Argentina.

ABSTRACT A water distiller, of the regenerative type, has been built and tested. Two geometric configurations has been studied: the first one, with an evaporator surface of 1.18 m² (one cotton sheet) and a second one with a surface of 5.9 m² (5 cotton sheets). The increase of the production rate of distilled water and the performance rate of the distiller. The production rate increases by 87% and the performance rate by 122%, when the internal configuration changes from one to five cotton sheets. By using even large evaporator surfaces, performance rates between 4 and 6 can be predicted. Due to the low investment cost of the distiller and possibility of obtaining high performance rates, the cost of the water produced can then be competitive with other means of clean water production in rural areas.

destilador atmosférico de tipo regenerativo, desenvolvido e testado. Duas configurações geométricas foram estudadas: a primeira, com uma superfície de evaporador de 1,18 m² (uma folha de algodão) e a segunda, com uma superfície de 5,9 m² (cinco folhas de algodão). O aumento da taxa de produção de água destilada e da taxa de desempenho do destilador. A taxa de produção aumenta em 87% e a taxa de desempenho em 122%, quando a configuração interna muda de uma para cinco folhas de algodão. Usando-se até mesmo grandes superfícies de evaporador, taxas de desempenho entre 4 e 6 podem ser previstas. Devido ao baixo custo de investimento do destilador e à possibilidade de obtenção de altas taxas de desempenho, o custo da água produzida pode então ser competitivo com outros meios de produção de água potável em áreas rurais.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento e os testes de um protótipo de destilador atmosférico de tipo regenerativo, desenvolvido e testado. Duas configurações geométricas foram estudadas: a primeira, com uma superfície de evaporador de 1,18 m² (uma folha de algodão) e a segunda, com uma superfície de 5,9 m² (cinco folhas de algodão). O aumento da taxa de produção de água destilada e da taxa de desempenho do destilador. A taxa de produção aumenta em 87% e a taxa de desempenho em 122%, quando a configuração interna muda de uma para cinco folhas de algodão. Usando-se até mesmo grandes superfícies de evaporador, taxas de desempenho entre 4 e 6 podem ser previstas. Devido ao baixo custo de investimento do destilador e à possibilidade de obtenção de altas taxas de desempenho, o custo da água produzida pode então ser competitivo com outros meios de produção de água potável em áreas rurais.



Figura 1 - Taxa de produção de água destilada em função da taxa de desempenho do destilador. Os dados foram obtidos durante os testes realizados com o protótipo de destilador atmosférico de tipo regenerativo desenvolvido e testado.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento e os testes de um protótipo de destilador atmosférico de tipo regenerativo, desenvolvido e testado. Duas configurações geométricas foram estudadas: a primeira, com uma superfície de evaporador de 1,18 m² (uma folha de algodão) e a segunda, com uma superfície de 5,9 m² (cinco folhas de algodão). O aumento da taxa de produção de água destilada e da taxa de desempenho do destilador. A taxa de produção aumenta em 87% e a taxa de desempenho em 122%, quando a configuração interna muda de uma para cinco folhas de algodão. Usando-se até mesmo grandes superfícies de evaporador, taxas de desempenho entre 4 e 6 podem ser previstas. Devido ao baixo custo de investimento do destilador e à possibilidade de obtenção de altas taxas de desempenho, o custo da água produzida pode então ser competitivo com outros meios de produção de água potável em áreas rurais.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento e os testes de um protótipo de destilador atmosférico de tipo regenerativo, desenvolvido e testado. Duas configurações geométricas foram estudadas: a primeira, com uma superfície de evaporador de 1,18 m² (uma folha de algodão) e a segunda, com uma superfície de 5,9 m² (cinco folhas de algodão). O aumento da taxa de produção de água destilada e da taxa de desempenho do destilador. A taxa de produção aumenta em 87% e a taxa de desempenho em 122%, quando a configuração interna muda de uma para cinco folhas de algodão. Usando-se até mesmo grandes superfícies de evaporador, taxas de desempenho entre 4 e 6 podem ser previstas. Devido ao baixo custo de investimento do destilador e à possibilidade de obtenção de altas taxas de desempenho, o custo da água produzida pode então ser competitivo com outros meios de produção de água potável em áreas rurais.



Figura 2 - Taxa de produção de água destilada em função da taxa de desempenho do destilador. Os dados foram obtidos durante os testes realizados com o protótipo de destilador atmosférico de tipo regenerativo desenvolvido e testado.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento e os testes de um protótipo de destilador atmosférico de tipo regenerativo, desenvolvido e testado. Duas configurações geométricas foram estudadas: a primeira, com uma superfície de evaporador de 1,18 m² (uma folha de algodão) e a segunda, com uma superfície de 5,9 m² (cinco folhas de algodão). O aumento da taxa de produção de água destilada e da taxa de desempenho do destilador. A taxa de produção aumenta em 87% e a taxa de desempenho em 122%, quando a configuração interna muda de uma para cinco folhas de algodão. Usando-se até mesmo grandes superfícies de evaporador, taxas de desempenho entre 4 e 6 podem ser previstas. Devido ao baixo custo de investimento do destilador e à possibilidade de obtenção de altas taxas de desempenho, o custo da água produzida pode então ser competitivo com outros meios de produção de água potável em áreas rurais.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento e os testes de um protótipo de destilador atmosférico de tipo regenerativo, desenvolvido e testado. Duas configurações geométricas foram estudadas: a primeira, com uma superfície de evaporador de 1,18 m² (uma folha de algodão) e a segunda, com uma superfície de 5,9 m² (cinco folhas de algodão). O aumento da taxa de produção de água destilada e da taxa de desempenho do destilador. A taxa de produção aumenta em 87% e a taxa de desempenho em 122%, quando a configuração interna muda de uma para cinco folhas de algodão. Usando-se até mesmo grandes superfícies de evaporador, taxas de desempenho entre 4 e 6 podem ser previstas. Devido ao baixo custo de investimento do destilador e à possibilidade de obtenção de altas taxas de desempenho, o custo da água produzida pode então ser competitivo com outros meios de produção de água potável em áreas rurais.



ENERGY BALANCES AND PHASE EQUILIBRIA IN BRINE CRYSTALLIZATION



Maria E. Taboada, Teófilo A. Graber y Leonel A. Zapata
 Departamento de Ingeniería Química.
 Universidad de Antofagasta.
 Casilla 170. Antofagasta. Chile.

SUMMARY

In an earlier article, Taboada and Graber (1994) presented a practical problem that could be solved with mass balances and phase equilibria criteria. In this work the energy balances are added to that particular problem and it is solved by using enthalpy versus concentration diagrams and steam tables along with the HSC software, (Outocumpu, 1993).

PROBLEM:

A chemical plant produces anhydrous crystals of sodium sulphate starting from a saturated aqueous solution at 25°C. For process design purposes, we have available the solubility (Hougen and Watson, 1982), (Figure 1) and the enthalpy versus concentration (Foust et al, 1990), (Figure 3) diagrams for the Na₂SO₄-H₂O binary system. Also, we have available a ternary solubility diagram (Seidell, 1965) for Na₂SO₄-NaCl-H₂O at 25°C (Figure 4) and the dilution heat data (Perry et al, 1993). From the available information, compare different process alternatives, from the energy requirements point of view, based on 1000 kg of feed solution. Compare the results obtained using the HSC software for the three process alternatives.

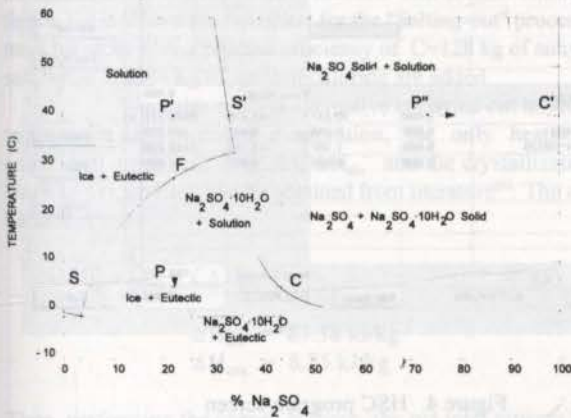


Figure 1. Phase equilibrium Na₂SO₄-H₂O

SOLUTION:

Alternative 1. Cooling and drying crystals:

In this alternative it is suggested cooling the solution from 25 to 5°C, obtaining sodium sulphate crystals decahydrated

and then water evaporation by holding the temperature until anhydrous crystals of sodium sulphate are obtained. In figure 1, point F denotes the feed solution at 25°C. Point P represents the solution in the crystallizer. Points S and C represent the solution and crystal (Na₂SO₄•10H₂O) respectively.

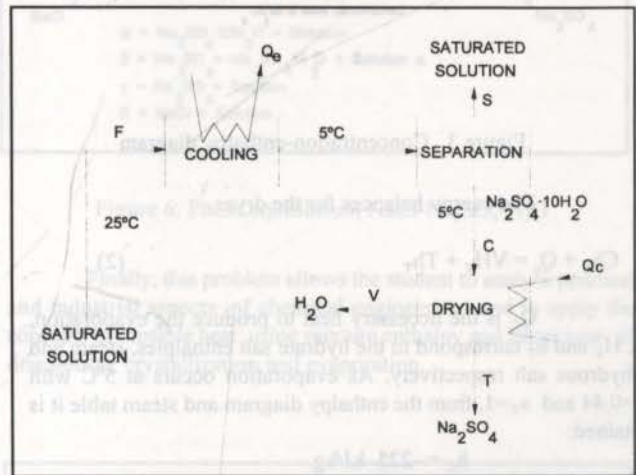


Figure 2. Flowsheet alternative 1

The mass balances gives a crystal efficiency production of 421 kg in Na₂SO₄•10H₂O, which after being dried yield 185 kg of Na₂SO₄ and 579 kg of residual solution that contains the impurities present in the mother liquor. The dryer must eliminate 236 kg of water. The overall process, proposed in this alternative, is shown in Figure 2.

To perform energy balances on the equipment, it is recommended to begin with the cooling system.

$$Fh_F = Ph_p + Q_c \tag{1}$$

Where F and P are the same and correspond to the feed mass and the crystallizer product: 1000 kg. Q_c is the cooling heat.

From the enthalpy versus concentration (Figure 3) values for h_F and h_p (feed and product enthalpies), as a function of

temperature (25°C and 5°C) and fractions in mass (x_p and $x_F = 0.22$), are obtained:

$$h_F = 70 \text{ kJ/kg}$$

$$h_p = -80 \text{ kJ/kg}$$

By replacing these values in equation (1) the cooling heat is obtained:

$$Q_c = 150\,000 \text{ kJ}$$

In the separation step, it is recovered the 421 kg of $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ without using heat. After that, this crystal mass is introduced into the dryer where 236 kg of water are evaporated.

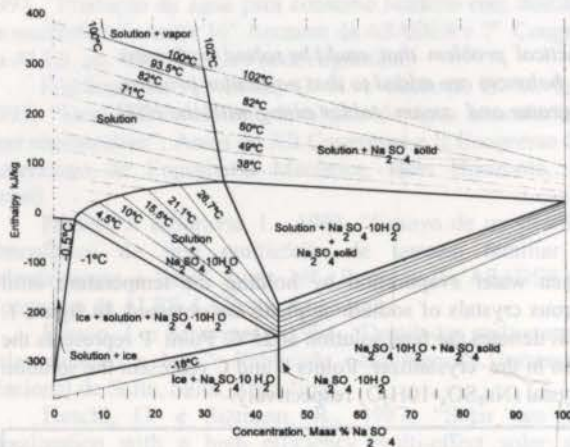


Figure 3. Concentration-enthalpy diagram

The energy balances for the dryer.

$$Ch_c + Q_c = VH_v + Th_T \quad (2)$$

Q_c is the necessary heat to produce the evaporation, h_c , H_v and h_T correspond to the hydrate salt enthalpies, steam and anhydrous salt respectively. As evaporation occurs at 5°C with $x_c=0.44$ and $x_T=1$, from the enthalpy diagram and steam table it is obtained:

$$h_c = -225 \text{ kJ/kg}$$

$$H_v = 25107 \text{ kJ/kg}$$

$$h_T = 0 \text{ kJ/kg}$$

by replacing these values in equation (2), the drying heat is obtained:

$$Q_c = 630\,070 \text{ kJ}$$

Performing a global energy balance, the total process heat is obtained:

$$Q_{NI} = 592\,561$$

In order to compare the Q_c and Q_{NI} obtained values with others alternatives, the HSC software is used. This software allows performing mass and energy balances by indicating the process input and output, its phase, temperature in °C and molar flow in kmol. The results of the energy balance for the crystallizer by cooling are shown in Figure 4, this is for the first proposed process alternative. The value is:

$$Q_c = 158\,765 \text{ kJ}$$

For the complete system, evaporated at 5°C, the net total heat required by software calculation is:

$$Q_{NI} = 526\,221 \text{ kJ}$$

When comparing the values obtained using the

enthalpy diagram with those obtained via software, it is clear the similarity between them. The differences are only a matter of inaccuracy in graph reading and the method of generating mixture enthalpies.

Alternative 2. Heating and vacuum evaporation:

In this alternative it is suggested heating the solution to 40°C, and then evaporation of 90% of the original water.

In figure 1, point F represents the feed solution that moves to the P' point because of the heat added. After evaporation, the P' point becomes P'', a mixture of residual solution S' and sodium sulphate crystals, C'.

In figure 5, it is shown the flowsheet for this alternative. The mass balance gives a product yield of 181,5 kg of anhydrous salt (C' flow).

Performing energy balance on the heater:

$$Fh_f - Ph_p + Q_c \quad (3)$$

Where h_f and h_p are the heater input and output solution enthalpies. The values for these were obtained from figure 3, with $x_F = x_p = 0.22$, then:

$$h_f = 70 \text{ kJ/kg}$$

$$h_p = 130 \text{ kJ/kg}$$

the heat of heating is then:

$$Q_c = 60\,000 \text{ kJ}$$

Performing an energy balance on the evaporator:

$$Q_v + P'h_p = P''h_p + VH_v \quad (4)$$

Heat Balance					
INPUT:		Temperature	Amount	Latent H	Total H
Species:	C	°C	kmol	MJ	MJ
1 H2O	25.000	25.000	43.233	0.000	-12395.870
2 Na2SO4(a)	25.000	25.000	1.549	0.000	-2152.805
3	25.000	25.000	0.000	0.000	0.000
OUTPUT:					Extra Heat: 0.000
1 H2O	5.000	5.000	30.237	-45.630	-8688.271
2 Na2SO4(a)	5.000	5.000	0.245	0.400	-340.070
3 Na2SO4·10H2O	5.000	5.000	1.307	-13.169	-5668.898
4	5.000	5.000	0.000	0.000	0.000
Heat Losses:					158.765
BALANCE:					0.000

Figure 4. HSC program screen

Where Q_v is the necessary heat to be added to evaporate the 90% of the original water.

In the evaporator, the enthalpies that correspond to the feed slurry, the output solution and the steam are h_p , h_p' and H_v respectively, with $x_p = 0.22$ and $x_{p'} = 0.738$, and they are obtained from figure 3 (enthalpy versus concentration diagram) and steam table. This is:

$$h_p = 130 \text{ kJ/kg}$$

$$h_p' = 90 \text{ kJ/kg}$$

$$H_v = 2\,574.4 \text{ kJ/kg}$$

Resulting the evaporation heat as followed:

$$Q_v = 1\,685\,024 \text{ kJ}$$

In the separating step there are not heat requirements, then the net total process heat is:

$$Q_{N2} = 1\,738\,600 \text{ kJ}$$

The HSC software gives as a result a heating heat of $Q = 46950 \text{ kJ}$, an evaporation heat of $Q_v = 1670\,654 \text{ kJ}$ and a total heat of $Q_{N2} = 1745255 \text{ kJ}$, all of them similar to those obtained before.

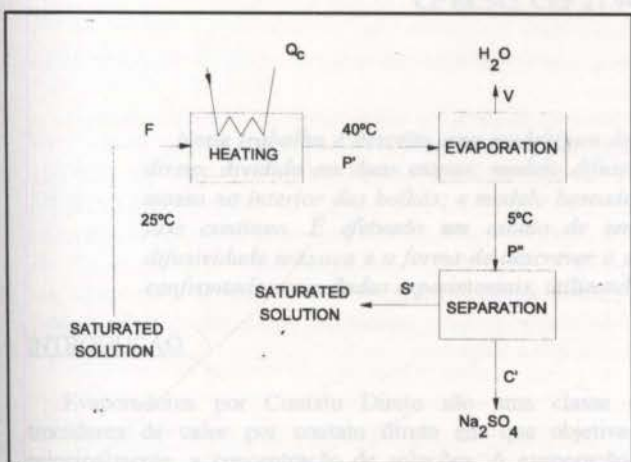


Figure 5. Flowsheet alternative 2

Alternative 3. Salting out with NaCl:

This last alternative considers the process called salting-out: the feed solution, F, is mixed with sodium chloride resulting precipitation of sodium sulphate, this is shown in the ternary diagram figure 6. Where F is the feed solution and P is the mixture that results from mixing the feed with sodium chloride. In figure 7, it is shown the flowsheet for the "Salting-out" process. The mass balances give a product efficiency of $C=128 \text{ kg}$ of anhydrous salt, when $N=234 \text{ kg}$ of sodium chloride are added.

Since this process alternative is carried out holding the temperature and without evaporation, the only heats to be considered are the dissolutions, ΔH_{dis} , and the crystallization of Na_2SO_4 , ΔH_{cris} . Both can be obtained from literature⁽⁶⁾. The energy balance results:

$$N\Delta H_{dis} + Q_{N3} = C\Delta H_{cris} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Delta H_{dis} &= 83.38 \text{ kJ/kg} \\ \Delta H_{cris} &= 8.25 \text{ kJ/kg} \end{aligned}$$

Then, performing the energy balance, the net total process heat is obtained for the present proposed alternative. This is:

$$Q_{N3} = -18454.6 \text{ kJ}$$

The negative sign indicates that it is necessary to recover heat in order to hold the temperature at 25 °C.

Using the software, the total heat to recover is

$$Q_{N3} = 16917 \text{ kJ.}$$

Again, the obtained values are in agreement, but they are not equal. This could be caused by calculation problems. For example, the values of dissolution and crystallization heats that were obtained from literature (6) consider infinite dilution in water as solvent and it is not considered the ternary mixture effect.

CONCLUDING REMARKS:

The student can compare, from the energy requirement point of view, which alternative is the less expensive. In this particular case the less expensive is the third alternative, then Alternative 1 and finally alternative 2. Alternative 3 has more heat requirements because of the heating and evaporation steps.

An other contribution is that being the first alternative the less energy demanding, because it has heat to recover from the cooling step and heat to add to the drying step, the student is introduced to the so called energetic integration.

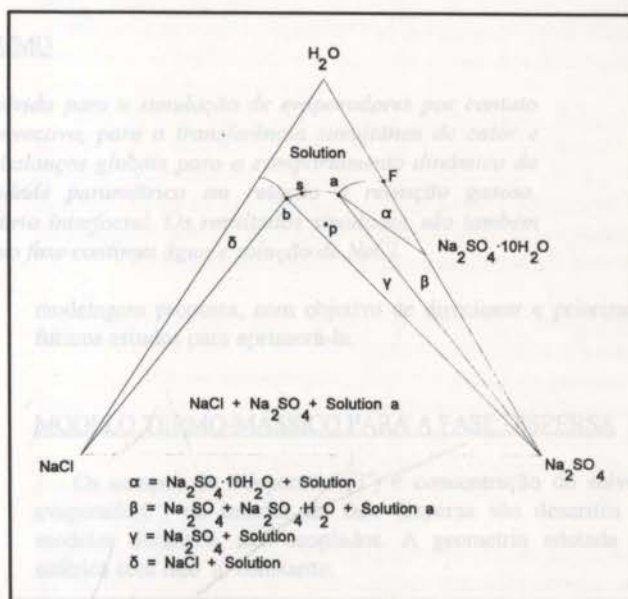


Figure 6. Phase equilibrium NaCl-Na₂SO₄-H₂O

Finally, this problem allows the student to analyse practical and industrial aspects of chemical engineering and to apply the concepts of sensible heat using mixture enthalpy and latent heat of dissolution, crystallization and evaporation.

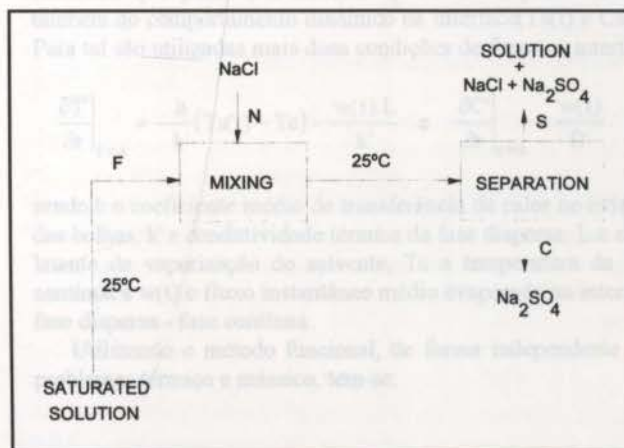


Figure 7. Flowsheet alternative 3

REFERENCES:

1.- Taboada M.E. and T.A. Graber. "Practical applications of mass balances and phase equilibria in brine crystallization". Chem. Eng. Educ., vol. 28, N° 2, (1994).
 2.- Outokumpu HSC Chemistry for Windows, Outokumpu Research (1993).
 3.- Hougen, O.A., Watson K. M. and , "Chemical Process Principles", Spanish Edition, Ed. Reverté, Barcelona, Spain (1982).
 4.- Foust A.S., Wenzel L. A., Clump C. W., Maus L. and Andersen L. B., "Principles of Unit Operations", Spanish Edition, II Edition. Ed Continental, Mexico (1990).

5.- Seidell, "Solubilities. Inorganic and Metal-Organic Compounds", IV Edition, Vol. II, 1965.
 6.- Perry R., D.Green, J. Maloney "Perry's Chemical Engineers'Handbook". McGraw-Hill. 1993.

ACKNOWLEDGEMENT:

The authors wish to thanks the financial support given by Conicyt with the Fondecyt Project number 1930347.

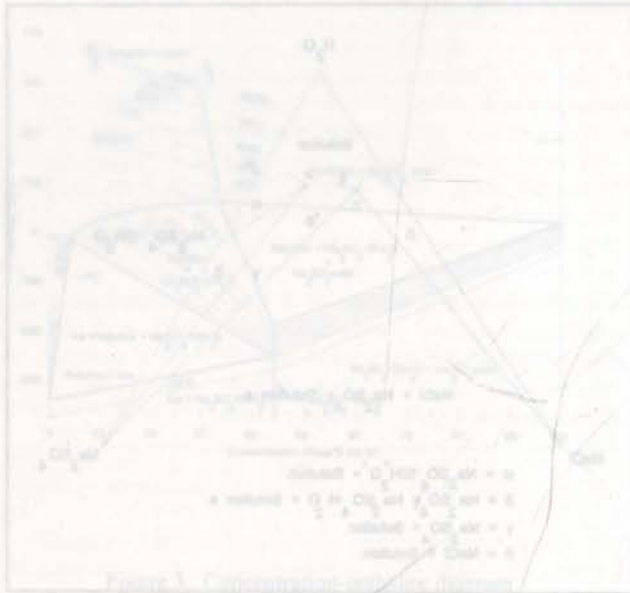


Figure 1. Phase diagram of the system.

Figure 1 shows the phase diagram of the system. The diagram illustrates the various phase regions and the boundaries between them. The axes represent composition and temperature/pressure. The diagram is a detailed representation of phase equilibria for a specific system.

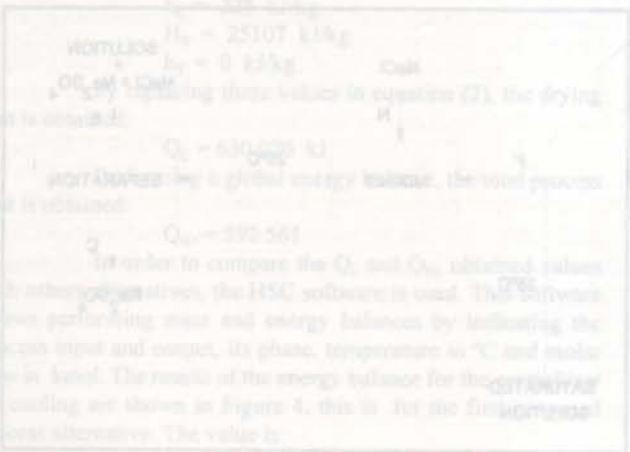


Figure 2. Flowchart of the process.

Figure 2 shows the flowchart of the process. The diagram illustrates the flow of material and energy through the system. The boxes represent units and the arrows indicate the direction of flow. The diagram is a schematic representation of a chemical process.

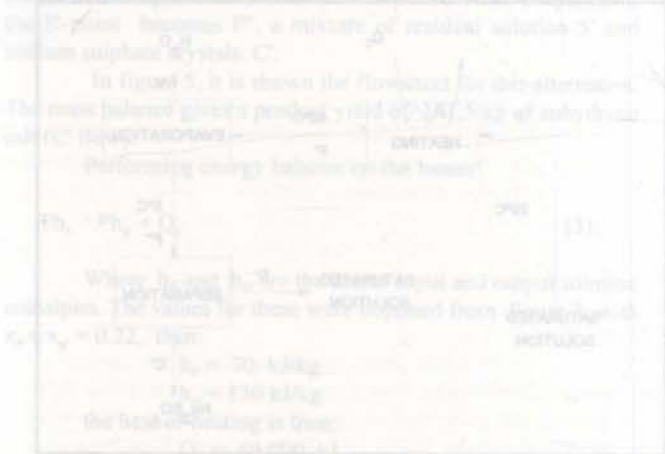


Figure 3. Flowchart alternative 2.

Alternative 3. Setting out with HCl.

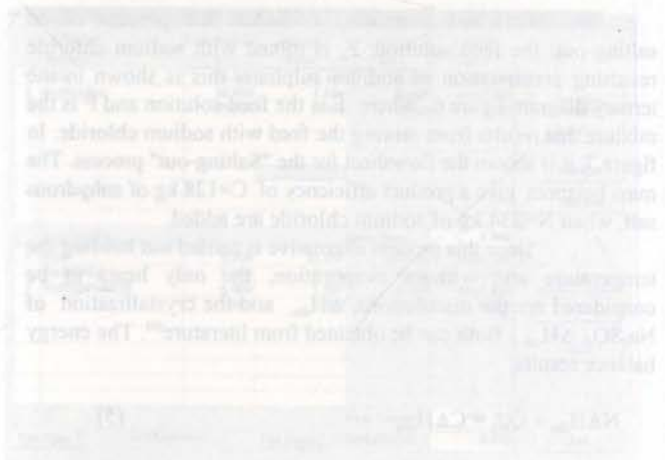


Figure 4. Flowchart alternative 3.

Figure 4 shows the flowchart alternative 3. The diagram illustrates the flow of material and energy through the system. The boxes represent units and the arrows indicate the direction of flow. The diagram is a schematic representation of a chemical process.



ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA RETENÇÃO GASOSA, DA DIFUSIVIDADE MÁSSICA E DO EQUILÍBRIO INTERFACIAL NA MODELAGEM DE PROCESSOS DE EVAPORAÇÃO POR CONTATO DIRETO



Mach Queiroz, E. e Hackenberg, C.M.

DEQ/EQ/UFRJ e PEQ/COPPE/UFRJ

CP 68.542; CEP 21.945-970; Rio de Janeiro, RJ, Brasil

RESUMO

Neste trabalho é descrita uma modelagem desenvolvida para a simulação de evaporadores por contato direto, dividida em duas etapas: modelo difusivo-convectivo, para a transferência simultânea de calor e massa no interior das bolhas; e modelo baseado em balanços globais para o comportamento dinâmico da fase contínua. É efetuado um estudo de sensibilidade paramétrica em relação à retenção gasosa, difusividade mássica e a forma de descrever o equilíbrio interfacial. Os resultados simulados são também confrontados com dados experimentais, utilizando como fase contínua água e solução de NaCl.

INTRODUÇÃO

Evaporadores por Contato Direto são uma classe dos trocadores de calor por contato direto em que objetiva-se, principalmente, a concentração de soluções. A evaporação do solvente da fase contínua ocorre em função do borbulhamento de gases quentes (fase dispersa) em um volume de solução (fase contínua). Estes equipamentos podem ser utilizados, com vantagens sobre o processo convencional, na concentração de solução corrosivas e/ou muito incrustantes.

No Laboratório de Termofluidodinâmica do PEQ/COPPE há uma linha de pesquisa que tem por objetivo o estudo do processo de Evaporação por Contato Direto, desenvolvendo uma metodologia de projeto de Evaporadores por Contato Direto, baseada na realização de simulações sucessivas.

O modelo proposto possibilita a simulação dinâmica do processo em tela, podendo ser dividido em duas etapas: modelo difusivo-convectivo, por parâmetros distribuídos, para a transferência simultânea de calor e de massa no interior da fase dispersa; e modelo baseado em balanços globais (parâmetros agrupados) para o comportamento dinâmico da fase contínua.

Esta modelagem permite avaliar a influência de diversos parâmetros na previsão do comportamento termo-mássico global destas unidades. Trabalhos anteriores realizam comparações entre os resultados das simulações e dados obtidos em unidade piloto para a temperatura média da fase contínua e altura de borbulhamento (Queiroz e Hackenberg, 1992b), utilizando como fase contínua água, onde a concordância é razoável, e solução aquosa de NaCl (Hackenberg e Queiroz, 1993), caracterizada por uma diferença marcante. São também realizadas avaliações da influência da concentração do solvente da fase contínua nos gases quentes antes do seu borbulhamento (Queiroz e Hackenberg, 1992a), que mostram não haver a necessidade de pré-secação do ar combustível em unidades que utilizam como fase dispersa gases de combustão.

Os trabalhos anteriores envolvendo confrontos teóricos-experimentais, mostram a necessidade de modificações na modelagem desenvolvida, principalmente no que se refere à previsão do desempenho de unidades concentrando soluções salinas.

O presente trabalho apresenta um estudo paramétrico da influência de parâmetros utilizados na descrição dos processos de transporte (difusividade mássica), físico-químicos (equilíbrio líquido-vapor) e hidrodinâmicos (retenção gasosa) presentes na

modelagem proposta, com objetivo de direcionar e priorizar os futuros estudos para aprimorá-la.

MODELO TERMO-MÁSSICO PARA A FASE DISPERSA

Os campos de temperatura (T) e concentração do solvente evaporado (C') no interior da fase dispersa são descritos por modelos difusivos, não acoplados. A geometria adotada é a esférica com raio a constante:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha' \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad \text{e} \quad \frac{\partial C'}{\partial t} = D' \left(\frac{\partial^2 C'}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C'}{\partial r} \right) \quad (1)$$

$$\begin{aligned} T'(r,0) &= T_0 & C'(r,0) &= C_0 & \forall r \in [0,a] ; \\ T'(0,t) &< \infty & C'(0,t) &< \infty & \forall t \geq 0 ; \\ T'(a,t) &= T_s(t) & C'(a,t) &= C_s(t) & \forall t \geq 0 \end{aligned}$$

Estas equações são resolvidas utilizando-se um método funcional que permite a determinação dos campos T e C' e também do comportamento dinâmico na interface ($T_s(t)$ e $C_s(t)$). Para tal são utilizadas mais duas condições de fluxo na interface:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=a} = -\frac{h}{k'} (T_s(t) - T_c) - \frac{w(t) \cdot L}{k'} \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial C'}{\partial r} \right|_{r=a} = \frac{w(t)}{D'} \quad (2)$$

sendo h o coeficiente médio de transferência de calor no exterior das bolhas, k' a condutividade térmica da fase dispersa, L o calor latente de vaporização do solvente, T_c a temperatura da fase contínua e $w(t)$ o fluxo instantâneo médio evaporado na interface fase dispersa - fase contínua.

Utilizando o método funcional, de forma independente nos problemas térmico e mássico, tem-se:

$$\frac{T(r,t) - T_0}{T_0} = \frac{1}{T_0(1+\lambda)} \left\{ -\frac{L}{h} \frac{dw(t)}{dt} - B \lambda F_{aux}(w,t) \right\} *$$

$$* F_t(r,t) + \frac{1}{T_0(1+\lambda)} \left[-(T_0 - T_c) - \frac{L}{h} w(0) \right] F_t(r,t) \quad (3)$$

$$C'(r,t) - C_0 = \left\{ \frac{a}{2D'} \frac{dw(t)}{dt} - \frac{\pi^2}{2a} w(t) \right\} * F_m(r,t) + (Cs(0) - C_0) \cdot F_m(r,t) \quad (4)$$

onde * representa o produto de convolução e

$$F_i(r,t) = 1 - \frac{2a}{\pi r} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi r}{a}\right) e^{-\beta_i t}$$

na qual i pode representar t ou m;

$$F_{aux}(w,t) = (T_0 - T_c) e^{-Bt} + \frac{L}{h} w(t) - \frac{LB}{h} w(t) * e^{-Bt};$$

$$\lambda = \frac{2k'}{ha}; \quad \beta_t = \frac{\alpha' \pi^2}{a^2}; \quad B = \frac{\beta_t}{1+\lambda}; \quad \beta_m = \frac{D' \pi^2}{a^2}$$

Os campos $T(r,t)$ e $C'(r,t)$ (equações (3) e (4)) são escritos em função do comportamento interfacial, que é obtido através da resolução das seguintes equações integro-diferenciais:

$$\frac{dT_s}{dt} * e^{-Bt} + \frac{T_s(t) - T_c}{\lambda} = -(T_s(t) - T_c) e^{-Bt} - \frac{aL}{2k'} w(t) \quad (5)$$

e

$$\frac{dCs}{dt} * e^{-\beta_m t} = -(Cs(0) - C_0) e^{-\beta_m t} + \frac{a}{2D'} w(t) \quad (6)$$

As equações (5) e (6) formam um sistema de equações, onde há o acoplamento dos campos térmico e mássico através do parâmetro comum $w(t)$. Outro fato importante é a necessidade de mais um vínculo, pois são três funções a serem determinadas: temperatura superficial (T_s); concentração do solvente na fase vapor na interface (C_s) e fluxo evaporado (w). Como terceira relação utiliza-se a condição de equilíbrio termodinâmico interfacial. Considerando água pura e comportamento ideal na fase vapor, a partir da equação de Antoine, pode-se escrever (Queiroz, 1990):

$$C_s[T_s] = \frac{0,28857}{T_s} \exp\left[18,344 - \frac{3841,147}{T_s - 45}\right] \quad (7)$$

Através da linearização da expressão (7), representada por:

$$C_s[T_s] = (T_s - T_r) \cdot A_{li} + C_s[T_r] \quad (8)$$

onde A_{li} é a constante de linearização: $A_{li} = \left. \frac{dC_s}{dT_s} \right|_{T_r}$ e T_r a temperatura de referência para a linearização, é possível chegar-se a uma solução analítica para o sistema formado pelas equações (5), (6) e (8). No caso específico do fluxo evaporado tem-se:

$$w(t) = \frac{w(0)}{p'' - p'} \left[(p'' - \Pi) e^{-p'' t} - (p' - \Pi) e^{-p' t} \right] + \frac{T_s(0) - T_c}{p'' - p'} \frac{B}{\Gamma} \left[e^{-p'' t} - e^{-p' t} \right] \quad (9)$$

$$\text{onde: } T_s(0) = \frac{T_c + \lambda T_0}{1 + \lambda} - \frac{L}{h(1 + \lambda)} w(0)$$

$$w(0) = \frac{C_s[T_r] - C_0 + \left(\frac{T_c + \lambda T_0}{1 + \lambda} - T_r \right)}{\frac{a}{2D'} + \frac{A_{li} \cdot L}{h(1 + \lambda)}};$$

$$\Pi = \frac{(\pi^2 h + 2 A_{li} \cdot a \cdot L \cdot B) D' (1 + \lambda)}{(2 A_{li} \cdot L \cdot D' + h \cdot a (1 + \lambda)) a};$$

$$\Gamma = \frac{h \cdot a (1 + \lambda) + 2 A_{li} \cdot L \cdot D'}{2 A_{li} \cdot h \cdot D' (1 + \lambda)};$$

p' e p'' são os módulos das raízes da equação característica do sistema.

Maiores detalhes do desenvolvimento desta modelagem e solução das equações são apresentados em Queiroz, 1990.

Cabe aqui ressaltar que o domínio do tempo no qual este formalismo é aplicado está limitado ao tempo de residência (τ) de cada bolha no processo, tipicamente da ordem de grandeza de segundos. Este fato, comparado às características do comportamento dinâmico global das unidades de evaporação por contato direto, permite considerar, neste modelo para a fase dispersa, que a temperatura da fase contínua (T_c) é constante.

MODELO DINÂMICO GLOBAL PARA O EVAPORADOR

O comportamento dinâmico da unidade é obtido através de balanços globais de massa e energia em seu interior, onde se considera a fase dispersa (gases quentes) imiscível na fase contínua (solução), despreza-se o arraste e as perdas térmicas para o ambiente, e a operação realizada em semi-batelada (alimentação contínua somente da fase dispersa):

Balanco global de massa:

$$\frac{d}{dt}(\rho \cdot V_c) = -ma \quad (10)$$

Balanco de massa do soluto:

$$\frac{d}{dt}(\rho \cdot V_c \cdot x_s) = 0 \quad (11)$$

Balanco de energia na fase contínua:

$$\frac{d}{dt}(\rho \cdot V_c \cdot cp \cdot T_c) = mg \cdot cpg \cdot (\bar{T}_{gb} - \bar{T}(\tau)) - ma \cdot (cp \cdot (\bar{T}_s - T_c) + L + cpa \cdot (\bar{T}(\tau) - \bar{T}_s)) + Q_d \quad (12)$$

onde ρ e cp são a densidade e o calor específico da fase contínua, V_c é o volume de fase contínua no interior do evaporador, mg e cpg são a vazão mássica e o calor específico dos gases borbulhados e cpa é o calor específico médio da fase dispersa. As temperaturas médias da interface ao longo da ascensão das bolhas (\bar{T}_s) e da bolha ao aflorar da fase contínua ($\bar{T}(\tau)$) são determinadas a partir do conhecimento do comportamento interfacial, determinado na primeira etapa da modelagem:

$$\bar{T}_s = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} T_s(t) dt \quad (13)$$

$$\bar{T}(\tau) = \frac{1}{V_c} \int_0^{\tau} T'(r, \tau) dV_c \quad (14)$$

A fração mássica de soluto na fase contínua é representada por x_s e Q_d é a taxa de transferência de calor através do sistema de distribuição dos gases, antes do seu borbulhamento. Esta taxa é importante em unidades que utilizam gases de combustão como fase dispersa e o seu equacionamento é apresentado em Queiroz e Hackenberg (1992a). A previsão da temperatura média dos gases borbulhados (T_{gb}) também é determinada a partir desta modelagem do comportamento térmico no sistema de distribuição dos gases.

A modelagem enfocando as bolhas individualmente, adotada na primeira etapa, é adaptada ao comportamento global da unidade, nesta segunda etapa da modelagem, através da vazão mássica evaporada (ma):

$$ma = Ab \cdot \bar{w} \cdot \tau \left(mg / (\rho_g \cdot V) \right) \quad (15)$$

onde Ab e V são a área superficial e o volume de cada bolha, ρ_g é a densidade do gás borbulhado, determinada a \bar{T}_{gb} , e \bar{w} é o valor médio, em relação ao tempo de residência das bolhas no processo (τ), do fluxo evaporado na interface:

$$\bar{w} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} w(t) dt \quad (16)$$

O conjunto das equações representativas dos balanços globais ((10), (11) e (12)) forma um sistema de equações diferenciais ordinárias não-lineares, integrado numericamente através do método de Runge-Kutta explícito de 6º ordem, após a substituição dos parâmetros médios (equações (13), (14) e (16)) originados no modelo para a fase dispersa.

O volume das bolhas (V) é calculado pela expressão de Davidson & Schüller, segundo recomendação de Andrade e Hackenberg (1986):

$$V = 1,138 \left(mg / (\rho_g \cdot n \cdot g^2) \right)^{6/5} \quad (17)$$

onde n é o número de orifícios no sistema de distribuição dos gases e g é a aceleração da gravidade.

A relação entre o volume de fase contínua (V_c) no interior do evaporador, parâmetro de difícil monitoramento experimental, e a altura de borbulhamento (H), de fácil medição e diretamente relacionada ao tempo de residência das bolhas no processo, é:

$$V_c = \pi \cdot \phi^2 \cdot (H(1-\epsilon) + Hsd) / 4 \quad (18)$$

onde ϕ é o diâmetro do corpo do evaporador, Hsd é a altura do sistema de distribuição dos gases (considera-se que não há bolhas no espaço entre o fundo do corpo do evaporador e o plano onde estão os orifícios do sistema de distribuição) e ϵ é a retenção gasosa.

ESTUDO DE SENSIBILIDADE PARAMÉTRICA

O estudo de sensibilidade paramétrica será realizado através de comparações de simulações prevendo o comportamento

dinâmico da temperatura da fase contínua (T_c) e da altura de borbulhamento (H), onde são alimentados valores distintos para os parâmetros analisados.

Este estudo é efetuado, utilizando-se simulações de experimentos realizados em uma unidade existente no Laboratório de Termofluidodinâmica do PEQ/COPPE, que utiliza como fase dispersa uma vazão de $5,4 \times 10^{-3}$ kg/s de gases provenientes da queima de GLP (composição volumétrica: N_2 : 74%; CO_2 : 9%; O_2 : 5%; H_2O : 12%) e tem o sistema de distribuição dos gases alimentado pela tampa superior do seu corpo e formado por um conjunto interligado de tubos de 3/4", onde existem 288 orifícios de 1,3 mm de diâmetro. O corpo central do evaporador possui 0,57 m de diâmetro (ϕ) e a altura do sistema de distribuição dos gases (Hsd), em relação a base do corpo da unidade, é de 6,8 cm.

Com objetivo de facilitar a análise dos resultados do teste de sensibilidade paramétrica e trazer um pouco de realidade, são também apresentados resultados experimentais obtidos em corridas realizadas com as condições operacionais utilizadas nas simulações. Estes experimentos são descritos por Queiroz e Hackenberg (1992b) e Hackenberg e Queiroz (1993).

Retenção Gasosa. O fato que motiva uma análise da influência do valor da retenção gasosa nos resultados globais da simulação é a dificuldade de sua previsão, pois são vários os parâmetros que influenciam o seu valor, indo desde as propriedades físicas da fase contínua até a geometria do sistema de distribuição dos gases. Guy et al. (1986) citam que apesar do intenso estudo para a previsão da retenção gasosa não há consenso em relação ao critério de projeto que deva ser adotado.

A retenção gasosa é um parâmetro importante na previsão do tempo de residência das bolhas no processo, pois ela está diretamente relacionada à velocidade média de ascensão das bolhas (u) através da expressão:

$$u = vg / \epsilon \quad (19)$$

onde vg é a velocidade superficial da fase dispersa. Esta relação representa um balanço de massa para a fase dispersa ao longo da coluna em sistemas isotérmicos, sendo também adotada na modelagem desenvolvida para evaporadores por contato direto, apesar de sua natureza notadamente não-isotérmica. Para transformar a vazão mássica de gás borbulhado em vazão volumétrica, diretamente relacionada à velocidade superficial, utiliza-se a densidade determinada na temperatura média dos gases borbulhados (\bar{T}_{gb}).

Há na literatura diversas equações para a previsão da retenção gasosa. Adotando condições operacionais médias utilizadas no equipamento piloto do Laboratório de Termofluidodinâmica do PEQ/COPPE, a equação proposta por Akita e Yoshida (1973):

$$\frac{\epsilon}{(1-\epsilon)^4} = 0,2 \left(\frac{g \phi^2 \rho}{\sigma} \right)^{1/8} \left(\frac{g \phi^3 \rho^2}{\mu^2} \right)^{1/12} \left(\frac{vg^2}{g \phi} \right)^{1/2} \quad (20)$$

onde σ representa a tensão superficial e μ a viscosidade da fase contínua, apresenta previsões na ordem de grandeza de 12%, enquanto a de Grover et al. (1986):

$$\epsilon = \frac{1+a' Pv}{a'' Pv} \left(\frac{g \mu^4 (\rho - \rho')}{\rho^2 \sigma^3} \right)^{-0,27} \left(\frac{vg \mu}{\sigma} \right)^{0,76} \left(\frac{\rho'}{\rho} \right)^{0,09} \left(\frac{\mu'}{\mu} \right)^{0,35} \quad (21)$$

onde $a' = 1,1 \times 10^{-4} \text{ Pa}^{-1}$, $a'' = 5 \times 10^{-4} \text{ Pa}^{-1}$, P_v é a pressão de vapor da fase líquida (expressa em Pascal), e ρ' e μ' a densidade e a viscosidade da fase dispersa, apresenta resultados na ordem de 20%. Estes números representam valores extremos em um conjunto de algumas relações disponíveis na literatura. Por outro lado, os resultados experimentais obtidos na unidade piloto ficaram no entorno de 5%. O método de medida da retenção gasosa, relacionando a diferença de nível com e sem o borbulhamento, não oferece uma boa precisão e somente pode ser efetuado ao final do experimento, devido às características operacionais da unidade.

Estes fatos orientaram a realização de três simulações, duas com as retenções gasosas previstas pelas equações (20) e (21) e uma com o valor experimental de 5%. Na Tabela 1 são mostrados os parâmetros operacionais utilizados nas simulações, cujos resultados, juntamente com os dados experimentais, encontram-se nas Figuras 1 e 2, para a temperatura da fase contínua (T_c) e altura de borbulhamento (H), respectivamente. Como condições iniciais foram adotados valores do experimento utilizado como referência: $t = 5 \text{ min}$ (300 s); $H = 29,6 \text{ cm}$; $T_c = 302,4 \text{ K}$.

Tabela 1 - Dados utilizados nas simulações do estudo da influência da retenção gasosa - Figuras 1 e 2

Parâmetro	Sim. 1	Sim. 2	Sim. 3
\bar{T}_{gb} (K)	757	757	757
a (m)	0,0072	0,0072	0,0072
ϵ	0,115	0,208	0,05
v_g (m/s)	0,0468	0,0468	0,0468
u (m/s)	0,407	0,225	0,936
Fonte para ϵ	eq. (19)	eq. (20)	exp.

Como pode ser verificado nas Figuras 1 e 2, o valor da retenção gasosa contribui de forma distinta para os resultados globais da simulação, pois um aumento causa um afastamento das previsões para a altura de borbulhamento e uma aproximação para a temperatura da fase contínua, ambos relativos aos resultados experimentais. Observa-se também na Figura 1 uma certa imprecisão na previsão da temperatura de operação da fase contínua, com todas as simulações estimando-a para cima.

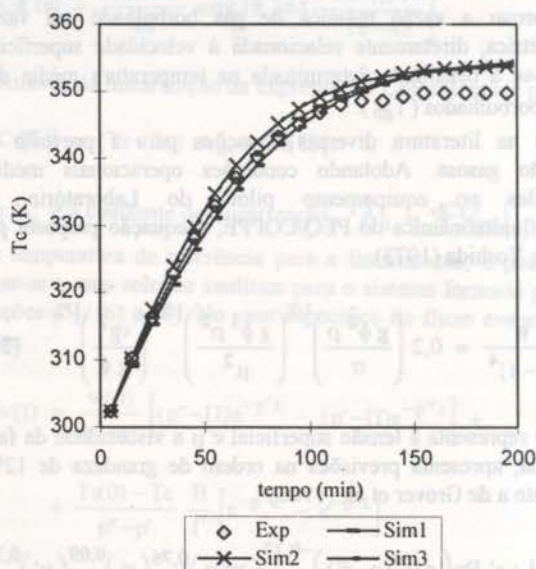


Figura 1 - Comportamento dinâmico da temperatura da fase contínua - Variação da retenção gasosa

Difusividade Mássica. As transferências de calor e massa na fase dispersa são modeladas por mecanismos difusivos acoplados somente através das condições de contorno (Eqs. (1) e (2)), onde diversos processos não são considerados.

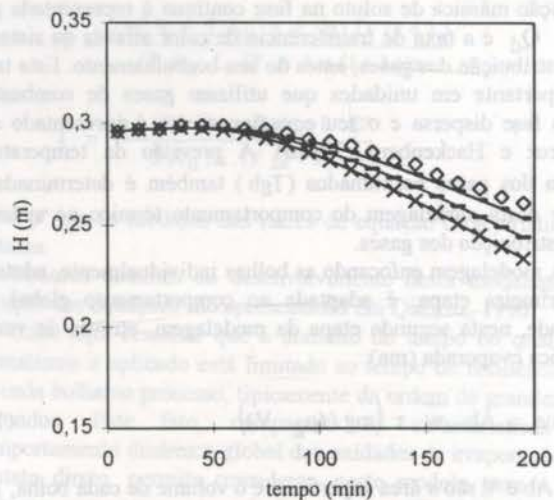


Figura 2 - Comportamento dinâmico da altura de borbulhamento - Variação da retenção gasosa

No caso específico da transferência de massa, além de não ser levado em conta o efeito Soret, que segundo Slattery (1972) apresenta contribuição relevante somente em processos com grandes gradientes de temperatura, é desprezado o termo do arraste de massa pela velocidade molar média da mistura, típico de processos onde ocorre a transferência de massa através de meios estagnados à pressão constante. Em resumo, por simplificação, utiliza-se a chamada segunda lei de Fick para modelar a transferência de massa no processo.

A adoção da segunda lei de Fick é também adotada na modelagem de outros processos, sendo em algumas situações a difusividade mássica tratada como um parâmetro do modelo a ser determinado, onde então ela é chamada de difusividade efetiva.

Como na modelagem proposta utiliza-se o valor da difusividade molecular do par ar-água, determinada a 298 K, com uma relação para a correção deste valor em função da temperatura, que segundo recomendação de Reid et al. (1987) pode ser representada por:

$$D' = FD \times 0,256 \times 10^{-4} (\bar{T}/298)^{1,5} \quad (22)$$

onde $[D'] = \text{m}^2/\text{s}$, $[\bar{T}] = \text{K}$ e FD é um fator adicionado para permitir variações no valor original da difusividade molecular, resolveu-se realizar uma avaliação das consequências, na simulação global, de variações no valor da difusividade mássica, pois este é um parâmetro importante para a retirada de evaporado da interface, ou seja, para o processo de evaporação.

Este segundo estudo paramétrico, que pode ser observado nas Figuras 3 e 4, foi realizado de forma análoga ao anterior, tomando como referência as condições definidas para a simulação 1, na Tabela 1 ($FD = 1$). As simulações 2 e 3, nas Figuras 3 e 4, têm como característica distinta em relação à simulação 1 somente o valor da difusividade mássica, pois utiliza-se $FD = 2$ na simulação 2 e $FD = 4$ na simulação 3, numa tentativa de compensar os efeitos desprezados.

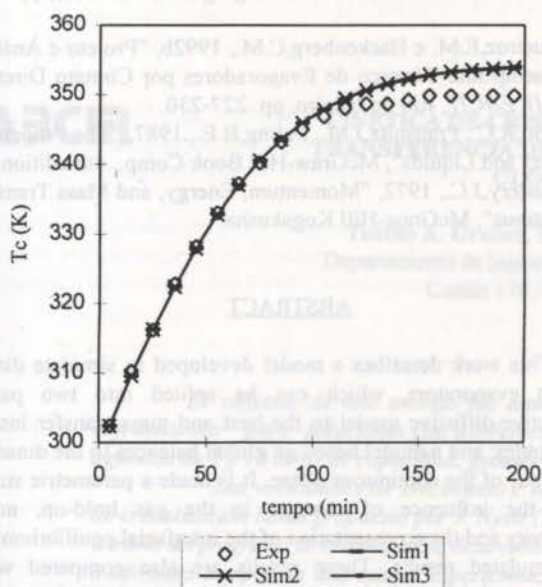


Figura 3 - Comportamento dinâmico da temperatura da fase contínua - Variação da difusividade mássica

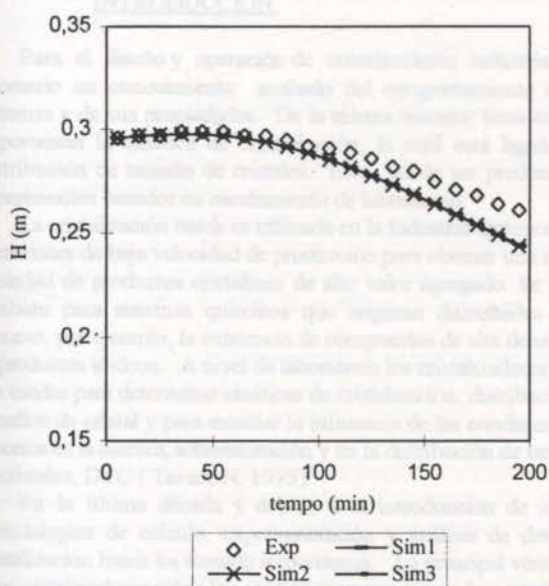


Figura 4 - Comportamento dinâmico da altura de borbulhamento - Variação da difusividade mássica

Conforme pode ser observado nas Figuras 3 e 4, a variação proposta na difusividade mássica não implica em mudanças significativas nos resultados da simulação.

Cabe aqui comentar que uma diminuição deste parâmetro, nas mesmas proporções que os aumentos testados, gera mudanças bem mais marcantes nos resultados da simulação, com um aumento do valor previsto para a temperatura da fase contínua, contribuindo para um maior afastamento relativo aos dados experimentais.

Equilíbrio Interfacial. A expressão utilizada na modelagem para descrever o equilíbrio interfacial (Eq. (7)) é válida para água. É sabido que a presença de sais diminui a pressão de vapor das

soluções aquosas, gerando o chamado levantamento do ponto de ebulição.

Hackenberg e Queiroz (1993) mostram que a temperatura da fase contínua na operação em regime estacionário do evaporador por contato direto do Laboratório de Termofluidodinâmica do PEQ/COPPE, com soluções aquosas de NaCl como fase contínua, apresenta um comportamento análogo ao do levantamento do ponto de ebulição destas soluções.

Com objetivo de simular parcialmente esta redução da pressão de vapor, sem um acréscimo considerável no esforço de cálculo, utiliza-se um redutor constante (RPV) no lado direito da equação (7), que estende-se automaticamente para a equação (8).

Nas Figuras 5 e 6 são novamente comparados resultados de simulações, para a temperatura da fase contínua e altura de borbulhamento, com dados obtidos em um experimento que utilizou como fase contínua uma solução aquosa de NaCl a 15%(p/p). Como condições iniciais são adotados os pontos $t = 5$ min (300 s); $H = 30,0$ cm; $T_c = 301,6$ K. As condições operacionais do combustor são um pouco diferentes das utilizadas anteriormente: vazão de fase dispersa = $5,1 \times 10^{-3}$ kg/s, com composição volumétrica de 76% de N_2 , 10% de CO_2 , 4% de O_2 e 10% de H_2O . A temperatura média do gás borbulhado foi de 751 K, o raio das bolhas formadas estimado em 0,007 m (Eq. (17)). Nas simulações foi utilizado o valor experimental da retenção gasosa de 5%, com $vg = 0,044$ m/s e velocidade média de ascensão $u = 0,88$ m/s.

Nas referidas figuras são apresentados resultados de três simulações: Sim1 - com $RPV = 1$, o que significa simulação para água pura; Sim2 - com $RPV = 0,95$; e Sim3 - com $RPV = 0,85$.

Nas figuras 5 e 6 pode-se verificar a importância da descrição do equilíbrio interfacial no modelo desenvolvido. A diminuição da pressão de vapor contribui para aproximar as previsões dos dois parâmetros simulados com os resultados experimentais. Os dados experimentais encontram-se entre as Sim2 e Sim3. Já a Sim1, que considera água pura, é a que mais se afasta dos experimentos.

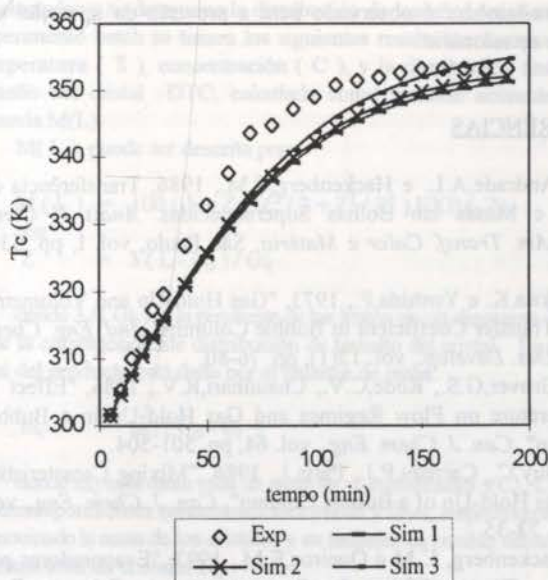


Figura 5 - Comportamento dinâmico da temperatura da fase contínua - Variação da descrição do equilíbrio interfacial

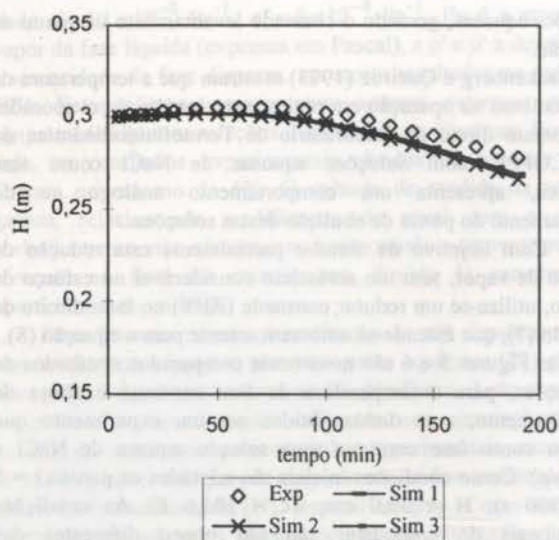


Figura 6 - Comportamento dinâmico da altura de borbulhamento - Variação da descrição do equilíbrio interfacial

CONCLUSÕES

Modificações na retenção gasosa são importantes, mas influenciam nos resultados das simulações de forma distinta quando comparados com os resultados experimentais. Uma melhora da representação da temperatura da fase contínua é acompanhada da piora da previsão da altura de borbulhamento.

A análise envolvendo a simulação da operação dos evaporadores, utilizando solução aquosa de NaCl, mostra que modificações na forma de representar o equilíbrio interfacial têm um bom potencial para melhorar os resultados da modelagem proposta. Estas mudanças implicam em uma aproximação dos valores simulados dos dois parâmetros utilizados para representar o comportamento dinâmico da unidade. Este potencial de melhora também é observado para a previsão da operação em regime estacionário.

REFERÊNCIAS

Andrade, A.L. e Hackenberg, C.M., 1986, Transferência de Calor e Massa em Bolhas Superaquecidas. *Anais II Cong. LatinoAm. Transf. Calor e Matéria*, São Paulo, vol. I, pp. 530-543.

Akita, K. e Yoshida, F., 1973, "Gas Hold-Up and Volumetric Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns", *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Develop.*, vol. 12(1), pp. 76-80.

Grover, G.S., Rode, C.V., Chaudhari, R.V., 1986, "Effect of Temperature on Flow Regimes and Gas Hold-Up in a Bubble Column", *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 64, pp. 501-504.

Guy, C., Carreau, P.J., Paris, J., 1986, "Mixing Characteristics and Gas Hold-Up of a Bubble Column", *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 64, pp. 23-35.

Hackenberg, C.M e Queiroz, E.M., 1993, "Evaporadores por Contato Direto: Efeito da Concentração de Sais na Fase Contínua", *Anais XXI ENEMP*, Ouro Preto, vol. 2, pp. 563-579.

Queiroz, E.M., 1990, "Transferência Simultânea de Calor e Massa em Processos de Borbulhamento", Tese D.Sc., PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.

Queiroz, E.M. e Hackenberg, C.M., 1992a, "Evaporadores por Contato Direto - Efeito da Temperatura e Concentração do Gás

Borbulhado", *RBE - Caderno de Eng. Quím.*, vol. 9(2), pp. 57-71.

Queiroz, E.M. e Hackenberg, C.M., 1992b, "Projeto e Análise do Desempenho Térmico de Evaporadores por Contato Direto", *Anais IV ENCIT*, Rio de Janeiro, pp. 227-230.

Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Poling, B.E., 1987, "The Properties of Gases and Liquids", McGraw-Hill Book Comp., 4th edition.

Slattery, J.C., 1972, "Momentum, Energy, and Mass Transfer in Continua", McGraw-Hill Kogakusha.

ABSTRACT

This work describes a model developed to simulate direct contact evaporators, which can be split into two parts: convective-diffusive model to the heat and mass transfer inside the bubbles; and a model based on global balances to the dynamic behaviour of the continuous phase. It is made a parametric study about the influence of changes in the gas hold-up, mass diffusivity and the representation of the interfacial equilibrium on the simulated results. These results are also compared with experimental data, using as continuous phase water and aqueous solutions of NaCl.



CINÉTICA DE CRISTALIZACIÓN Y COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA PARA CRISTALIZACIÓN DE CLORURO DE POTASIO.



Teófilo A. Graber, María E. Taboada M., Luis C. Núñez
Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Antofagasta.
Casilla 170, Fax 247835. Antofagasta, Chile.

RESUMEN

El objetivo de este trabajo fue estudiar la cinética de cristalización de Cloruro de potasio por enfriamiento para soluciones con diferentes grados de pureza y su escalamiento, en cristalizadores batch agitados de 2 y 12 litros de capacidad, geoméricamente semejantes.

Las velocidades de crecimiento y nucleación, G y B, fueron determinadas por el método mejorado de cristalización batch propuesto por J. Nyvlt (1989). Mediante un método iterativo se desarrollan los cálculos a través del programa de cristalización, desarrollado por los autores para éste estudio. Se generaron resultados a diferentes tiempos en una misma experiencia, logrando de esta forma ampliar la información en lo que se refiere al comportamiento de los cristalizadores. Para la velocidad de crecimiento de los cristales, el exponente de la fuerza impulsora de la cristalización, el grado de sobresaturación, es cercano a la unidad indicando control difusivo.

INTRODUCCIÓN.

Para el diseño y operación de cristalizadores industriales es necesario un conocimiento acabado del comportamiento de los sistemas y de sus propiedades. De la misma manera, tiene especial importancia la cinética de cristalización, la cual está ligada a la distribución de tamaño de cristales. Esto puede ser predecido en experimentos basados en escalamiento de laboratorio.

La cristalización batch es utilizada en la Industria Química, para operaciones de baja velocidad de producción para obtener una amplia variedad de productos cristalinos de alto valor agregado. Se utiliza también para sistemas químicos que originan dificultades en el proceso, por ejemplo, la existencia de compuestos de alta densidad o de productos tóxicos. A nivel de laboratorio los cristalizadores batch son usados para determinar cinéticas de cristalización, distribución de tamaños de cristal y para estudiar la influencia de las condiciones de procesos en la cinética, sobresaturación y en la distribución de tamaños de cristales, DTC (Tavare N. 1995).

En la última década y debido a la introducción de nuevas metodologías de cálculo, experimentación y análisis de datos, la cristalización batch ha tomado importancia. La principal ventaja de estos cristalizadores sobre los continuos es que se pueden estudiar un gran número de variables operacionales en tiempo relativamente corto, haciendo la experimentación mucho más simple. Sin embargo, el procesamiento de la información experimental resulta mucho más compleja por la variación en el tiempo tanto de la población de cristales como de la sobresaturación.

Generalmente el análisis de la información requiere considerar la dependencia con el tiempo, las ecuaciones de conservación de masa, energía y de población junto con ecuaciones apropiadas para las velocidades de nucleación B y de crecimiento cristalino G. Resultando con ello ecuaciones diferenciales no lineales entre derivadas parciales cuya resolución es relativamente compleja. Bajo ciertas condiciones estas ecuaciones pueden ser resueltas analíticamente o bien por métodos numéricos.

En el presente estudio se utiliza un método mejorado para la determinación de la cinética de cristalización en un cristalizador batch desarrollado por Nyvlt (1989).

La característica del método es que entrega la velocidad de nucleación y de crecimiento en cada instante del proceso, además una variada información de la cristalización. Consiste en lograr la

sobresaturación a través de un perfil de enfriamiento de la solución saturada. Si en la solución inicial se siembran cristales para controlar la zona metaestable, el perfil es de la forma:

$$(T_{sat} - T)/(T_{sat} - T_f) = (t/t_f)^3 \quad (1)$$

En la ecuación anterior T, T_{sat} , T_f representan las temperaturas al tiempo t, la temperatura de saturación y la temperatura final al tiempo final t_f .

La solución es enfriada de acuerdo a la temperatura programada, T en el tiempo t. Durante la experiencia se mide la temperatura y la concentración de la solución. La suspensión se mantiene con agitación constante. Luego de alcanzar la temperatura final T_f , los cristales son recolectados y se determina la distribución de tamaño. Así, desde un experimento batch se tienen los siguientes resultados: tiempo (t), temperatura (T), concentración (C), y la distribución final del tamaño del cristal DTC, calculada como fracción acumulada y llamada M(L).

M(L), puede ser descrita por:

$$M(L) = 100(1 + Z + Z^2/2 + Z^3/Z^6) \text{EXP}(-Z) \quad (2)$$

$$Z = 3(L - L_N)/Gt_f \quad (3)$$

donde $3/(Gt_f)$ es la pendiente de las líneas en un diagrama Z v/s L de la correspondiente distribución de tamaño del cristal. La masa total del producto está dada por el balance de masa:

$$m_c = m_o(C_o - C_f) \quad (4)$$

donde m_c es la masa total de agua en el cristalizador y C_o , C_f son las correspondientes concentraciones inicial y final, respectivamente. Conociendo la masa de los cristales y su tamaño, es posible calcular el número total de cristales N_c :

$$N_c = 2m_c / (9Kv\rho_c L_{med}^3) \quad (5)$$

El producto puede ser dividido en un alto número de fracciones, k, acorde al tamaño del cristal. Denotando la anchura de cada fracción como ΔL , se obtiene el número de cristales en cada fracción y su masa:

$$N_C = N_{C_i}^{i(-Z_1) \cdot (-Z_2)^{i-1}} \quad (6)$$

donde:

$$Z_1 = 3(L_i - L_N) / Gt_f \quad (7)$$

$$Z_2 = (L_i - L_N + \Delta L) / Gt_f \quad (8)'$$

Por cada tamaño del cristal el balance de masa debe ser:

$$m_{C,i} = K_v \rho_C N_{C,i} L_i^3 \quad (9)$$

La masa total de cristales es:

$$m_{C,tot} = \sum_i^k m_{C,i} \quad (10)$$

Así en el próximo paso comenzando desde el término del experimento, un lado disminuye ($L_{i,t-1} - L_{i,t}$), iterando así en cada instante se obtiene la masa total de cristales, que corresponde al balance de masa.

$$m_{C,t} = m_0 (C_0 - C_t) - m_{C,tot,t} \quad (11)$$

La concentración en un instante es calculada por interpolación; los intervalos deben ser suficientemente pequeños para que correspondan a los números calculados de las fracciones de cristales.

Interpolación en intervalos de un minuto es razonablemente suficiente en este caso. La velocidad de crecimiento es:

$$G = (L_{i,t-1} - L_{i,t}) / \Delta t \quad (12)$$

y la velocidad de nucleación:

$$B = (N_{C,t-1} - N_{C,t}) / m_0 \Delta t \quad (13)$$

donde la diferencia en el número de cristales es dado por el desaparecimiento de fracciones cuando $L_{i,t-1} \leq 0$.

La sobresaturación en el tiempo t se determina por:

$$\Delta C = C_t - C_{eq,t} \quad (14)$$

Se obtiene así, para diferentes tipos de cristalización, las velocidades de nucleación y crecimiento en cada momento.

MODELOS CINÉTICOS

La velocidad de nucleación B puede representarse en función de las variables de operación ΔC (grado de sobresaturación) y M_T (densidad de suspensión) por la expresión empírica:

$$B = K_b M_T^j (\Delta C)^b \quad (15)$$

La constante de nucleación K_b puede depender de: temperatura, hidrodinámica, impurezas y propiedades del cristal. Los efectos de estas últimas se pueden incorporar en la ecuación cinética usando formas convenientes funcionales. Por otra parte la densidad del magna M_T se incluye habitualmente en la expresión cinética para considerar efectos de nucleación secundaria. El exponente j es independiente de la temperatura y dependiente de la hidrodinámica y densidad del magna. El orden de nucleación b es independiente de la temperatura.

La velocidad de crecimiento lineal se expresa como:

$$G = K_g (\Delta C)^g \quad (16)$$

El coeficiente de velocidad K_g , depende de la temperatura, tamaño del cristal, hidrodinámica, y de la presencia de impurezas al interior del sistema. La fuerza impulsora ΔC , puede ser eliminada

reagrupando las ecuaciones (15) y (16) para dar:

$$B = K_R M_T^j G^i \quad (17)$$

donde K_R es el coeficiente cinético global, dependiente de: temperatura, hidrodinámica, impurezas, y en algunos casos del tamaño del cristal. El exponente i es el orden cinético relativo, dependiente de la temperatura.

Una ecuación cinética más general que permite estudiar el efecto individual de la velocidad de agitación N en revoluciones por segundo y el escalamiento del cristizador a través del diámetro del impulsor d , es:

$$B = K G^i M_T^j N^h d^K \quad (18)$$

El objetivo de un escalamiento es producir las mismas condiciones de operación en el modelo y en el equipo a gran escala. Sin embargo, no hay reglas generales para el escalamiento de diferentes procesos como por ejemplo, la mezcla y la suspensión.

En tanques agitados, como la entrada de energía específica del agitador se mantiene normalmente, constante, se sanciona con tiempos de cristalización, t , más largos al reactor grande (Plob et al, 1986).

$$t/t_{(M)} \propto [d/d_M]^{2/3} \quad (19)$$

El subíndice M indica el modelo. El parámetro d representa un largo característico por ejemplo, el diámetro del agitador. El factor de escalamiento es (d/d_M) .

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

En el presente trabajo se estudia la Cinética de Cristalización de Cloruro de Potasio y su escalamiento en cristalizadores batch agitados de 2 y 12 litros de capacidad, geoméricamente semejantes.

Las experiencias fueron diseñadas, utilizando como criterio de escalamiento la velocidad de agitación constante, y se estudiaron tres sistemas que son determinados por el grado de pureza de la sal. Estos son:

- Cloruro de Potasio/Agua, pureza de la sal 99.98 % (sal p.a.)
- Cloruro de Potasio/Agua, pureza de la sal 97.4 % (sal técnica).
- Silvinita Sintética (KCl NaCl)/Agua, contenido de Cloruro de Potasio 56 %.

El procedimiento empleado consistió en preparar tres soluciones de Cloruro de Potasio (KCl) en agua destilada para cada sistema, a una temperatura levemente mayor a la de saturación, con el propósito de disolver bien la sal. Con una concentración de 42,6 y 40 gr. sal / 100 gr. agua, para los volúmenes de 2 y 12 litros respectivamente. Luego se carga la solución al cristizador calentándose suavemente sobre la temperatura de saturación. La solución es alimentada con unos pocos cristales de KCl puro de 0.425 mm, en una relación de 1 gramo de sal por litro de solución, con el fin de controlar la zona metaestable. Al mismo tiempo por medio del baño termostático, la solución es enfriada con una velocidad de agitación constante de 800 r.p.m., siguiendo un perfil cúbico de temperatura con el tiempo, hasta la temperatura de cristalización requerida, controlada por un termómetro digital con una sensibilidad de 0.1 °C. En la figura 1 se muestra el equipo utilizado.

Mientras transcurre el proceso de cristalización mediante el perfil de enfriamiento preestablecido, se mide a intervalos de tiempos la temperatura y se toman muestras de la solución para determinar su concentración. Esta última por secado a 110°C para KCl puro y por análisis químico para KCl técnico y Silvinita. Una vez alcanzada la temperatura de cristalización, para recibir los cristales obtenidos la solución es filtrada mediante vacío. Posteriormente los cristales son lavados con acetona y secados cuidadosamente con aire caliente. Las muestras de cristales secos son pesados y luego tamizados durante 30

minutos en un tamizador vibratorio, utilizando tamices Tyler entre 12 y 120 mallas. Obteniéndose así la DTC del producto.

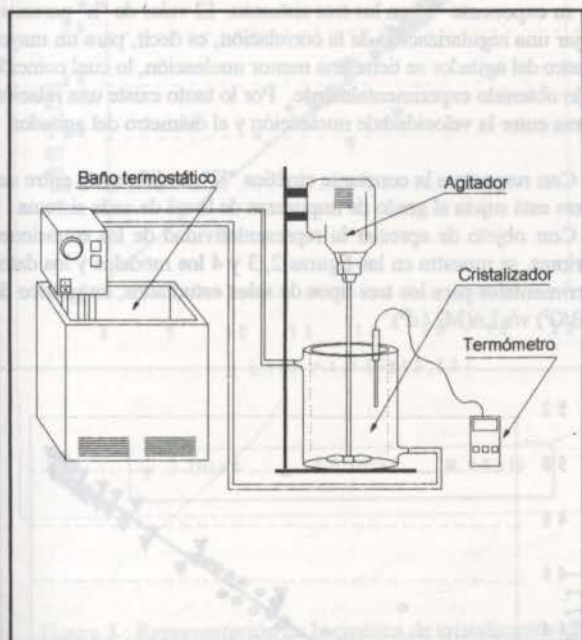


Fig. 1 Diagrama Experimental

RESULTADOS

A continuación se detallan los efectos de las diferentes variables estudiadas.

EFFECTO DE LA TEMPERATURA.

La cinética de cristalización de los tres sistemas en estudio, es afectada por la temperatura de la siguiente manera: la velocidad de nucleación aumenta, mientras que la velocidad de crecimiento disminuye a medida que transcurre el enfriamiento de la solución. Las temperaturas de cristalización cercanas a la temperatura de saturación favorecen el crecimiento cristalino, mientras que las temperaturas de cristalización alejadas de la temperatura de saturación favorecen la nucleación. Aunque los mecanismos del efecto de la temperatura sobre la cinética de cristalización no son claros, es posible que el agrupamiento de partículas fluidizadas en la superficie del cristal es más activo, y así el índice de integración de superficie es más rápido a temperaturas más altas, por lo cual la velocidad de crecimiento debería ser más rápida a temperaturas más altas.

Al descender la temperatura y contar con una mayor cantidad de núcleos en la solución, los cuales han sido originados por el choque entre cristales, rotura de cristales en crecimiento, desgaste, etc.; el soluto disponible en el solvente contribuye menormente al crecimiento de los cristales. Por lo tanto la velocidad de nucleación aumenta cuando la temperatura disminuye.

El comportamiento que presentan las distintas salmueras es similar a lo encontrado por J. Nyvlt (1989), para Cloruro de Potasio utilizando el método mejorado de cristalización batch. Trabajos realizados por Quian Ru-Ying y col. (1987), en cristalizadores M.S.M.P.R. para Cloruro de Potasio siguen las mismas tendencias.

FACTOR DE FORMA.

El factor de forma obtenido experimentalmente para el Cloruro de Potasio a partir de KCl Puro fue de 0.9, KCl Técnico de 0.86 y Silvinita de 0.56. Esta variedad de resultados es consecuencia de:

a) El hábito de los cristales en crecimiento se ve afectado por las fracturas, desgastes y rompimientos ocasionados por choques entre

ellos y con las paredes del equipo, debido a la alta velocidad de agitación empleada para mantener los cristales en suspensión.

b) En el momento de nacer los núcleos cristalinos e ir creciendo, lo cual lo hacen en pequeñas capas de soluto que se van superponiendo una tras otra en forma ordenada en la superficie del cristal, se llega a un punto en que las impurezas presentes alteran este orden, ubicándose las capas de tal manera que producen aglomeración en la superficie del cristal a medida que este crece, por lo que el cristal tiende a perder su forma original cúbica (hábito), adquiriendo cierta tendencia elipsoidal.

El factor de forma determinado para el cristalizador de 2 litros y para el cristalizador de 12 litros, utilizando idénticas condiciones de operación resultó muy similar, lo que indica que éste es independiente del tamaño del cristalizador y de la temperatura y dependiente de la cantidad de impurezas.

EFFECTO DE LAS IMPUREZAS.

Para los dos volúmenes se determinó que las tasas de crecimiento no presentan mayor diferencia entre los tres sistemas. Estrictamente se encontró que el crecimiento fue mayor para el KCl Puro, seguido por el KCl Técnico y finalmente por la Silvinita. El rango de variación del crecimiento promedio de las tres salmueras está entre 5.1 % y 14.3 % para el cristalizador de 2 litros, y entre 3.2 % y 25 % para el cristalizador de 12 litros.

En cuanto a la velocidad de nucleación existe una diferencia más notoria, siendo la nucleación mayor para la Silvinita, seguida por el KCl Técnico y luego para el KCl Puro. El rango de variación de la nucleación promedio de las tres salmueras está entre 21 % y 73 % para ambos cristalizadores.

Por lo descrito anteriormente se puede decir que cada sistema estudiado presenta una relación inversa entre el crecimiento y la nucleación. Esto se explica debido al grado de impurezas de cada salmuera. Las impurezas generalmente son solubles y hacen incrementar o decrecer el grado de crecimiento de los cristales y el grado de nucleación, alterando también hábito del cristal y la D.T.C. por el cambio de la densidad de población de los núcleos. Si la velocidad de formación de núcleos varía en presencia de impurezas se produce un cambio proporcional al área superficial de los cristales, alterando de esta manera la sobresaturación del sistema y forzando a la velocidad de nucleación y crecimiento a variar en sentido opuesto.

Con respecto al porcentaje de pureza de los cristales de KCl obtenidos en el proceso de cristalización para las tres sales fue de 99.9 %, 99.8 % y 99.0 % a partir de KCl Puro, KCl Técnico y Silvinita respectivamente. De acuerdo a estos valores se aprecia que las impurezas no alteran fuertemente la pureza del producto. Idealmente se deberían obtener cristales 100 % puros, pero la diferencia corresponden a residuos de solución madre impregnada en los intersticios y poros de los cristales.

CORRELACIONES.

Determinando órdenes cinéticos "b" y "g" para cada sistema utilizando el método de regresión no lineal de Marquard, se obtiene las siguientes ecuaciones para cada sistema:

$$V = 2 \text{ Lts.}$$

KCl PURO

$$B = 9892 \text{ EXP}(2045 / T) \Delta C^{2.4.3}$$

$$\text{error} = 3.5 \%, \text{ ds} = 5.8$$

$$G = 2.3 * 10^6 \text{ EXP}(-5950 / T) \Delta C^{1.07}$$

$$\text{error} = 1.4 \%, \text{ ds} = 2.4$$

KCl TECNICO

$$B = 4.1 * 10^{-3} \text{ EXP}(4708 / T) \Delta C^{1.74}$$

$$\text{error} = 3.3 \%, \text{ ds} = 1.74$$

$$G = 6261 \text{ EXP}(4844 / T) \Delta C^{0.92}$$

$$\text{error} = 1.3 \%, \text{ ds} = 1.74$$

SILVINITA

$$B = 22.7 \text{ EXP}(2500 / T) \Delta C^{2.38}$$

$$\text{error} = 4.1 \%, \text{ ds} = 6.2$$

$$G = 5.9 * 10^6 \text{ EXP}(-6960 / T) \Delta C^{1.10}$$

$$\text{error} = 1.6 \%, \text{ ds} = 2.5$$

V = 12 Lts.

KCl PURO

$$B = 1.7 \cdot 10^3 \text{ EXP}(4959 / T) \Delta C^{1.96}$$

error = 3.3 %, ds = 5.8

$$G = 2.1 \cdot 10^7 \text{ EXP}(-6670 / T) \Delta C^{0.96}$$

error = 1.9 %, ds = 3.1

KCl TÉCNICO

$$B = 4.3 \cdot 10^2 \text{ EXP}(2852 / T) \Delta C^{1.71}$$

error = 3.0 %, ds = 5.2

$$G = 3.3 \cdot 10^3 \text{ EXP}(-4230 / T) \Delta C^{1.12}$$

error = 3.0 %, ds = 2.9

SILVINITA

$$B = 726 \text{ EXP}(1448 / T) \Delta C^{2.52}$$

error = 3.7 %, ds = 6.5

$$G = 4.4 \cdot 10^7 \text{ EXP}(-7032 / T) \Delta C^{1.24}$$

error = 1.2 %, ds = 1.5

La similitud que presentan los ordenes en ambos cristalizadores es la esperada, ya que los ordenes cinéticos solamente dependen del sistema cristalizante y son independientes de la temperatura. Los valores encontrados se asemejan a los propuestos por J. Nyvlt (1989), para su trabajo con KCl Puro (99.9 % pureza), donde $b = 2.76$ y $g = 1.19$.

Las constantes cinéticas presentan una mayor diferencia entre sus valores, debido a que son sensibles a las dimensiones y estructura del cristalizador. Además son dependientes de la temperatura, hidrodinámica y concentración de impurezas.

EFECTO DE LA ESCALA DEL CRISTALIZADOR.

Un criterio de agitación fue considerado para escalar cristalizadores. La velocidad de agitación constante (disminuyendo el consumo de energía específica), mientras se mantiene una suspensión bien mezclada.

Dos series de experimentos fueron diseñadas para confrontar este criterio. La primera en un cristalizador de 2 litros de capacidad a una velocidad de 800 r.p.m. y la segunda en un cristalizador de 12 litros de capacidad a la misma velocidad. Las temperaturas de cristalización fueron las mismas para ambos cristalizadores. El escalamiento se aplicó para los tres sistemas en estudio.

En forma tradicional la ecuación cinética es (ecuación 18):

$$B = K G^j M_T^i N^h d^k$$

Que el criterio para escalar sea la velocidad de agitación constante implica que "h" y "k" son idénticos y como la velocidad de agitación N es constante, la ecuación (18) queda, entonces la ecuación anterior se simplifica a:

$$B = K G^j M_T^i d^h$$

Para los dos cristalizadores, se cumple que para idénticos tiempos batch (tiempo de operación):

KCL PURO:

$$B = 2.36 \cdot 10^{13} G^{2.30} M_T^{1.50} d^{-4.32}$$

KCL TECNICO:

$$B = 7.94 \cdot 10^9 G^{1.71} M_T^{1.19} d^{-3.73}$$

SILVINITA:

$$B = 3.10 \cdot 10^{16} G^{2.24} M_T^{1.49} d^{-2.06}$$

Al observar las correlaciones para cada sistema, se encuentra que los exponentes "i" de la velocidad de crecimiento y "j" de la densidad de suspensión, son muy similares a los encontrados para cada volumen en forma independiente. Por lo tanto el criterio de agitación constante para escalar es corroborado.

Estos valores se aproximan a los encontrados por Janeke y Larson (1972) en cristalización continua de KCl, donde $i = 2.55$ y $j = 0.91$.

Un estudio de cristalización y escalamiento de Cloruro de Potasio con un significativo grado de impurezas, publicado por Quian Ru-Yin y col. (1987), propone valores de $i = 2.78$ y $j = 0.70$ a 1.2, para rangos bajos y altos de M_T respectivamente.

La variable "d", diámetro del agitador presenta un valor negativo para su exponente "h" en los tres sistemas. El valor de "h" pareciera reflejar una regularización de la correlación, es decir, para un mayor diámetro del agitador se tiene una menor nucleación, lo cual coincide con lo obtenido experimentalmente. Por lo tanto existe una relación inversa entre la velocidad de nucleación y el diámetro del agitador.

Con respecto a la constante cinética "K", la diferencia entre sus valores está sujeta al grado de impurezas de la sal de cada sistema.

Con objeto de apreciar la representatividad de las ecuaciones anteriores, se muestra en las figuras 2, 3 y 4 los modelos y los datos experimentales para los tres tipos de sales estudiados, en gráfico de $\ln(B/G^j)$ v/s $\ln(M_T^i / d^h)$.

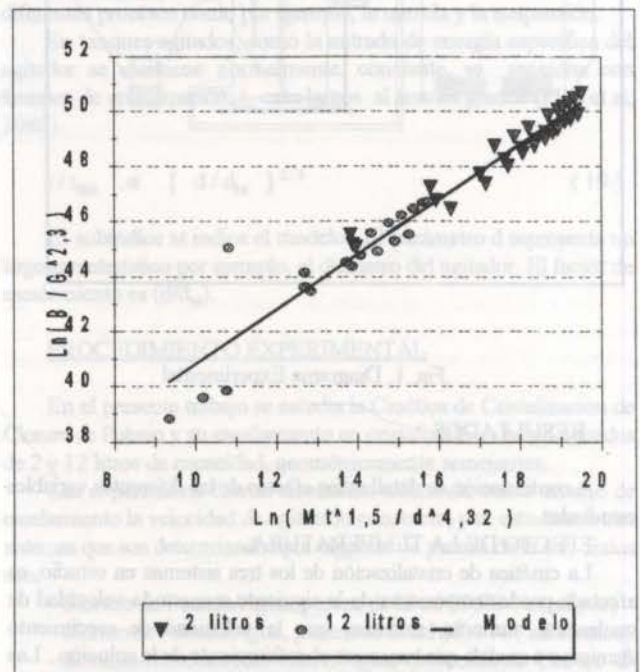


Figura 2: Representación de la cinética de cristalización de KCl puro

CONCLUSIONES

1.-Las temperaturas más altas de cristalización favorecen el crecimiento cristalino y desfavorecen la nucleación de cloruro de potasio.

2.-La presencia de impurezas en el KCl incrementa la nucleación y disminuye el crecimiento cristalino.

3.- El factor de forma obtenido experimentalmente en los dos cristalizadores para Cloruro de Potasio a partir de KCl Puro fue de 0.9, para KCl Técnico de 0.86 y para Silvinita de 0.56. Estos valores difieren del factor de forma original que es 1. Estos resultados indican que éste es independiente del tamaño del cristalizador y temperatura de cristalización y dependiente de la cantidad de impurezas y de la de agitación.

4.-Para los dos cristalizadores se cumple que para idénticos tiempos batch:

KCL PURO:

$$B = 2.36 \cdot 10^{13} G^{2.30} M_T^{1.50} d^{-4.32}$$

KCL TECNICO:

$$B = 7.94 \cdot 10^9 G^{1.71} M_T^{1.19} d^{-3.73}$$

SILVINITA:

$$B = 3.10 \cdot 10^{16} G^{2.24} M_T^{1.49} d^{-2.06}$$

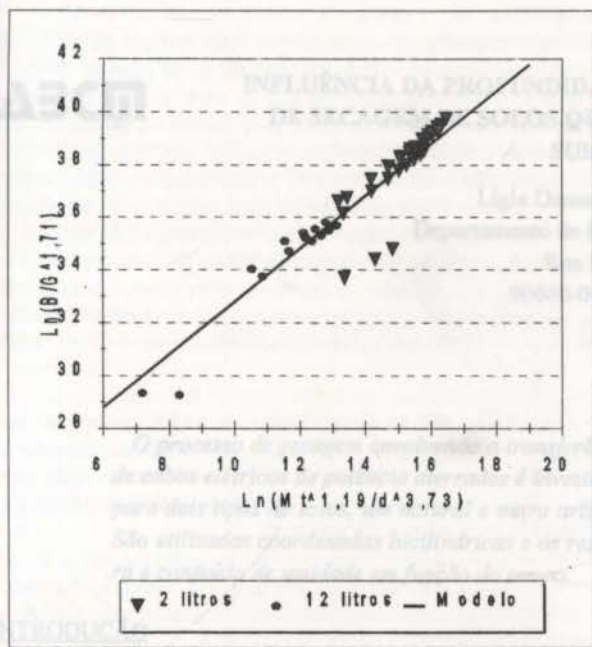


Figura 3 : Representación de la cinética de cristalización de KCl técnico

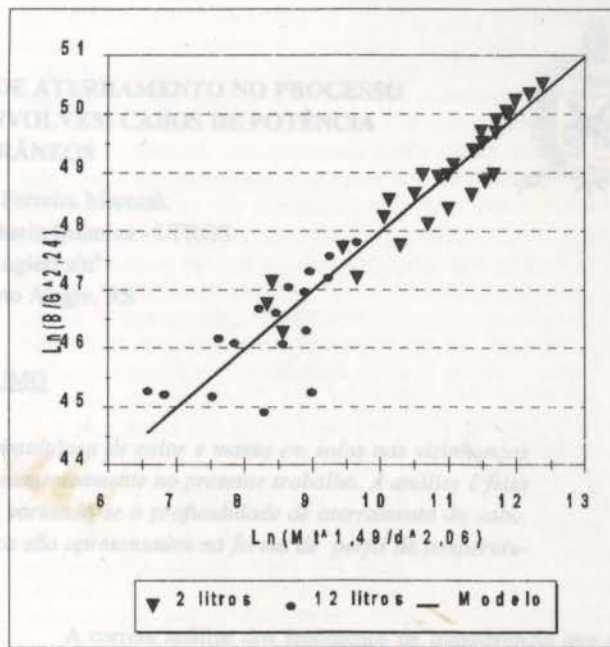


Figura 4 : Representación de la cinética de cristalización de silvinita

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Núñez Luis. "Cinética de Cristalización de Cloruro de Potasio y Escalamiento". Tesis de Grado Ingeniero Civil Industrial Químico. Universidad de Antofagasta, 1995.
- 2.- Nyvlt Jaroslav. "Calculation on the Kinetics of Crystallization based on a single batch experiment". Collect. Czech. Chem. Commun. (Vol. 54), 1989.
- 3.- Nyvlt J., Zacek S. Collect. Czech. Chem. Commun. 48, 2767, 1983.
- 4.- Quian Ru-Ying, Chen Zu-De, Ni He-Gen, Fan Zhang-Zhang and Cai Fu-Di "Crystallization Kinetics of Potassium Chloride from Brine and Scale- Up Criterion". Aiche Journal. N° 10, Vol. 33. 1987.
- 5.- Plob Reinhard, Thomas Tengler and Alfons Mersmann. "Scale-up of MSMPR Crystallizers". Ger. Chem. Eng. I., 1986.
- 6.- Tavaré S. Narayan. "Course Lecturer of Crystallization". Department of Chemical Engineering, University of Bradford. England. 1995.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica de Chile por el financiamiento otorgado para este estudio a través del Proyecto FONDECYT 1930347.

Atenuação nas especificações do cabo, tais como a troca do material de isolamento ou aumento de sua espessura, são soluções tecnicamente possíveis para o problema, embora economicamente inviáveis. A solução para o problema real está na escolha de um material, natural ou sintético, que, mesmo com baixo conteúdo de umidade, seja capaz de dissipar uma quantidade razoável de calor sem necessitar de tratamento de backfill. O objetivo deste trabalho é investigar o processo de dissipação de calor junto a um cabo utilizando dois materiais de revestimento, um natural e outro sintético, a variando-se a profundidade de armazenamento do cabo.

Para a análise dos resultados apresentados, duas maneiras de armazenamento foram utilizadas, um solo natural armazenado de maneira adequada e outro solo artificial, deturpado através de técnicas de backfill. Estes dois tipos de armazenamento utilizados no armazenamento de cabos de potência, foi analisado através de dois trabalhos sobre as propriedades térmicas e mecânicas dos materiais de isolamento sintéticos com a temperatura e a umidade. Para o estudo natural, as propriedades térmicas das propriedades foram obtidas experimentalmente por Hartley et al (1982), Hartley e Courillon (1986) e Hartley (1987), para o backfill as propriedades térmicas das propriedades foram obtidas por Oliveira Jr. (1993) e Damasceno Ferreira (1997). As equações diferenciais governantes são resolvidas numericamente e de forma iterativa utilizando o método dos volumes finitos. A geometria do cabo armazenado é simulada utilizando coordenadas cilíndricas. A análise do problema transiente de transporte de calor a umidade é feita apresentando perfis de temperatura e umidade para vários tempos bem como seus valores junto à superfície do cabo para diferentes profundidades de armazenamento do cabo.



INFLUÊNCIA DA PROFUNDIDADE DE ATERRAMENTO NO PROCESSO DE SECAGEM DE SOLOS QUE ENVOLVEM CABOS DE POTÊNCIA SUBTERRÂNEOS

Ligia Damasceno Ferreira Marczak
Departamento de Engenharia Química - UFRGS
Rua Luiz Englert s/nº
90040-040 Porto Alegre, RS



RESUMO

O processo de secagem envolvendo a transferência simultânea de calor e massa em solos nas vizinhanças de cabos elétricos de potência aterrados é investigado numericamente no presente trabalho. A análise é feita para dois tipos de solos, um natural e outro artificial, variando-se a profundidade de aterramento do cabo. São utilizadas coordenadas bicilíndricas e os resultados são apresentados na forma de perfis de temperatura e conteúdo de umidade em função do tempo.

INTRODUÇÃO

O processo da transferência simultânea de calor e massa em meios porosos insaturados está presente em diversas áreas da engenharia. Exemplos incluem processos químicos de secagem e umidificação, na engenharia petroquímica, na produção e exploração de petróleo e gás natural, em edificações, no estudo do conforto térmico, na utilização do solo como isolante ou dissipador de energia em linhas de vapor ou cabos elétricos de potência aterrados, entre outros. Este último exemplo é a aplicação da análise desenvolvida no presente trabalho. Fundamentalmente, a passagem de corrente elétrica no interior dos cabos de potência gera calor que necessita ser dissipado pelo meio que o envolve sob pena de danificá-lo por superaquecimento. Este calor gerado induz temperaturas altas na superfície dos cabos criando um gradiente térmico entre esta e o meio ambiente externo. Devido ao aquecimento junto ao cabo a umidade presente nos espaços vazios do solo começa a migrar diminuindo gradativamente o conteúdo de umidade no solo nesta região; como consequência, a resistividade térmica do solo próximo ao cabo aumenta consideravelmente e o mesmo passa a atuar como um isolante térmico. A temperatura superficial do cabo atinge, assim, valores elevados que eventualmente podem ocasionar o rompimento do isolamento do cabo. Usualmente, a temperatura máxima permitida na superfície de um cabo é em torno de 90 °C.

Até o início da década de setenta, as empresas fabricantes de cabos elétricos utilizavam no aterramento de seus cabos o mesmo solo que originalmente era retirado para a formação da vala e diversos problemas de rompimento de cabos devido a problemas de superaquecimento foram verificados. A partir de então a análise dos processos de secagem devido à migração de umidade, que efetivamente ocorrem nas vizinhanças de cabos de potência aterrados, passou a influir consideravelmente no projeto destes cabos.

Alterações nas especificações do cabo, tais como a troca do material de isolamento ou aumento de sua espessura, são soluções teoricamente possíveis para o problema, embora economicamente inviáveis. A solução para o problema recai então na escolha de um material, natural ou artificial, que, mesmo com baixo conteúdo de umidade, seja capaz de dissipar uma quantidade razoável de calor; estes materiais são usualmente denominados de backfill. O objetivo deste trabalho é investigar o processo de dissipação de calor junto a um cabo utilizando dois materiais de reaterramento, um natural e outro artificial, e variando-se a profundidade de aterramento do cabo.

A correta análise dos fenômenos de transferência que ocorrem nos materiais de reaterramento é uma tarefa extremamente difícil em decorrência de diversos fatores. O primeiro deles relaciona-se à própria estrutura do meio, composto por uma complexa matriz sólida e uma distribuição aleatória de espaços vazios. Nestes espaços vazios, denominados poros, coexistem ar, vapor d'água e água na forma líquida. Outro fator dificultante está associado à grande dependência das propriedades difusivas e termofísicas do meio com a temperatura e o conteúdo de umidade. Finalmente existe o fato de que todos os processos de transferência, tanto de calor quanto de umidade (na forma líquida ou na forma vapor) são decorrentes de ambos os gradientes, térmico e mássico.

O modelo contínuo, discutido por Whitaker (1977) e Bories (1991), associado principalmente a Philip e de Vries (1957) para a análise do transporte simultâneo de calor e massa em meios porosos insaturados, é utilizado no presente trabalho. Neste modelo as equações da conservação da massa e da energia são obtidas utilizando-se as leis fenomenológicas da difusão de massa (Lei de Darcy para a fase líquida e Lei de Fick para a fase vapor) e calor (Lei de Fourier). As equações assim obtidas trazem explicitamente as influências combinadas dos gradientes de temperatura e conteúdo de umidade nos processos de transporte de calor e massa, através de difusividades associadas a estes gradientes.

Para a análise dos resultados apresentados, dois materiais de reaterramento foram utilizados; um solo natural, denominado de aluvião arenoso e outro solo artificial, doravante chamado apenas de backfill. Estes dois solos são efetivamente utilizados no reaterramento de cabos de potência. No modelo utilizado neste trabalho todas as propriedades difusivas e termofísicas dos materiais são consideradas variáveis com a temperatura e a umidade. Para o aluvião arenoso, as expressões analíticas das propriedades foram obtidas experimentalmente por Hartley et al (1982), Hartley e Couvillion (1986) e Hartley (1987); para o backfill as expressões analíticas das propriedades foram obtidas por Oliveira Jr. (1993) e Damasceno Ferreira (1993). As equações diferenciais governantes são resolvidas numericamente e de forma iterativa utilizando o método dos volumes finitos. A geometria do cabo aterrado é simulada utilizando coordenadas bicilíndricas. A análise do problema transiente de transporte de calor e umidade é feita apresentando perfis de temperatura e umidade para vários tempos bem como seus valores junto à superfície do cabo para diferentes profundidades de aterramento do cabo.

EQUAÇÕES DE TRANSPORTE E FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O mecanismo físico de transporte de calor e umidade em um meio poroso insaturado será discutido sucintamente a seguir. Tanto calor quanto umidade (na forma líquida ou na forma vapor) são transportados simultaneamente em decorrência da influência combinada de gradientes de temperatura e de conteúdo de umidade. Calor migra essencialmente por condução através das partes sólidas (grãos) e também através dos poros preenchidos com líquido. Nos poros preenchidos com ar, a migração de calor é predominantemente devido ao transporte de calor latente pelo vapor. Os mecanismos responsáveis pelo transporte de líquido e vapor por sua vez dependem essencialmente da quantidade de água presente no meio. Para um solo relativamente seco onde não existe continuidade na fase líquida a água presente encontra-se somente absorvida nas paredes dos grãos; este é o chamado estado pendular de um meio poroso. A transferência de umidade dá-se através da migração de vapor, que ocorre por difusão no ar, de regiões onde a sua pressão parcial é mais alta para regiões onde sua pressão parcial é mais baixa. Quando se aumenta a quantidade de água nos poros começa a existir pequenas pontes ou ilhas de líquido e quando estas pontes unem-se umas às outras passa a existir continuidade na fase líquida, ainda que exista presença de vapor. Neste caso o líquido é transportado devido ao gradiente do potencial capilar, ou seja, por capilaridade e diz-se que o meio poroso está em estado fúncular. Para um aumento adicional do conteúdo de umidade todos os poros estão preenchidos com água, levando à condição de meio poroso saturado. Não existe mais vapor e, neste caso, líquido somente pode ser transportado devido à diferença de pressão hidrostática ou por efeitos de convecção natural.

Os mecanismos de transporte descritos acima são dependentes basicamente de três propriedades que necessitam ser obtidas experimentalmente a fim de caracterizar um material poroso. Estas propriedades são a condutividade térmica efetiva, o potencial de sucção e a permeabilidade relativa. A condutividade térmica efetiva leva em conta no processo de condução de calor a existência de diferentes fases. O potencial de sucção está relacionado à energia potencial da água presente nos interstícios da matriz sólida, sendo que o seu gradiente é o responsável pela tendência da água escoar no interior de um material poroso. A permeabilidade relativa está associada ao efeito da presença de mais de um fluido nos interstícios da matriz, fazendo com que o escoamento de um fluido seja intimamente influenciado pela presença do outro fluido.

A seguir será apresentada a obtenção das equações diferenciais governantes do fenômeno, onde as seguintes hipóteses simplificativas são assumidas:

1. A massa de vapor d'água presente nos poros é negligenciável comparada à massa de líquido.
2. O vapor e o ar contidos nos poros comportam-se como gases ideais.
3. Não há influência do efeito de histerese.
4. O efeito da presença de solutos na água é desprezado.
5. O meio poroso é isotrópico.
6. A fase sólida é uma matriz rígida e fixa.

A equação para o transporte de umidade é obtida partindo-se da expressão da conservação da massa que estabelece que:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\frac{j_v + j_l}{\rho} \right) \quad (1)$$

onde j_v é o fluxo de vapor, j_l é o fluxo de líquido, ρ é a massa específica do líquido e θ é o conteúdo volumétrico de umidade, definido como a razão entre o volume de líquido e o volume total, que inclui o volume de vazios e o volume de grãos do meio poroso. Vale notar que, conforme estabelecido anteriormente

(hipótese 1), a massa de vapor foi ignorada em presença da massa de líquido.

O lado esquerdo da equação (1) representa o acúmulo de umidade em um volume infinitesimal de meio poroso. O fluxo de vapor j_v é obtido a partir da Lei de Fick para a difusão de vapor d'água no ar, modificando-a para incluir os efeitos da dependência da taxa de difusão com a porosidade, conforme é discutido por Philip e de Vries (1957). São incluídos assim variáveis relacionadas à tortuosidade do meio poroso e à redução da seção de passagem do vapor devido à presença do líquido. A expressão final obtida tem a seguinte forma:

$$\frac{j_v}{\rho} = -(D_{Tv} \nabla T + D_{\theta v} \nabla \theta) \quad (2)$$

onde D_{Tv} e $D_{\theta v}$ são as difusividades do vapor associadas aos gradientes de temperatura e conteúdo de umidade, respectivamente. Vale notar que o fluxo de vapor j_v está escrito como uma soma de duas componentes, uma devido ao gradiente térmico e outra devido ao gradiente de umidade.

O fluxo de líquido j_l pode ser obtido utilizando-se a lei de Darcy modificada para ser aplicável a fluxos viscosos em sistemas porosos não saturados, conforme discutido por Childs e Collins-George (1950); a expressão obtida é:

$$\frac{j_l}{\rho} = -(D_{Tl} \nabla T + D_{\theta l} \nabla \theta - K_H \nabla z) \quad (3)$$

onde D_{Tl} e $D_{\theta l}$ são as difusividades do líquido associadas aos gradientes de temperatura e umidade, respectivamente e K_H é a condutividade hidráulica do meio poroso. O último termo do lado direito da equação (3) corresponde à contribuição da ação da gravidade sobre o escoamento de líquido. Neste caso, também o fluxo de líquido é escrito como uma soma de duas componentes, uma devido ao gradiente de temperatura e outra decorrente do gradiente de umidade; a incorporação explícita destes efeitos individuais nos fluxos de líquido e vapor constitui a grande contribuição do modelo fenomenológico de Philip e de Vries.

A equação de conservação de energia em um meio poroso não saturado, incluindo o transporte de calor por difusão térmica e o calor transportado pelo líquido e vapor, pode ser escrito da seguinte forma:

$$\frac{\partial (CT)}{\partial t} = \nabla \cdot [k_* \nabla T + (h_l + h_{lv}) j_v + h_l j_l] \quad (4)$$

onde T é a temperatura, C é a capacidade calorífica do solo, que contém uma contribuição ponderada da capacidade calorífica das diversas fases (de Vries 1975); k_* é a condutividade térmica para o caso hipotético de não existir fluxo de líquido ou vapor; h_l é a entalpia do líquido e h_{lv} é a entalpia de vaporização.

O lado esquerdo da equação (4) representa o acúmulo de energia em um volume infinitesimal do meio poroso. O primeiro termo do lado direito representa o calor transportado por condução térmica. O segundo termo indica a energia transportada pelo vapor na forma de calor sensível e latente enquanto que a energia transportada pelo líquido na forma de calor sensível está representada pelo terceiro termo. A equação (4) pode ser simplificada considerando que a entalpia de vaporização h_{lv} é muito maior que a entalpia do líquido e que os fluxos de líquido e vapor têm sentidos opostos; o resultado obtido é soma dos efeitos de transporte de calor difusivo e transporte de calor latente pelo vapor:

$$\frac{\partial (CT)}{\partial t} = \nabla \cdot (k_* \nabla T + h_{lv} j_v) \quad (5)$$

As equações da conservação da massa e da energia para o problema são obtidas substituindo-se as equações para os fluxos de vapor e líquido, equações (2) e (3), respectivamente, nas equações (1) e (5). Maiores detalhes sobre a obtenção das equações governantes e das difusividades podem ser encontradas em Damasceno Ferreira (1993). As expressões finais serão apresentadas considerando o sistema de coordenadas utilizado no presente trabalho e serão mostradas logo a seguir.

A geometria do problema está esquematizada na Fig. 1 onde o sistema de coordenadas bicilíndrico utilizado na simulação do cabo aterrado está representado pelas linhas coordenadas η e ψ . A área hachurada corresponde ao domínio de solução do problema, simplificado devido à simetria do mesmo.

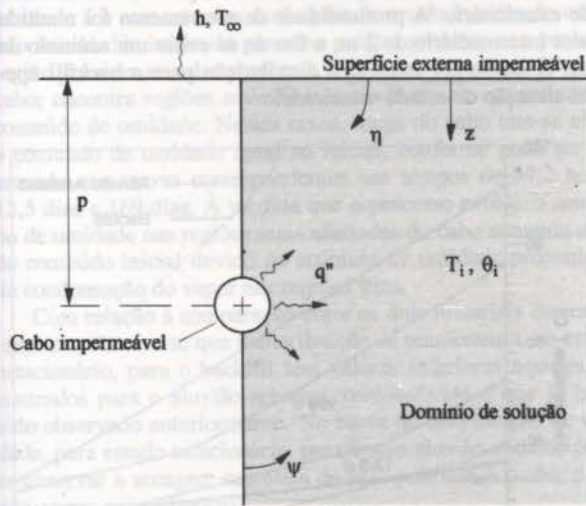


Fig. 1 - Geometria do problema.

Considerando os eixos coordenados utilizados, a equação da conservação da massa é escrita finalmente como sendo:

$$\frac{\partial(\sqrt{g}\theta)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[(D_T) \frac{\sqrt{g}}{g_\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} + (D_\theta) \frac{\sqrt{g}}{g_\eta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} - \sqrt{g} K_H z \right] + \frac{\partial}{\partial \psi} \left[(D_T) \frac{\sqrt{g}}{g_\psi} \frac{\partial T}{\partial \psi} + (D_\theta) \frac{\sqrt{g}}{g_\psi} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} - \sqrt{g} K_H z \right] \quad (6)$$

onde D_T é a difusividade térmica total ($D_{Tv} + D_{Tl}$) e D_θ é difusividade isotérmica total ($D_{\theta v} + D_{\theta l}$). As variáveis g_η e g_ψ (sendo que $g = g_\eta \cdot g_\psi$) são os coeficientes métricos do mapeamento que transforma o sistema de coordenadas bicilíndrico no sistema cartesiano, conforme discutido com maiores detalhes por Damasceno Ferreira (1993).

A equação da conservação da energia tem finalmente a seguinte forma:

$$\frac{\partial(\sqrt{g}CT)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[(k_* + \rho h_{iv} D_{Tv}) \frac{\sqrt{g}}{g_\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} + \rho h_{iv} D_{\theta v} \frac{\sqrt{g}}{g_\eta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial \psi} \left[(k_* + \rho h_{iv} D_{Tv}) \frac{\sqrt{g}}{g_\psi} \frac{\partial T}{\partial \psi} + \rho h_{iv} D_{\theta v} \frac{\sqrt{g}}{g_\psi} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right] \quad (7)$$

As condições iniciais e de contorno que devem ser satisfeitas pelas equações (6) e (7) podem ser visualizadas na Fig. 1. No início do processo todo o meio está a uma temperatura e um conteúdo de umidade constante e igual a T_i e θ_i , respectivamente.

Na superfície externa, tem-se troca de calor por convecção e assume-se tal superfície impermeável ao fluxo de massa. Na superfície do cabo, também impermeável ao fluxo de massa, há um fluxo de calor prescrito.

METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

As equações diferenciais governantes do problema, equações (6) e (7), foram resolvidas numericamente utilizando o método dos volumes finitos (Patankar, 1980), com a integração temporal utilizando um esquema implícito. Na discretização do domínio de solução, mostrado na Fig. 1, foram utilizados 100 volumes de controle na direção η , com refino de malha na região próxima ao cabo, e 30 volumes de controle na direção ψ . O intervalo de tempo escolhido era igual a 10 s no início do processo, sendo que o seu valor era aumentado a cada iteração, até um máximo de 1 hora, aproximadamente. A escolha tanto do número de volumes de controle quanto do intervalo de tempo levaram em conta o compromisso entre a precisão da solução numérica e o tempo computacional.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

A análise do processo de secagem de solos que envolvem cabos de potência aterrados é feita considerando como material de reaterramento dois solos, um natural e outro artificial. O conteúdo inicial de umidade do solo foi mantido em 0,15 para o aluvião arenoso e 0,06 para o backfill. Estes valores foram escolhidos por estarem um pouco acima do ponto correspondente à transição entre os estados funicular e pendular destes materiais (0,13 e 0,04 para o aluvião arenoso e para o backfill, respectivamente). Como será discutido mais adiante é exatamente nas proximidades deste valor de conteúdo de umidade que o meio passa a sofrer um processo mais intenso de secagem.

A temperatura inicial do solo e a temperatura ambiente são mantidas constantes e iguais a 20 °C; o coeficiente de transferência de calor convectivo na superfície ambiente é mantido em 15 W/m².s, simulando a existência de uma corrente de ar nesta superfície. Os resultados apresentados foram obtidos considerando o raio cabo é igual a 0,05 m e a potência dissipada pelo mesmo de 40 W/m. A fim de se avaliar a influência da profundidade de aterramento do cabo nos processos de secagem foram feitas simulações considerando que o cabo está aterrado a 1, 2 e 100 m da superfície.

A Fig. 2 apresentam os valores da temperatura junto à superfície do cabo como função do tempo. O parâmetro de curva é a profundidade de aterramento do cabo; as linhas mais finas correspondem ao aluvião arenoso, as linhas mais grossas ao backfill, e as linhas tracejadas à situação inicial.

A análise desta figura revela o intenso aquecimento que ocorre para o solo natural (aluvião arenoso) em comparação com o solo artificial (backfill). Para as três profundidades de aterramento mostradas, a temperatura na superfície do cabo ultrapassa a de 70 °C mostrando que, sob o ponto de vista térmico, o solo aluvião arenoso não é efetivamente recomendado para uso no aterramento de cabos de potência. Para as curvas correspondentes ao backfill e para as profundidades de aterramento de 1 e 2 m, observa-se a existência de patamares indicando que o estado estacionário foi atingido. Estes patamares não se formam para o solo aluvião arenoso, indicando um processo contínuo de aquecimento, mesmo para tempos muito altos. Vale salientar que a simulação mostrada corresponde a um tempo real de mais de três anos.

Com relação à profundidade de aterramento, observa-se que para tempos pequenos não há influência da profundidade no processo de aquecimento; à medida que o tempo passa, contudo, tem-se um aumento na temperatura do cabo que é tanto maior

quanto maior a profundidade. Com efeito, no início do processo de aquecimento, a presença da fronteira relativa à superfície do meio ambiente não é "sentida" pela região mais próxima ao cabo. Para tempos maiores, a frente de aquecimento avança para longe do cabo e passa a sofrer a influência do contorno externo. Para o caso da profundidade igual a 100 m, pode-se considerar que não há fronteira externa e a temperatura no cabo aumenta indefinidamente. Para a profundidade igual a 2 m, entretanto, observa-se a existência de um patamar indicando que o regime estacionário foi atingido; além disto, a temperatura no cabo é maior do que aquela correspondente à profundidade de 1 m.

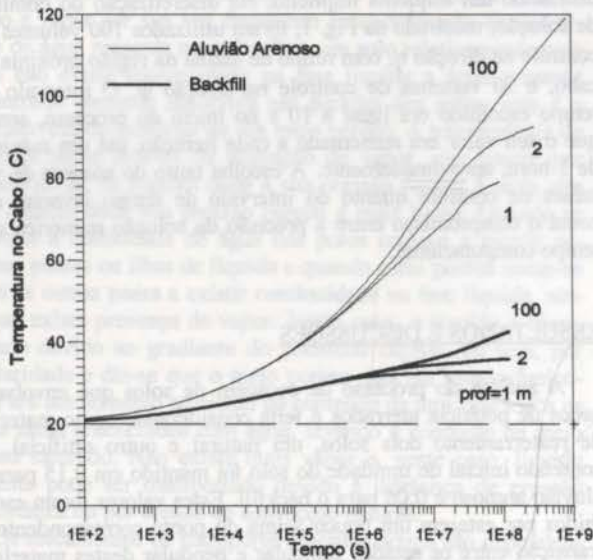


Fig. 2 - Temperatura no cabo

A Fig. 3 apresenta os valores do conteúdo de umidade, adimensionalizado em relação ao conteúdo inicial de umidade, junto à superfície adjacente ao cabo. Tais conteúdos de umidade estão em função do tempo para os dois materiais e para as três profundidades.

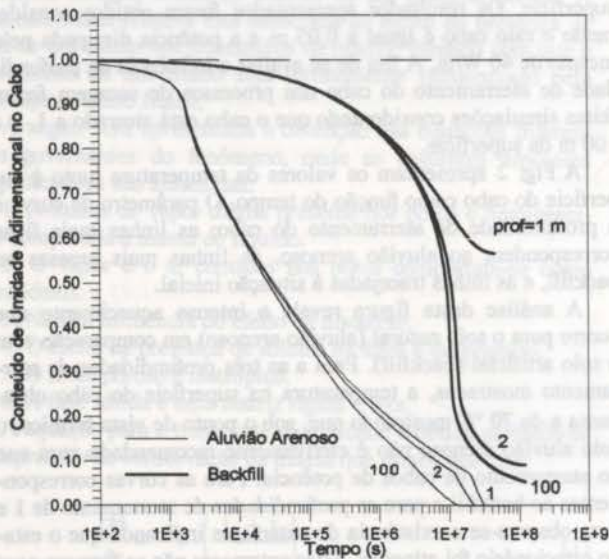


Fig. 3 - Conteúdo de umidade adimensional no cabo

As curvas correspondentes ao solo aluvião arenoso mostram um processo intenso de secagem, atingindo inclusive a situação de secagem total; para o backfill, tem-se curvas que mostram a secagem relativamente intensa do solo, e também a tendência de que o estado estacionário seja atingido sem que o solo seque

completamente. Para as curvas do solo aluvião arenoso, observa-se que ocorre uma pequena diferença entre elas, para tempos maiores, fazendo com que o solo que envolve o cabo que tem maior profundidade atinja a secagem total com menor tempo. Isto ocorre pelas mesmas razões discutidas anteriormente. Para as curvas do backfill, observa-se um decaimento que é tanto mais acentuado quanto maior a profundidades de aterramento indicando que o solo atinge um ponto onde a variação das propriedades pode ocasionar um processo mais efetivo de secagem.

As Figs. 4 e 5 apresentam as distribuições de temperatura e conteúdo de umidade adimensional, respectivamente, ao longo de uma linha horizontal traçada na altura da profundidade. Neste caso, o parâmetro de curva é o tempo que varia de valores próximos ao início do processo até tempos onde assume-se estado estacionário. A profundidade de aterramento foi mantida no valor intermediário de 2 m; a fim de se evitar um acúmulo de curvas, optou-se por mostrar a distribuição para o backfill apenas na situação de estado estacionário.

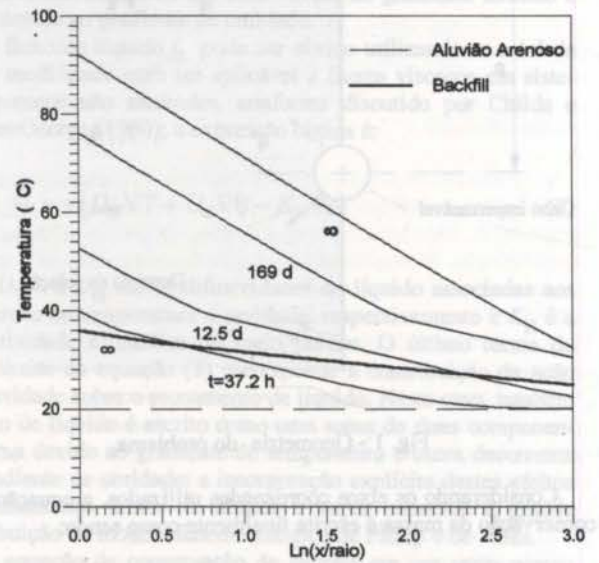


Fig. 4 - Distribuições de temperatura

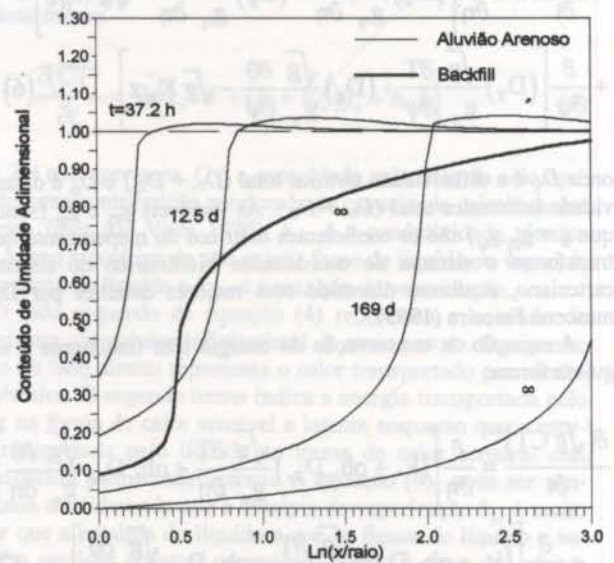


Fig. 5 - Distribuições de umidade adimensional

As distribuições de temperatura e de umidade mostram os avanços das frentes de aquecimento e de secagem à medida que o tempo evolui. Observa-se ainda que ocorre uma variação na inclinação das curvas de temperatura e um decaimento brusco

nas curvas de umidade para uma determinada posição (note que esta posição é a mesma nos dois gráficos). Quando a umidade atinge o ponto de transição entre os estados funicular e pendular, θ aproximadamente igual a 0,13 para o aluvião arenoso e aproximadamente igual a 0,04 para o backfill, ocorre uma secagem intensa do solo. O processo de secagem, que antes era governado pelo coeficiente D_{Tl} , uma vez que existia continuidade da fase líquida, passa a ser governado pelo coeficiente D_{Tv} , devido à presença de vapor nos poros, cujo valor, nesta região de conteúdo de umidade, é relativamente maior propiciando, assim, uma secagem mais intensa. A grande variação das propriedades nesta região de transição é a responsável pela ocorrência das variações nas inclinações das curvas de distribuição de temperatura.

Outra característica que pode ser observada nas curvas de umidade é o aumento dos conteúdos de umidade além do conteúdo inicial. No início do processo a água presente nos poros da região próxima ao cabo evapora e começa a migrar para longe do cabo; encontra regiões mais frias e condensa-se, aumentando o conteúdo de umidade. Nestes casos, longe do cabo tem-se ainda o conteúdo de umidade igual ao inicial, conforme pode ser observado nas curvas correspondentes aos tempos de 37,2 horas, 12,5 dias e 169 dias. À medida que o processo evolui, o conteúdo de umidade nas regiões mais afastadas do cabo aumenta além do conteúdo inicial devido ao acúmulo de umidade proveniente da condensação do vapor nas regiões frias.

Com relação à comparação entre os dois materiais de reateramento, observa-se que a distribuição de temperatura, no estado estacionário, para o backfill tem valores inferiores aqueles encontrados para o aluvião arenoso, corroborando o que já havia sido observado anteriormente. Na curva de distribuição de umidade, para estado estacionário, para o solo aluvião arenoso pode-se observar a secagem completa do solo próximo ao cabo, o que não ocorre para o backfill.

As Figs. 5 e 6 apresentam as distribuições de temperatura e conteúdo de umidade adimensional, para o estado estacionário, para os dois materiais tendo a profundidade de aterramento como parâmetro de curva.

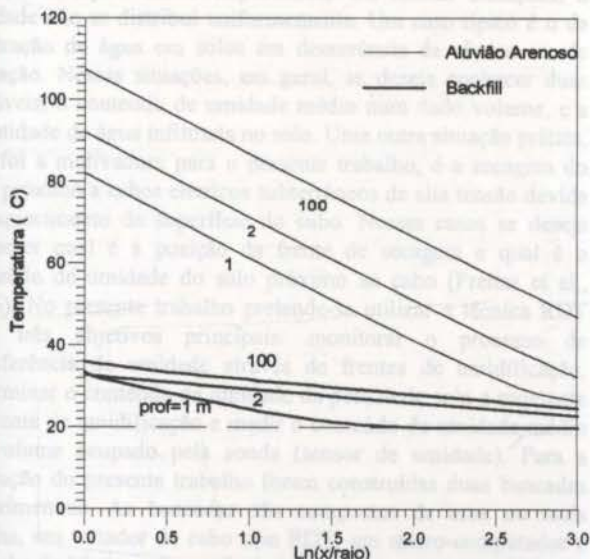


Fig. 5 - Distribuições de temperatura para estado estacionário

As mesmas características comentadas anteriormente a respeito da passagem pelo ponto de transição dos estados pendular e funicular podem ser observadas nestas figuras, especialmente nas curvas do backfill; ocorre uma variação nas inclinações das curvas de temperatura e um decaimento brusco nas curvas de umidade. Com relação à comparação entre os dois materiais observa-se novamente que os valores de temperatura atingidos pelo backfill são muito inferiores aos valores correspondentes ao

aluvião arenoso e que a secagem total do solo somente ocorre para este último, indicando, mais uma vez, que o solo artificial (backfill) é um material efetivamente mais eficiente sob o ponto de vista de dissipação térmica.

A comparação entre as curvas para as diferentes profundidades de aterramento mostra que, conforme o esperado, quanto maior a profundidade de aterramento mais intenso é o processo de aquecimento e de secagem do solo. Com efeito, a presença da fronteira externa relativa ao meio ambiente mais próxima ao cabo tende a minimizar o processo de aquecimento pois possibilita uma maior troca térmica entre o solo e o meio externo. À medida que a profundidade de aterramento aumenta esta fronteira se distancia do cabo fazendo com que a temperatura no solo aumente propiciando também uma maior secagem do solo.

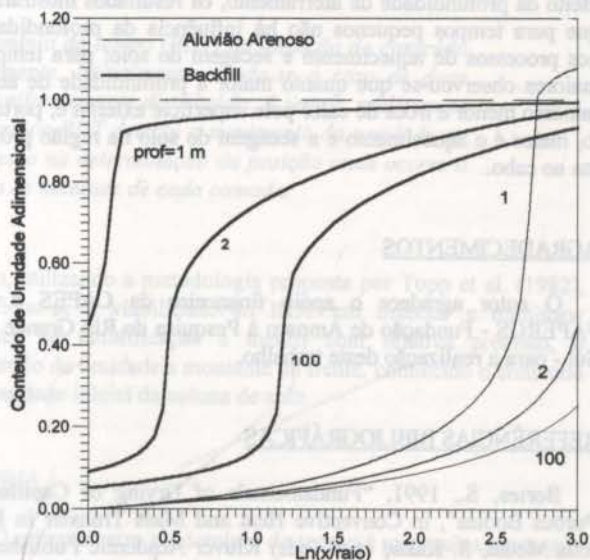


Fig. 6 - Distribuições de umidade adimensional para estado estacionário

CONCLUSÕES

O presente trabalho analisou o fenômeno da transferência simultânea de calor e massa em solos que envolvem cabos de potência aterrados. A análise deste fenômeno é de fundamental importância para o projeto destes cabos, pois é através dela que se prevê os processos de secagem evitando assim o eventual rompimento do isolamento do cabo, caso a temperatura do solo atinja um determinado valor limite.

Este processo envolve fundamentalmente o transporte de calor e umidade (na forma líquida e na forma vapor) em meios porosos insaturados e foi descrito matematicamente utilizando o modelo contínuo primeiramente apresentado por Philip de Vries (1957). Neste modelo as leis fenomenológicas de Fick, Darcy e Fourier são utilizadas nas equações de conservação de massa e energia e as equações resultantes trazem explicitamente as influências combinadas dos gradientes de temperatura e conteúdo de umidade em ambos os processos de transferência de calor e de massa. O objetivo deste trabalho foi investigar o processo de secagem que ocorre em dois materiais de reateramento distintos, um natural e outro artificial, variando-se a profundidade de reateramento do cabo. Todas as propriedades de transporte utilizadas no modelo matemático foram consideradas variáveis com a temperatura e o conteúdo de umidade. As equações diferenciais governantes do problema, equações da conservação da energia e da massa, foram resolvidas numericamente utilizando a técnica dos volumes finitos. A simulação da situação real de aterramento de um cabo de potência foi feita utilizando coordenadas bicilíndricas.

Os resultados obtidos da comparação entre os dois materiais de aterramento revelou que o material artificial (backfill) é mais eficiente sob o ponto de vista de dissipação térmica quando comparado ao material natural (aluvião arenoso). Em todas os casos vistos a temperatura na região próxima ao cabo para o backfill é muito inferior do que a temperatura para o solo aluvião arenoso. Nas curvas de umidade, este efeito é verificado através do atenuamento do processo de secagem. Nas curvas correspondentes às distribuições de temperatura e de conteúdo de umidade adimensional observa-se claramente o avanço das frentes de aquecimento e de secagem; também pode-se notar a passagem pelo ponto de conteúdo de umidade onde deixa de existir continuidade na fase líquida, ou seja, quando o meio passa do estado funicular para o estado pendular. Com relação ao efeito da profundidade de aterramento, os resultados mostraram que para tempos pequenos não há influência da profundidade nos processos de aquecimento e secagem do solo; para tempos maiores observou-se que quanto maior a profundidade de aterramento menor a troca de calor pela superfície externa e, portanto, maior é o aquecimento e a secagem do solo na região próxima ao cabo.

AGRADECIMENTOS

O autor agradece o apoio financeiro da CAPES e da FAPERGS - Fundação de Amparo à Pesquisa do Rio Grande do Sul - para a realização deste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bories, S., 1991, "Fundamentals of Drying of Capillary-Porous Bodies", in *Convective Heat and Mass Transfer in Porous Media*, S. Kakaç et al (eds) Kluwer Academic Publishers, pp. 391-434.

Damasceno Ferreira, L.S., 1993, "Transferência de Calor e Migração de Umidade em Solos que Envolvem Cabos de Potência Aterrados", Tese de Doutorado, UFSC.

De Vries, D.A., 1975, "Heat Transfer in Soils", *Heat and Mass Transfer in Biosphere*, pp. 5-28, Scripta, Washington.

Hartley, J.G., 1987, "Coupled Heat and Moisture Migration in Soils: A Review", Chapter 4 in *Advances in Drying*, A.S. Mujumdar (ed), Hemisphere, Washington.

Hartley, J.G., Couvillion, R.J., 1981, "Drying Front Movement Near Low-Intensity, Impermeable Underground Heat Sources", *J. Heat Transfer*, vol. 108, pp. 182-189.

Hartley, J.G.; Black, W.; Bush, R.A.; Martin Jr, M.A., 1982, "Thermal Stability of Soils Adjacent to Underground Transmission Power Cables", Technical Report of Georgia, Institute of Technology for EPRI.

Oliveira Jr., A.A.M., 1993, "Caracterização das Propriedades Termo-Hidráulicas de Materiais Artificiais para Reaterro de Cabos Elétricos de Potência", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina.

Patankar, S.V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere, Washington.

Phillip, J.R.; De Vries, D.A., 1957, "Water movement in Porous Media under Temperature Gradients", *Trans. Am. Geophys. Union*, vol. 29, pp. 222-232.

Childs, E.C.; Collis-George, N. (1950), "The Permeability of Porous Materials", *Proc. Roy. Soc.*, vol. 201A, pp. 392-405.

Whitaker, S. (1977), "Simultaneous Heat Massa and Momentum Transfer in Porous Media", *Drying Technology*, vol. 1, pp. 3-33.

ABSTRACT

The present work deals with the drying process that involves simultaneous heat and mass transfer in soils surrounding underground electric power cables. A numerical analysis is performed using a control volume method in conjunction with a bicylindrical coordinate system to simulate the buried cable. Two different soils are investigated as burying material, one natural and other artificial. The results are presented in the form of temperature and nondimensional moisture content profiles as a function of time, for different burying depths of the cable.

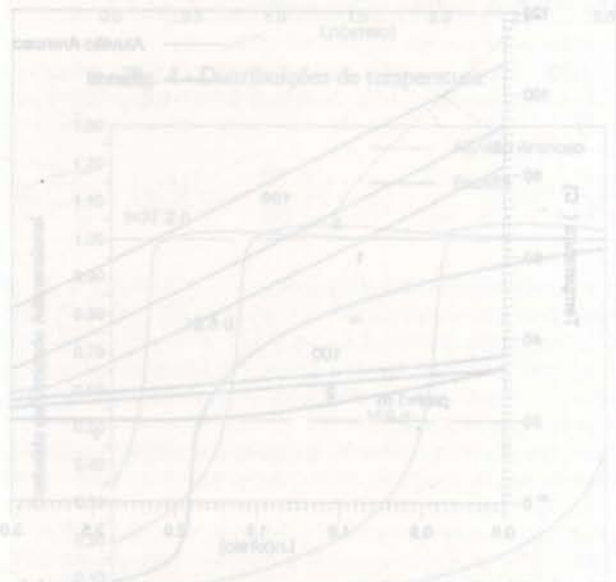


Fig. 2 - Distribuição de temperatura e conteúdo de umidade adimensional em função da profundidade de aterramento para diferentes tempos de exposição.



MONITORAMENTO DE FRENTES DE UMIDIFICAÇÃO EM SOLOS USANDO A TÉCNICA DA REFLECTOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO

Carlos Gonzalo Larrosa R., José A. Bellini da Cunha Neto e Álvaro Toubes Prata

Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Santa Catarina
88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil



SUMÁRIO

Neste trabalho se utiliza a técnica da reflectometria no domínio do tempo (RDT) na medição do conteúdo de umidade de solos com umidade distribuída desuniformemente. Inicialmente estuda-se o caso de duas camadas de solo sobrepostas. Cada camada possui umidade uniformemente distribuída. A seguir, realizam-se experimentos de infiltração, que permitem verificar como a técnica RDT detecta o movimento da umidade no solo. Verificou-se que a técnica RDT pode ser usada com sucesso na determinação da posição onde ocorre a maior variação de umidade bem como na medição do conteúdo de umidade de cada camada.

INTRODUÇÃO

A técnica da reflectometria no domínio do tempo (Fellner-Feldegg, 1969) vem demonstrando, nos últimos anos, ser um método confiável para a determinação do conteúdo de umidade de solos onde a umidade está distribuída uniformemente. Topp et al. (1980) mostraram que o conteúdo de umidade de solos pode ser determinado com uma incerteza de medição de 1,3%. Larrosa (1996), estudando um tipo de solo artificial, também constatou que as incertezas de medição do conteúdo de umidade são muito pequenas.

Embora casos onde a umidade esteja homogeneamente distribuída sejam muito importantes, em muitas situações, a umidade não se distribui uniformemente. Um caso típico é o da infiltração de água em solos em decorrência de chuvas ou de irrigação. Nessas situações, em geral, se deseja conhecer duas variáveis, o conteúdo de umidade médio num dado volume, e a quantidade de água infiltrada no solo. Uma outra situação prática, que foi a motivadora para o presente trabalho, é a secagem do solo próximo a cabos elétricos subterrâneos de alta tensão devida ao aquecimento da superfície do cabo. Nesses casos se deseja conhecer qual é a posição da frente de secagem e qual é o conteúdo de umidade do solo próximo ao cabo (Freitas et al., 1996). No presente trabalho pretende-se utilizar a técnica RDT com três objetivos principais: monitorar o processo de transferência de umidade através de frentes de umidificação, determinar o conteúdo de umidade da porção de solo a montante da frente de umidificação e medir o conteúdo de umidade médio no volume ocupado pela sonda (sensor de umidade). Para a execução do presente trabalho foram construídas duas bancadas experimentais. As bancadas são compostas de uma ou mais sondas, um testador de cabo tipo RDT, um micro-computador e um tubo de Mariotte (bancada de infiltração). A primeira bancada foi elaborada para a execução de experimentos estáticos. Nesse tipo de ensaio a sonda atravessa duas camadas com tamanhos e umidades conhecidas. Foram testados os casos de camada úmida sobrepondo camada seca e vice-versa. Os experimentos dinâmicos foram realizados em seguida. Realizaram-se experimentos de infiltração horizontal em colunas de solo homogêneas e unidimensionais.

Os resultados experimentais comprovaram a capacidade do RDT em determinar o conteúdo de umidade médio do solo. Além

disso, utilizando a metodologia proposta por Topp et al. (1982), verificou-se a viabilidade do RDT em detectar e monitorar frentes de umidificação e medir, com relativa precisão, o conteúdo de umidade a montante da frente, conhecido o conteúdo de umidade inicial da coluna de solo.

TEORIA

O reflectômetro no domínio do tempo é um equipamento que gera um pequeno pulso de tensão que se propaga através de uma linha de transmissão ou sonda. Toda vez que existir uma descontinuidade, ou seja, mudanças na constante dielétrica do meio que circunda a sonda, parte desse pulso é refletido de volta e parte atravessa essa descontinuidade. Os tempos relativos, a cada reflexão, são todos medidos pelo equipamento.

Para uma sonda de comprimento L , a velocidade média que o pulso leva para ir do início até o final da sonda e retornar é:

$$V = \frac{2L}{t} \quad (1)$$

onde t é o tempo total de viagem do pulso.

Por outro lado, a velocidade da onda eletromagnética numa linha de transmissão é apenas função do meio no qual se propaga. No caso de solos, ver Topp et al. (1980) ou Davis and Chudobiak (1975), têm-se que:

$$V = \frac{c}{\sqrt{K_a}} \quad (2)$$

onde c é a velocidade da onda eletromagnética no vácuo (3×10^8 m/s) e K_a é a constante dielétrica aparente do solo.

Igualando a Eq. (1) à Eq. (2), e rearranjando, têm-se:

$$K_a = \left(\frac{ct}{2L} \right)^2 \quad (3)$$

Portanto, a partir da Eq. (3), é possível determinar a constante dielétrica do solo e com base na curva de calibração determinar o

conteúdo de umidade desse solo.

Se uma sonda é introduzida de forma a atravessar duas ou mais camadas de solo com umidades diferentes, o RDT apresentará os pulsos relativos a cada mudança da umidade do meio, pois nesse caso cada camada de solo apresenta uma constante dielétrica diferente (a constante dielétrica é uma função forte do conteúdo de umidade). Um aspecto do traço obtido pelo equipamento quando a camada seca antecede a camada úmida é apresentado na Figura 1.

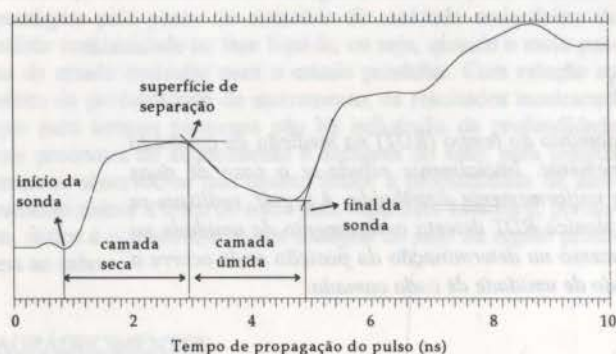


Figura 1 - Camada seca antecedendo a camada úmida.

A determinação da posição da superfície de separação entre duas camadas com umidades diferentes, bem como a obtenção da umidade média de cada camada, é possível, desde que uma condição de contorno seja conhecida. Se a umidade (θ_v) da camada seca é conhecida, então através da curva de calibração do solo determina-se a constante dielétrica aparente (K_a) dessa camada. Portanto, se cada trecho da curva obtida possa ser considerado como uma curva independente, então, através da Eq. (3), o comprimento da camada seca (camada S) pode ser obtido através da seguinte equação:

$$L_S = \frac{ct_S}{2\sqrt{K_{aS}}} \quad (4)$$

Como o comprimento da sonda (L) é conhecido, a espessura da camada úmida (camada U) pode ser obtida de: $L_U = L - L_S$. Dessa maneira, a constante dielétrica da camada úmida será:

$$K_{aU} = \left(\frac{ct_U}{2L_U} \right)^2 \quad (5)$$

e, através da curva de calibração, obtêm-se o conteúdo de umidade da camada úmida. Um procedimento semelhante seria utilizado se fosse conhecido o conteúdo de umidade da camada úmida, ou a posição da superfície de separação. É importante ressaltar que nessa análise considerou-se $t_S + t_U = t$, ou seja, o tempo para que o pulso atravesse a camada seca mais o tempo que o pulso leva para cruzar a camada úmida é igual ao tempo total. Portanto, são desprezadas as múltiplas reflexões que ocorrem na interface (Topp et al., 1982).

MATERIAIS E MÉTODOS

Calibração. Os ensaios foram realizados com um solo artificial, denominado *backfill*, que é utilizado no aterramento de cabos elétricos subterrâneos de alta tensão. Esse tipo de solo

possui características dielétricas diferentes de solos naturais, e essa foi a razão para a realização de uma calibração específica.

Na Figura 2 é apresentado um desenho esquemático da bancada de calibração. Utilizaram-se sondas com três hastes conforme a configuração proposta por Zegelin et al. (1989).

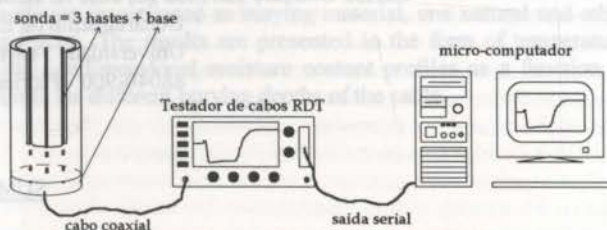


Figura 2 - Bancada utilizada para calibração.

Realizaram-se mais de 50 experimentos onde se variou o comprimento das hastes (L), e a distância entre hastes (S). O diâmetro das hastes (d) não foi alterado durante os experimentos.

Nos ensaios de infiltração utilizaram-se sondas pequenas e de base retangular. Como a resposta desse tipo de sonda é diferente da sonda utilizada para a calibração do *backfill*, optou-se por realizar uma calibração específica. Na Figura 3 são apresentados os resultados da calibração efetuada para o *backfill*, tanto para as sondas de base circular quanto para as sondas de base retangular. Nesta figura também é apresentada a curva de Topp et al. (1980), que estudou quatro tipos de solos naturais. Os detalhes relativos à calibração do solo bem como a avaliação da geometria da sonda na resposta do equipamento podem ser vistos no trabalho de Larrosa et al. (1995). No trabalho de Larrosa (1996) são discutidas as diferenças encontradas entre as curvas de calibração das sondas de base circular quando comparadas às sondas de base retangular.

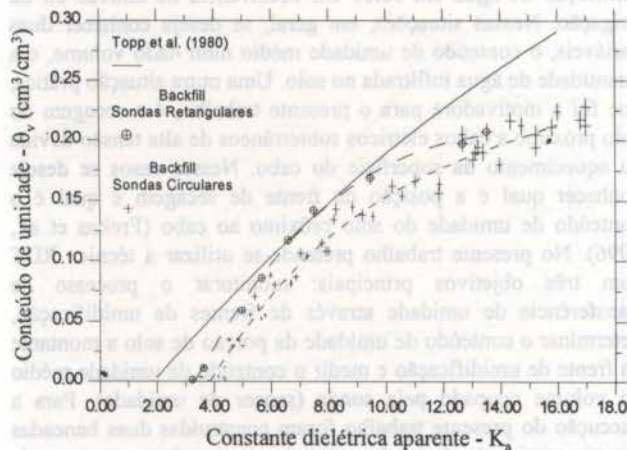


Figura 3 - Curva de calibração do solo artificial utilizado.

A curva de calibração das sondas de base circular é:

$$\theta_v = -0,195 + 0,0637K_a - 0,00373K_a^2 + 8,39 \times 10^{-5} K_a^3 \quad (6)$$

Para as sondas de base retangular, têm-se:

$$\theta_v = -0,186 + 0,0681K_a - 0,00391K_a^2 + 7,46 \times 10^{-5} K_a^3 \quad (7)$$

Experimentos Estáticos. A bancada usada nos ensaios estáticos foi a mesma utilizada para a calibração dos solos (Figura 2). Entretanto, neste caso, colocou-se uma chapa de PVC (2 mm de espessura) para separar a camada úmida da camada seca. Verificou-se que a chapa de PVC não alterou o sinal produzido pelo equipamento, uma vez que a sua espessura é muito pequena.

Foram realizados 8 ensaios com o *backfill*. Utilizou-se uma sonda com $L = 250 \pm 0,1$ mm, $S = 17,3 \pm 0,5$ mm e $d = 2,5 \pm 0,05$ mm. Em 5 ensaios a camada seca antecedia a camada úmida, enquanto nos três ensaios seguintes, colocou-se a camada úmida antes da camada seca. Portanto, tratavam-se de ensaios com degraus de umidade bem definidos. Nos experimentos realizados variou-se o conteúdo de umidade e a espessura de cada camada. Ambos, os parâmetros, eram conhecidos.

A principal vantagem desse tipo de ensaio é permitir o conhecimento mais preciso do traço obtido pelo RDT. Como todas as variáveis são conhecidas é possível se determinar com precisão o ponto referente à fronteira entre as camadas.

Experimentos Dinâmicos. A bancada utilizada nos experimentos de infiltração é mostrada na Figura 4. Nessa bancada a coluna de solo é colocada horizontalmente e o processo de infiltração é realizado a uma pressão negativa (ψ).

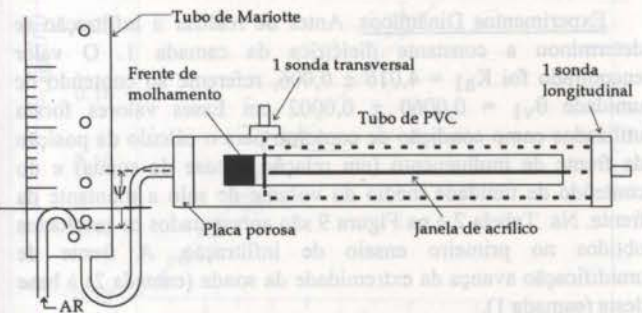


Figura 4 - Bancada utilizada nos ensaios de infiltração horizontal.

Foram executados dois ensaios de infiltração horizontal em coluna unidimensional semi-infinita. No primeiro ensaio foi instalada somente uma sonda circular longitudinal ($L = 248,0 \pm 0,1$ mm, $S = 25 \pm 0,5$ mm e $d = 2 \pm 0,05$ mm), enquanto no segundo ensaio instalou-se uma sonda transversal ($L = 80,7 \pm 0,1$ mm, $S = 12 \pm 0,5$ mm e $d = 2 \pm 0,05$ mm) além da sonda longitudinal. Essas duas sondas foram colocadas de forma a não haver cruzamento dos campos elétricos e magnéticos. Nesses arranjos a sonda transversal é utilizada para medir a umidade média numa seção da coluna de solo, e compará-la com os resultados obtidos pela sonda circular longitudinal.

A posição da frente de molhamento e o tempo de infiltração foram anotados diversas vezes. Dessa maneira foi possível comparar o valor da posição da frente determinada com o RDT, com aquele determinado visualmente. No segundo ensaio, com as duas sondas, além da posição da frente, era possível comparar o valor do conteúdo de umidade medido com a sonda longitudinal com aquele medido com a sonda transversal. Nesse caso, o valor de θ_v obtido com a sonda longitudinal deve ser ligeiramente inferior ao valor de θ_v obtido com a sonda transversal, já que a sonda longitudinal mede o conteúdo de umidade médio desde a frente de molhamento até o final das hastes.

RESULTADOS OBTIDOS

Experimentos Estáticos. Na Figura 5 são apresentados dois traços obtidos durante os experimentos estáticos. Em um dos traços mostra-se a configuração típica do sinal obtido pelo RDT para camada seca antecedendo a camada úmida. O outro traço indica a configuração oposta.

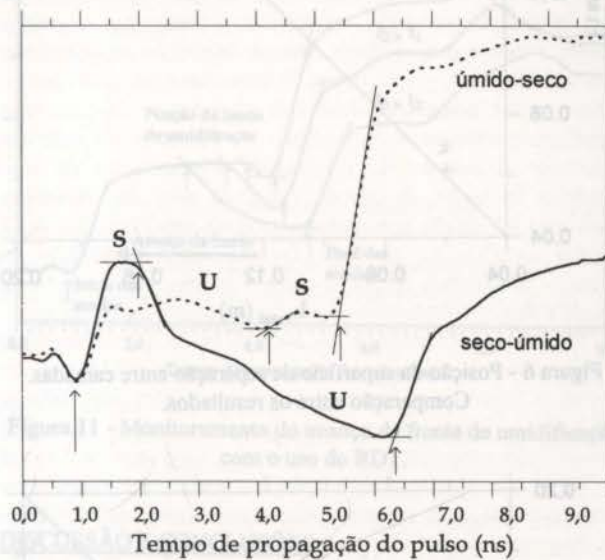


Figura 5 - Ensaios estáticos. Camadas seca-úmida e úmida-seca.

Na Tabela 1 e nas Figuras 6 e 7 são apresentados os resultados obtidos nos experimentos estáticos. Nesses casos, o subíndice 1 ou 2 indica a camada a que se refere a variável. A camada 1 é a camada mais próxima da base da sonda e a camada 2 a mais distante. Para utilizar a metodologia apresentada, o conteúdo de umidade da camada 1 é suposto conhecido.

Tabela 1 - Resultados obtidos nos experimentos estáticos.

Exp	Conf.	θ_{v1} (m^3/m^3)	$L1$ real (m)	$L1$ RDT (m)	θ_{v2} real (m^3/m^3)	θ_{v2} RDT (m^3/m^3)
1	S/U	0,0303 $\pm 0,0010$	0,120 $\pm 0,002$	0,130 $\pm 0,002$	0,141 $\pm 0,005$	0,138 $\pm 0,005$
2	S/U	0,0221 $\pm 0,0007$	0,120 $\pm 0,002$	0,126 $\pm 0,002$	0,099 $\pm 0,003$	0,099 $\pm 0,006$
3	S/U	0,0490 $\pm 0,0016$	0,060 $\pm 0,002$	0,070 $\pm 0,002$	0,082 $\pm 0,003$	0,105 $\pm 0,002$
4	S/U	0,0529 $\pm 0,0018$	0,060 $\pm 0,002$	0,068 $\pm 0,001$	0,110 $\pm 0,004$	0,103 $\pm 0,002$
5	S/U	0,0702 $\pm 0,0024$	0,060 $\pm 0,002$	0,062 $\pm 0,002$	0,153 $\pm 0,005$	0,181 $\pm 0,003$
6	U/S	0,137 $\pm 0,005$	0,185 $\pm 0,002$	0,174 $\pm 0,004$	0,055 $\pm 0,002$	0,063 $\pm 0,020$
7	U/S	0,136 $\pm 0,005$	0,150 $\pm 0,002$	0,132 $\pm 0,003$	0,088 $\pm 0,003$	0,094 $\pm 0,010$
8	U/S	0,111 $\pm 0,004$	0,180 $\pm 0,002$	0,178 $\pm 0,003$	0,059 $\pm 0,002$	0,092 $\pm 0,017$

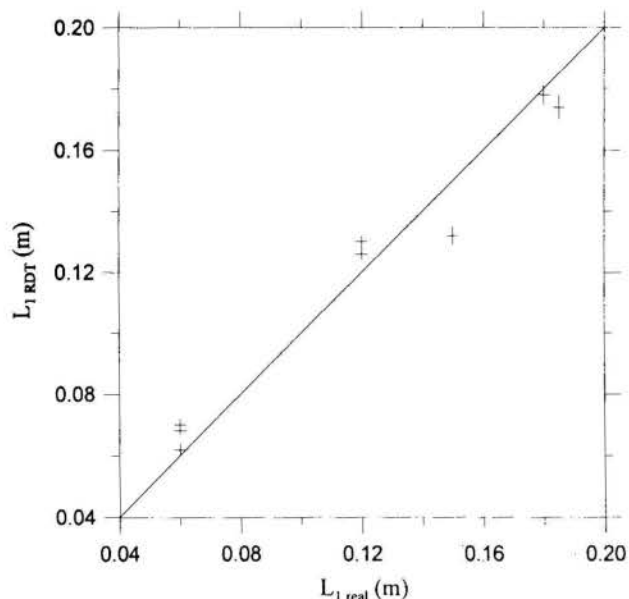


Figura 6 - Posição da superfície de separação entre camadas. Comparação entre os resultados.

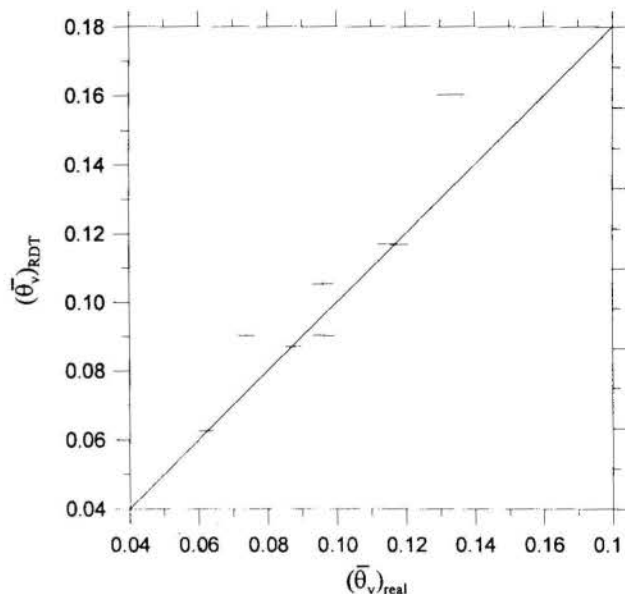


Figura 8 - Conteúdo de umidade médio medido com o RDT versus valor determinado gravimetricamente.

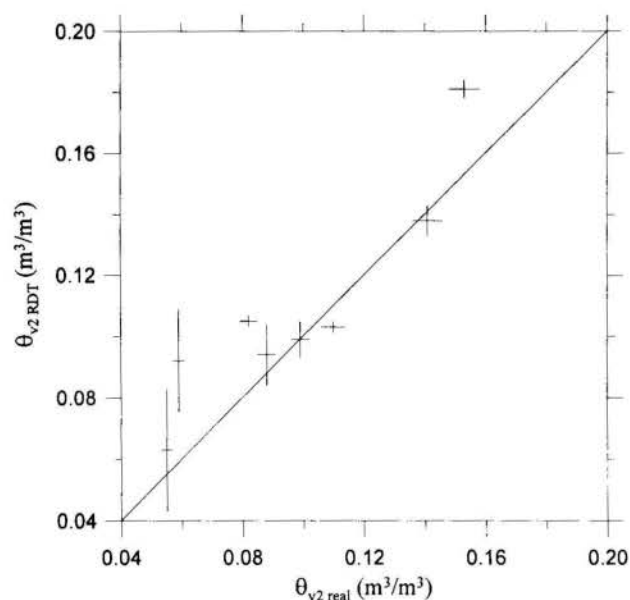


Figura 7 - Conteúdo de umidade da camada 2. Comparação entre os resultados.

Uma característica interessante de ser observada é que o RDT mede o conteúdo de umidade médio do solo. No caso de várias camadas, o valor de θ_v obtido é a média ponderada por volume dos conteúdos de umidade de cada camada. Na Figura 8 são mostrados os resultados de $(\bar{\theta}_v)_{RDT} \times (\bar{\theta}_v)_{real}$.

Experimentos Dinâmicos. Antes de realizar a infiltração se determinou a constante dielétrica da camada 1. O valor encontrado foi $K_{a1} = 4,016 \pm 0,006$, referente ao conteúdo de umidade $\theta_{v1} = 0,0060 \pm 0,0002$ cm. Esses valores foram utilizados como condição de contorno para o cálculo da posição da frente de molhamento (em relação à base da sonda) e do conteúdo de umidade médio do volume de solo a montante da frente. Na Tabela 2 e na Figura 9 são apresentados os resultados obtidos no primeiro ensaio de infiltração. A frente de umidificação avança da extremidade da sonda (camada 2) à base desta (camada 1).

Tabela 2 - Resultados obtidos no primeiro ensaio de infiltração.

Tempo (s)	L_1 real (m)	L_1 RDT (m)	K_{a2} RDT	θ_{v2} RDT (cm^3/cm^3)
0	$0,241 \pm 0,005$	$0,228 \pm 0,004$	$13,8 \pm 5,9$	$0,19 \pm 0,05$
4800	$0,221 \pm 0,005$	$0,221 \pm 0,004$	$12,1 \pm 3,8$	$0,18 \pm 0,04$
6000	$0,215 \pm 0,005$	$0,218 \pm 0,004$	$12,1 \pm 3,5$	$0,18 \pm 0,04$
10200	$0,198 \pm 0,005$	$0,204 \pm 0,004$	$11,4 \pm 2,2$	$0,17 \pm 0,02$
21000	$0,168 \pm 0,005$	$0,169 \pm 0,003$	$10,0 \pm 1,1$	$0,15 \pm 0,02$
25800	$0,155 \pm 0,005$	$0,157 \pm 0,003$	$10,5 \pm 1,0$	$0,16 \pm 0,01$
28500	$0,148 \pm 0,005$	$0,151 \pm 0,003$	$10,2 \pm 0,9$	$0,16 \pm 0,01$

Nota-se, da Tabela 2, que as incertezas de medição da constante dielétrica e, conseqüentemente, do conteúdo de umidade da camada 2 são bastante grandes. Para a primeira situação, quando a frente de umidificação se situa bem na extremidade da sonda, a incerteza de K_a chega a 43%. Entretanto, a incerteza vai diminuindo conforme o comprimento da camada úmida (2) vai aumentando.

No segundo experimento de infiltração foram introduzidas duas sondas. Manteve-se a sonda longitudinal (long.) e colocou-se uma sonda transversal (transv.) ao escoamento. Na Tabela 3 e nas Figuras 9 e 10 são mostrados os resultados obtidos neste segundo experimento. A constante dielétrica da camada 1 é $3,857 \pm 0,006$, referente a um conteúdo de umidade zero.

Tabela 3 - Resultados obtidos no segundo ensaio de infiltração.

L_1 real (m)	L_1 RDT (m)	K_{a2} RDT (transv.)	θ_{v2} RDT (transv.) (cm^3/cm^3)	K_{a2} RDT (long.)	θ_{v2} RDT (long.) (cm^3/cm^3)
0,155 $\pm 0,005$	0,148 $\pm 0,003$	8,12 $\pm 0,12$	0,149 $\pm 0,002$	10,3 $\pm 0,7$	0,157 $\pm 0,008$
0,152 $\pm 0,005$	0,147 $\pm 0,003$	8,14 $\pm 0,12$	0,149 $\pm 0,002$	11,1 $\pm 0,7$	0,167 $\pm 0,008$
0,143 $\pm 0,005$	0,139 $\pm 0,003$	8,24 $\pm 0,12$	0,151 $\pm 0,002$	10,8 $\pm 0,7$	0,162 $\pm 0,008$
0,134 $\pm 0,005$	0,131 $\pm 0,002$	8,24 $\pm 0,12$	0,151 $\pm 0,002$	10,6 $\pm 0,6$	0,162 $\pm 0,007$
0,128 $\pm 0,005$	0,126 $\pm 0,002$	8,38 $\pm 0,12$	0,154 $\pm 0,002$	10,8 $\pm 0,6$	0,164 $\pm 0,007$

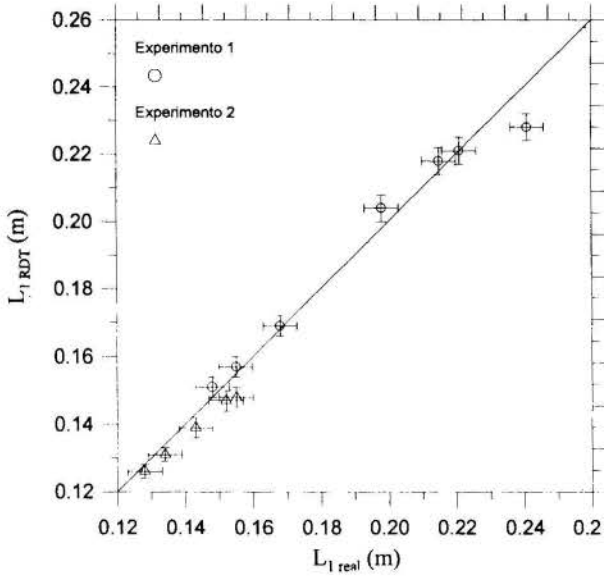


Figura 9 - Resultados do primeiro e segundo experimentos.

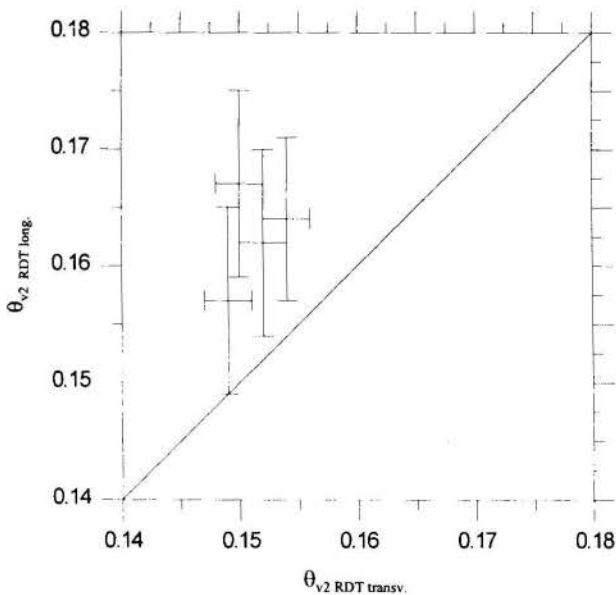


Figura 10 - Resultados obtidos no segundo experimento.

A Figura 11 foi colocada com o objetivo de ilustrar como o RDT detecta o avanço de uma frente de umidificação. Nesta ilustração são mostrados 3 traços obtidos em tempos distintos, onde fica claro que a frente avança da direita para a esquerda (da extremidade para a base da sonda).

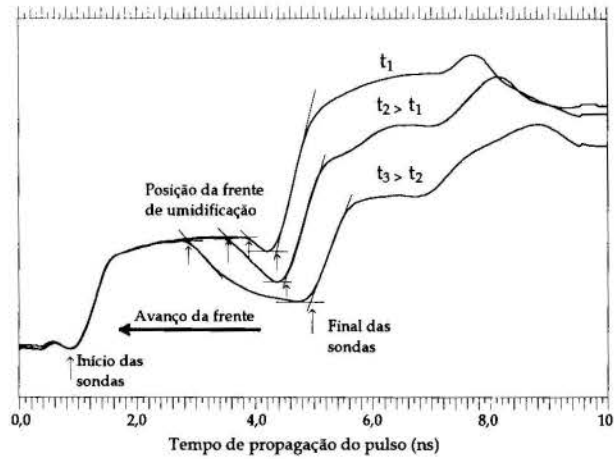


Figura 11 - Monitoramento do avanço da frente de umidificação com o uso do RDT.

DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Antes de passar à discussão dos experimentos estáticos e dinâmicos, é conveniente ressaltar alguns detalhes de âmbito geral.

Apesar do traço do RDT apresentar todas as variações de impedância, relativas às mudanças na constante dielétrica do meio, é necessário conhecer uma condição de contorno para determinar a posição da superfície de separação entre duas camadas e o conteúdo de umidade médio de cada camada. Essa restrição se verifica pois o número de equações obtidas é sempre inferior ao número de variáveis. Uma forma alternativa de resolver este problema é se colocar duas sondas. Uma das sondas forneceria a condição de contorno necessária, enquanto a outra sonda determinaria os valores desejados.

A despeito das limitações da técnica, felizmente, em problemas práticos sempre existe a possibilidade de conhecer uma condição de contorno. Por exemplo, no caso de cabos elétricos subterrâneos de alta tensão, o conteúdo de umidade do solo distante do cabo é uma variável que pode ser determinada. Dessa forma, é possível monitorar o processo de secagem do solo próximo ao cabo.

Experimentos Estáticos. Estes experimentos foram divididos em dois tipos. No primeiro tipo, a camada seca antecedia a camada úmida e no segundo tipo a camada úmida vinha antes da camada seca, tomando a base da sonda como referencial. Verifica-se a partir da Tabela 1 e da Figura 6 que no caso de camada seca antecedendo a camada úmida existe uma superestimativa da posição da superfície de separação, enquanto no caso de camada úmida antecedendo a camada seca, ocorre o oposto. Estes desvios são consequência das dificuldades de se interpretar o traço obtido pelo RDT, em especial quando a camada úmida antecede a camada seca. Neste caso, verificou-se que o ponto de separação entre camadas se situa um pouco a frente do ponto de intersecção entre as retas tangentes (Figura 5). Como não existe um critério definido para se estabelecer com segurança o ponto exato da superfície de separação,

convencionou-se o ponto de intersecção das retas tangentes como a posição dessa superfície. Dasberg and Hopmans (1992) e Nadler et al. (1991) também tiveram dificuldades em interpretar o sinal quando a camada úmida antecede a camada seca.

Outro aspecto interessante de ser observado é a ordem de grandeza das incertezas de medição. Verifica-se que quanto menor for o tamanho da segunda camada, maiores serão as incertezas de medição da constante dielétrica e do conteúdo de umidade desta camada.

Apesar de existir uma certa dificuldade na interpretação do sinal produzido pelo RDT, verifica-se, a partir dos resultados obtidos uma boa concordância entre os resultados experimentais e os valores de θ_{v2} e L_1 reais. É importante salientar que os dados reais também apresentam incertezas de medição significativas. No caso da medição do conteúdo de umidade utilizou-se o método da gravimetria em amostras de solo coletadas ao longo da coluna. Portanto, além das incertezas associadas à medição gravimétrica, existem incertezas devidas à retirada aleatória de amostras. O ideal seria a medição do conteúdo de umidade de toda a camada de solo, o que é inviável devido a pequena capacidade das balanças e estufas utilizadas.

Um aspecto interessante de ser observado é a comparação entre o conteúdo de umidade médio obtido com o RDT com os valores do conteúdo de umidade médio ponderados pelo volume, obtidos gravimetricamente. Nota-se que existe uma boa concordância entre esses valores. Portanto, a hipótese de Topp et al. (1982), que considera que a soma dos tempos que o pulso leva para atravessar cada camada é igual ao tempo total, funciona satisfatoriamente para este caso.

Experimentos Dinâmicos. Nos experimentos de infiltração, em condição de sucção, não existe um degrau de conteúdo de umidade bem definido. Em vez disso existe uma região de transição seca-úmida. Essa região é formada uma vez que os pequenos poros são preenchidos antes dos grandes poros. Dessa forma, o RDT detecta a posição em que o gradiente de umidade é máximo (Figura 11). Essa posição é definida como a posição da frente de umidificação, que, para quem observa da janela de acrílico, corresponde ao ponto cuja variação de coloração do solo é máxima.

Com base nas Tabelas 2 e 3 e na Figura 9, nota-se que o RDT determina a posição da frente de umidificação com bastante confiabilidade. Exceção somente no caso em que a frente se situa próxima das extremidades da sonda. Nessas situações, a determinação da frente é menos precisa, uma vez que existem efeitos de borda no campo eletromagnético. Nota-se também, que em ambos os casos as incertezas de medição do comprimento da camada seca com o RDT são da mesma ordem de grandeza das incertezas obtidas através do exame visual.

Através da Figura 10 é possível verificar que o RDT superestima o conteúdo de umidade da porção de solo a montante da frente. Além dessa característica, é interessante notar que a incerteza de medição da umidade média a montante da frente, com o uso da sonda longitudinal, é 3 a 4 vezes maior que a incerteza obtida com a sonda transversal. Esse fato já havia sido observado em experimentos estáticos, onde se verificou que quanto menor for o comprimento da camada úmida, maiores serão as incertezas de medição do conteúdo de umidade dessa camada.

REFERÊNCIAS

Dasberg, S. and Hopmans, J. W., 1992, "Time Domain Reflectometry Calibration for Uniformly and Nonuniformly

Wetted Sandy and Clayey Loam Soils", *Soil Science Society of America Journal*, Vol. 56, pp. 1341-1345.

Davis, J. L. and Chudobiak, 1975, "In Situ Meter for Measuring Relative Permittivity of Soil", *Geol. Surv. Can.*, pap 75-1A, pp. 75-79.

Fellner-Feldegg, H., 1969, "The Measurement of Dielectrics in the Time Domain", *Journal of Physic Chemistry*, Vol. 73, pp. 616-623.

Freitas, D. S., Prata, A. T. and Lima, A. J., 1996, "Thermal Performance of Underground Power Cables with Constant Currents in Presence of Moisture Migration in Surrounding Soil", Accepted for IEEE Transactions on Power Delivery.

Larrosa, C. G. R., 1996, "Medição do Conteúdo de Umidade de Solos Artificiais Usando a Técnica da Reflectometria no Domínio do Tempo", Dissertação de Mestrado, Univ. Fed. de Santa Catarina, Florianópolis, SC.

Larrosa, C. G. R., Cunha Neto, J. A. B. e Prata, A. T., 1995, "Medição do Conteúdo de Umidade de Solos Artificiais Usando a Técnica da Reflectometria no Domínio do Tempo", *Anais do XXIII Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados*, Maringá, PR.

Nadler, A., Dasberg, S. and Lapid, I., 1991, "Time Domain Reflectometry Measurements of Water Content and Electrical Conductivity of Layered Soil Columns", *Soil Science Society of America Journal*, Vol. 55, pp. 938-943.

Topp, G. C., Davis, J. L., and Annan, A. P., 1980, "Electromagnetic Determination of Soil Water Content: Measurements in Coaxial Transmission Lines", *Water Resources Research*, Vol. 16, pp. 574-582.

Topp, G. C., Davis, J. L., and Annan, A. P., 1982, "Electromagnetic Determination of Soil Water Content Using TDR: I. Applications to Wetting Fronts and Steep Gradients", *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 46, pp. 672-678.

Zegelin, S. J., White, I. and Jenkins, D.R., 1989, "Improved Field Probes for Soil Water Content and Electrical Conductivity Measurement Using Time Domain Reflectometry", *Water Resources Research*, Vol. 25, pp. 2367-2376.



**TRANSPORTE DE SOLUTOS EM SOLOS SOB CONDIÇÕES
DE SATURAÇÃO TOTAL E PARCIAL EM ÁGUA.
APLICAÇÃO AO PENTACLOROFENOL**



Mara G. Novy Quadri
Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Santa Catarina
- Florianópolis - SC - Brasil

RESUMO

Ensaio dinâmico de adsorção do pentaclorofenol (PCP), foram elaborados em colunas de areia sob condições de saturação e de saturação parcial em água. Evidências mostram que a adsorção em colunas saturadas seguem o modelo não linear de Freundlich com consumo parcial do soluto. Sob condição de saturação parcial em água, observou-se que as curvas de resposta do pesticida são influenciadas pelo perfil do teor de umidade no solo.

INTRODUÇÃO

O emprego de produtos químicos contra pragas remonta à antiguidade, porém somente em torno de 1920, quando houve um desenvolvimento significativo dos materiais e métodos de análise, percebeu-se que frutas e legumes tratados quimicamente possuíam doses mortais destes xenobióticos. A expansão e intensificação das atividades humanas estão na origem da dispersão de poluentes no meio natural. As fontes de poluição constituem uma ameaça para o meio ambiente, e em particular para os lençóis freáticos, os quais representam uma grande parte da reserva de água do planeta.

No que diz respeito aos pesticidas, a agricultura absorve somente uma pequena parte de sua produção. A maior parte é utilizada por indústrias (tecidos e madeira), ou ainda sobre o território rural, na construção de estradas e vias férreas.

O período entre a segunda Guerra Mundial e os anos 60, marca a época do desenvolvimento de pesticidas orgânicos de síntese, tais como os organoclorados e tiofosforados, a aldrina, o paration, os carbamatos, etc. O conhecimento dos inconvenientes desta forma de luta contra pragas, orientou as pesquisas em uma direção diversa, sendo que hoje muitos destes compostos são de utilização proibida (Munoz, 1992).

O pentaclorofenol (PCP), um organoclorado, foi inicialmente utilizado como preservativo para madeira, sendo seu emprego ampliado a várias outras utilizações com fungicida, bactericida, herbicida, algicida, inseticida, etc. Embora hoje seu emprego seja estritamente limitado, seu uso em grande quantidade no passado justifica o estudo do seu comportamento no solo, pois pode ser uma fonte de contaminação da água de reserva.

TRANSPORTE DE SOLUTOS EM SOLOS

O solo é um meio poroso, constituído fisicamente por uma matriz sólida, ar e água. A água contida no solo é o vetor principal do transporte da maior parte dos compostos solúveis. Quando uma solução se desloca em um meio poroso, ocorrem simultaneamente, diferentes fenômenos. Nos poros onde o escoamento pode ser observado, o transporte se processa por convecção, difusão molecular e dispersão hidrodinâmica, ocorrendo trocas entre esta fração móvel e o filme de líquido em contato com a fase sólida. Em locais onde a água se apresenta estagnada, tais como poros intraagregados, água retida entre bolhas de ar, os solutos são transferidos apenas por difusão molecular através dos filmes em contato com a fase sólida. Uma

vez em contato com a fase sólida, os solutos, se interativos podem ser adsorvidos ou fixados irreversivelmente, podendo ainda sofrer uma degradação tanto na fase sólida como líquida.

Numerosos são os parâmetros que influenciam estes mecanismos de transporte. Dentre eles podemos citar a porosidade, o regime hídrico, o teor de água e as propriedades físico-químicas dos constituintes do solo.

O modelo matemático utilizado para descrever o transporte de solutos em um meio poroso (Novy Quadri, 1993) baseia-se na concepção de duas frações de água (Coats e Smith, 1964), sendo uma extensão do modelo de adsorção linear de Van Genuchten e Wierenga (1976). Ele considera os fenômenos de convecção-dispersão na fração de água móvel, uma cinética de primeira ordem de transferência de massa entre as frações móvel-imóvel, uma adsorção, segundo o modelo de Freundlich, do soluto sobre a fase sólida, e consumo que segue uma cinética de primeira ordem na fase líquida. A representação matemática para o escoamento de água em regime permanente é dada por:

$$\left[\theta_m + \rho_d f K N C_m^{N-1} \right] \frac{\partial C_m}{\partial t} + \left[\theta_{im} + \rho_d (1-f) K N C_{im}^{N-1} \right] \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \mu \theta_m C_m + \mu \theta_{im} C_{im} - \gamma (\theta_m + \theta_{im}) = \theta_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial z^2} - \theta_m v_m \frac{\partial C_m}{\partial z} \quad (2)$$

A cinética que representa a passagem do soluto da fração móvel em direção à fração imóvel é modelizada por:

$$\left[\theta_{im} + \rho_d (1-f) K N C_{im}^{N-1} \right] \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \alpha (C_m - C_{im}) \quad (3)$$

onde as condições inicial e de contorno são:

$$C_m = C_{im} = 0 \quad t = 0, \quad \forall z \quad (4)$$

$$v C_m - D_m \frac{\partial C_m}{\partial z} = \begin{cases} v C_0 & z = 0, \quad 0 \leq t \leq t_1 \\ 0 & z = 0, \quad t \geq t_1 \end{cases} \quad (5)$$

$$D_m \frac{\partial C_m}{\partial z} = D_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial z} = 0 \quad z = L \rightarrow \infty, \quad \forall t \quad (6)$$

onde

C_m , é a concentração da fração de água móvel (kg m^{-3})
 C_{im} é a concentração da fração de água imóvel (kg m^{-3})
 D_m é o coeficiente de dispersão da fração móvel ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
 D_{im} é o coeficiente de dispersão da fração imóvel ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
 f é a fração de sítios de adsorção em contato com a água móvel
 K o coeficiente de adsorção segundo a isoterma de Freundlich
 L o comprimento da coluna (m)
 N o expoente da isoterma de Freundlich
 t o tempo (s)
 v a velocidade média do escoamento (m s^{-1})
 z a coordenada espacial (m)
 α é a constante de velocidade de adsorção reversível segundo uma cinética de primeira ordem (s^{-1})
 γ é uma constante da taxa de velocidade de consumo de ordem zero ($\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
 μ a constante de velocidade de consumo de ordem 1 (s^{-1})
 θ teor de água volumétrico ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)
 ρ_a densidade aparente do meio seco (kg m^{-3}).

Em sistemas onde o soluto não interage com a matrix sólida, os parâmetros físico-químicos (K , μ e γ) são nulos. Este sistema de equações foi resolvido por diferenças finitas, e detalhes do método de resolução são apresentados em Novy Quadri e Quadri (1996).

MATERIAIS E MÉTODOS

O estudo da adsorção de um soluto interativo com uma matriz sólida, sob condições de escoamento em regime estacionário, consiste na partição do problema em duas partes. Na primeira, deve-se conhecer a resposta do meio poroso a um pulso de um traçador do escoamento (KCl), o qual nos fornece informações sobre as características dispersivas do meio, existência de regiões de água estagnada contrastando com as regiões de escoamento preferencial, e ainda possíveis trocas de massa entre estas regiões hídras devido à diferença de concentrações existentes entre estas regiões. A segunda parte do problema consiste em comparar as curvas de eluição do soluto interativo (PCP) com aquelas do traçador. Supõe-se que as características hidrodinâmicas do sistema são independentes da adsorção do soluto. A obtenção do valor destes parâmetros é feita ajustando-se os parâmetros adequados através de um modelo matemático (Novy Quadri e Quadri, 1996), considerando-se para o traçador a ausência de interações físico-químicas.

Dispositivos Experimentais. Um esquema do dispositivo experimental utilizado para o estudo da transferência de solutos é apresentado na figura 1. Ele é composto de uma coluna cromatográfica, de diâmetro e altura variáveis segundo a série de experimentos. Este sistema possui uma bomba peristáltica cuja finalidade é impor vazões constantes e controladas de líquido. As soluções utilizadas foram aquelas de um traçador (KCl a 1 kg/m^3), um xenobiótico (PCP a diferentes concentrações) e um solvente (água destilada ou de percolação). A condição de escoamento permanente é garantida pela associação a uma válvula de 4 vias, que permite a troca entre a vazão de solvente por aquela de solução (KCl ou PCP), com perturbação do escoamento praticamente desprezível. Na saída da coluna, uma célula condutivimétrica é associada a um condutivímetro ligado a um registrador. Este equipamento permite a visualização qualitativa de um pico devido à variação do sinal elétrico provocado pela mudança de concentração no escoamento, podendo-se assim limitar consideravelmente o número de

análises químicas que fornecem os resultados quantitativos. Um desaerador colocado entre a saída da coluna e a célula condutivimétrica limita as variações súbitas de condutividade observadas quando uma bolha de ar atravessa a célula. Um coletor de frações instalado à saída do sistema pode ser programado para coletar amostras, seja em volume por tubo, seja em tempo de escoamento por tubo. Este sistema assim concebido é aplicado à condição de saturação hídrica.

Na condição de saturação parcial em água, aplica-se ao sistema acima descrito uma sucção na parte inferior da coluna e um fluxo constante de água no limite superior (Gaudet, 1978). A determinação do teor volumétrico médio de água é feita através da utilização de um banco de emissão de raios gama, por uma fonte de Americio 241 e um detector, cuja descrição detalhada de seus componentes (detectores, fotomultiplicadores, etc.) podem ser encontradas em Angulo-Jaramillo (1989). A fonte e o detector são montados em uma plataforma rígida que pode se deslocar no sentido vertical, cuja resolução de deslocamento é de 200 passos/mm, podendo ser comandado manual ou mecanicamente. O feixe de fótons gama atravessa a amostra diametralmente, sendo o valor medido, por consequência, o valor médio naquele diâmetro. As medidas são efetuadas ao longo de toda a coluna, e os tempos de contagem foram de 2 minutos para cada cota medida.

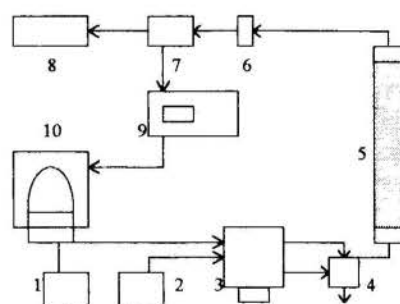


Figura 1 - Esquema geral do dispositivo de transferência de solutos. 1) e 2) Recipientes com solução e água para percolação; 3) bomba peristáltica; 4) válvula de 4 vias; 5) coluna de solo; 6) desaerador; 7) célula de detecção; 8) coletor de frações; 9) condutivímetro; 10) registrador.

Procedimento para Obtenção das Curvas de Eluição. Areia (Sable de Fontainebleau) seca a 105°C por 24 h e resfriada à temperatura ambiente é inserida na coluna de modo que a distribuição dos grãos seja tão uniforme quanto possível. Para isto, a areia é despejada de uma altura de aproximadamente 60 cm, caindo sobre duas telas, distanciadas entre si de 10 cm, sendo que a tela inferior é posicionada a cerca de 5 cm da superfície da areia, durante todo o empacotamento. Em seguida, água é infiltrada por capilaridade, através da base da coluna cheia, com a ajuda de um frasco de Mariotte. Para os ensaios no estado saturado, um escoamento permanente a vazão conhecida é estabelecido após a saturação, fazendo circular água por 1 a 2 volumes de poro. Um pulso da solução de estudo é então injetado na coluna, sendo que o volume necessário à lixiviação do pulso depende das interações existentes entre o meio poroso e o soluto. Para experiências à saturação parcial, a coluna é drenada após a saturação. Em seguida, um escoamento de água no sentido descendente é estabelecido de tal modo que a combinação vazão-sucção aplicada à saída da coluna produza um perfil de teor médio desejado, o qual é medido com a ajuda do banco gama. Uma vez atingido o escoamento permanente, o procedimento é idêntico ao descrito para ensaios à saturação.

As análises das concentrações do traçador (CT) foram obtidas por titulação com nitrato de prata (AgNO_3) 0,01M usando solução de cromato de potássio (K_2CrO_4) 2% como indicador. O PCP ionizado (PCP⁻) foi determinado por espectrometria UV, a comprimentos de onda de 320 nm.

RESULTADOS

Estudo Hidrodinâmico. Curvas de restituição foram obtidas a partir de pulsos lançados com uma solução de KCl à concentração de 1 kg/m^3 e diferentes vazões. A Fig. 2 mostra as curvas de restituição obtidas nas velocidades intersticiais correspondentes às vazões impostas, para o regime de saturação em água. Pode-se observar que as curvas passam pelo ponto (0,5;1) de concentração×tempo adimensional, uma característica de um traçador em meio saturado. Também, à medida que a velocidade média do escoamento aumenta, a curva se torna mais inclinada, o que pode ser compreendido como uma gradual preponderância da convecção em relação à dispersão. As variações de altura e largura do pico foram identificadas como sendo apenas a variação do tamanho do pulso de um ensaio a outro. Estas curvas mostram-se simétricas o suficiente para que possa concluir que um processo cinético de transferência de soluto, se existente, não influi sobre as curvas de eluição. Efetivamente, o ajuste de parâmetros do modelo proposto mostram que o teor de água que participa do escoamento (fração móvel) é da ordem de 96 a 99%, sendo o mesmo independente da velocidade. O coeficiente de troca de soluto entre as frações móvel e imóvel encontrado, foi suficientemente grande para que a cinética possa ser considerada instantânea, nas condições dos experimentos. Para a faixa de velocidades estudada, o coeficiente de dispersão encontrado segue a correlação:

$$D_m = D^* + \lambda v \quad (7)$$

onde D_m é o coeficiente de dispersão aparente (m^2s^{-1}); D^* é o coeficiente de difusão efetivo ($1,8 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$); λ é um coeficiente de proporcionalidade que depende das características do meio poroso ($2,9 \cdot 10^{-4} \text{ m}$); v a velocidade intersticial do escoamento (m s^{-1}). A Eq. (7) segue o modelo básico de correlações fornecidas por De Wiest (1969) para diferentes regimes de escoamento. Os valores encontrados para os diferentes parâmetros são mostrados na Tabela 1.

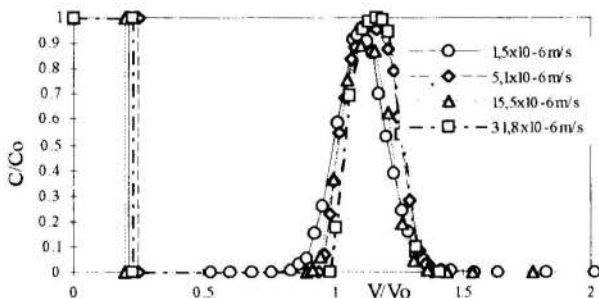


Figura 2 - Curvas de eluição do KCl para diferentes valores da velocidade média de escoamento.

Para o regime de saturação parcial em água, observa-se na Fig. 3 uma saída precoce das curvas de saída em relação ao ponto (0,5;1) de concentração adimensional em função do número de volumes de poro ($C/C_0 \times V/V_0$). Este estado de

saturação parcial provoca também um aumento da dispersividade, observado por curvas montantes menos inclinadas que aquelas do estado saturado. A descrição destas curvas através do modelo anteriormente citado forneceu bons resultados apenas para o coeficiente de dispersão.

Tabela 1 - Ajuste de parâmetros relativos às curvas de eluição do CT, a diferentes velocidades, em estado saturado.

Velocidade (10^6 ms^{-1})	1,5	5,1	15,5	31,8
D_m ($10^9 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$)	1,53	3,44	8,61	10,31
θ_m/θ	0,986	0,986	0,985	0,986
α (s^{-1})	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$8,0 \cdot 10^{-5}$	$3,6 \cdot 10^{-4}$	$5,3 \cdot 10^{-4}$

Foi possível ainda constatar que o processo hídrico ao qual o meio é submetido influi sobre as curvas de resposta do traçador. A Fig. 3 ilustra dois exemplos destas curvas, a um teor de água volumétrico médio de $0,23 \text{ m}^3\text{m}^{-3}$, correspondentes aos perfis de umidade mostrados na Fig. 4. Para melhor visualização, foram traçadas linhas retas que representam diferentes teores em água médios nas diferentes regiões da coluna. Após o ensaio 2D5, a coluna sofreu uma desaturação, e o reajustamento da coluna ao mesmo teor de umidade, produziu uma distribuição hídrica espacialmente diferente, medida por gamametria. Esta influência é passível de ser observada apenas na frente descendente da curva de restituição, a qual tem influência sobre a cinética de troca de massa. As frentes montantes são muito próximas, o que é devido a um mesmo teor em água médio, como observado por Gaudet (1978). A utilização do modelo anteriormente citado para descrição destas curvas mostrou resultados satisfatórios apenas para as frentes montantes, o que pode ser explicado pelo fato de que o mesmo considera um perfil de umidade uniforme na coluna.

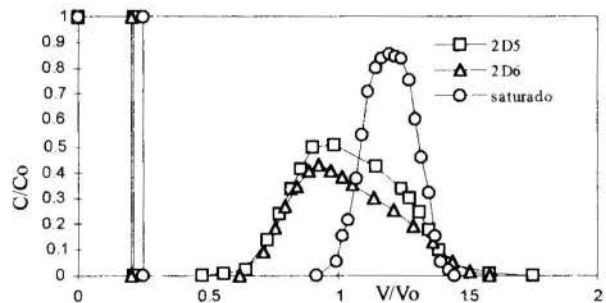


Figura 3 - Curvas de restituição do KCl em regime de saturação parcial, comparado ao estado saturado.

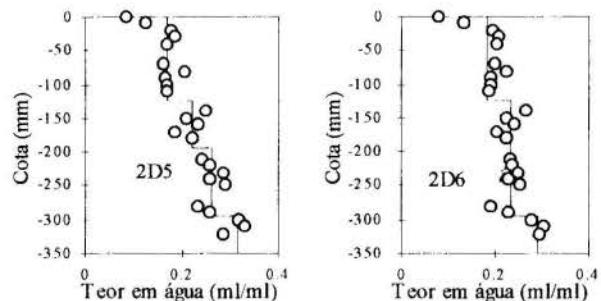


Figura 4 - Perfis do teor de água para as curvas de restituição do KCl, ao teor de umidade médio de $0,23 \text{ m}^3\text{m}^{-3}$.

Estudo das interações físico-químicas.

Estado saturado: A figura 5 apresenta o efeito das interações físico-químicas do PCP (à concentração de 10 ppm) quando suas curvas de restituição são comparadas àquelas do traçador. Pode-se observar que a curva do PCP mostra um atraso do tempo de saída em relação ao ponto (0,5;1), e uma deformação, denotada pela presença de uma cauda. Ademais, parece existir um consumo parcial do soluto, sendo a massa restituída inferior àquela injetada na coluna.

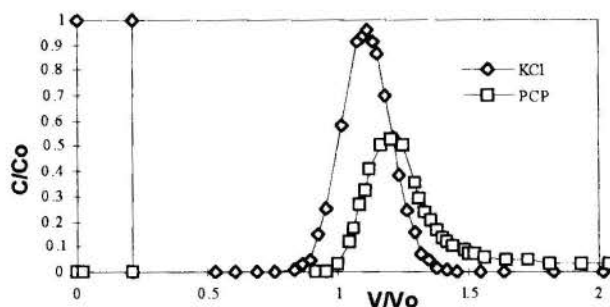


Figura 5 - Curvas de restituição do PCP e do KCl, em regime de saturação em água, à velocidade média de escoamento de $1,6 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$.

No que diz respeito à isoterma de adsorção, um estudo das curvas de eluição dimensionais do PCP às concentrações de $10 \cdot 10^{-6} \text{ kg kg}^{-1}$, $50 \cdot 10^{-6} \text{ kg kg}^{-1}$ e $100 \cdot 10^{-6} \text{ kg kg}^{-1}$ evidenciam que a isoterma não é linear. Segundo Schweich e Sardin (1986) esta não linearidade é denotada pela existência de uma superposição das caudas das curvas de restituição dimensionais, como pode ser visto na figura 6.

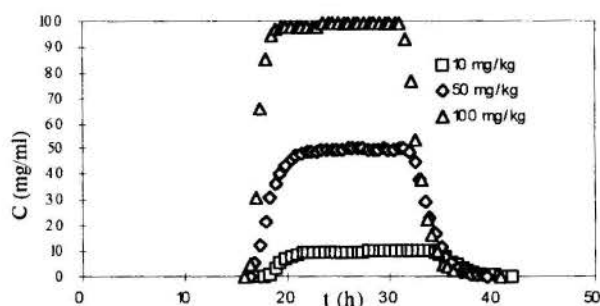


Figura 6 - Curvas de eluição dimensionais do PCP às concentrações de $10 \cdot 10^{-6} \text{ kg kg}^{-1}$, $50 \cdot 10^{-6} \text{ kg kg}^{-1}$ e $100 \cdot 10^{-6} \text{ kg kg}^{-1}$.

Uma fixação irreversível pode ser observada para ensaios de soluções de PCP a 10 ppm, sob velocidades de escoamento de $1,69 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$, $4,90 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$ e $15,5 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$. A taxa de consumo TC mostrou uma relação linear com o tempo de residência médio t_R das moléculas para estes três ensaios, os quais são indicativos de uma cinética, podendo ser descrito por:

$$TC = 9,8344 + 0,1384 \cdot t_R \quad r = 0,9996 \quad (2)$$

onde a inclinação da reta representa a velocidade de desaparecimento do PCP ($\% \text{ h}^{-1}$). Embora esta velocidade esteja ligada ao coeficiente da taxa de desaparecimento, a previsão do mesmo não foi passível de ser obtida devido à variação contínua

da concentração dentro da coluna em função do tempo e do espaço. Este consumo pode estar ligado a uma cristalização do PCP, devido à passagem da sua forma ionizada àquela neutra. Esta possibilidade passou a ser considerada quando, em um espectro sob luz ultravioleta, obteve-se a superposição dos picos do PCP neutro (300 nm) e do PCP ionizado (320nm). Outra possibilidade levantada é a existência de uma fixação do pesticida sobre a matriz sólida, cuja análise química detectou a presença de ferro, em uma concentração de $70 \cdot 10^{-6} \text{ kg de Fe kg}^{-1}$ de areia, e que oferece uma quantidade possível de sítios de adsorção maior do que a quantidade de PCP não recuperado. A primeira hipótese estaria ligada a um consumo do soluto na fase líquida, enquanto a segunda, a um consumo na fase sólida.

A figura 7 apresenta as curvas de eluição do PCP a diferentes velocidades, cuja descrição foi feita com sucesso através do ajuste de parâmetros de adsorção instantânea segundo o modelo de Freundlich e consumo na fase líquida (tabela 2), mantendo-se os parâmetros hidrodinâmicos ajustados para o traçador, às velocidades correspondentes.

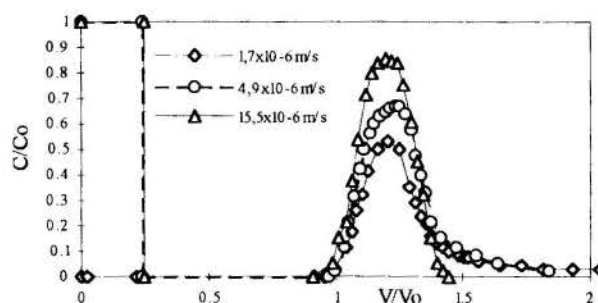


Figura 7 Efeito da velocidade de escoamento sobre as curvas de eluição do PCP.

Tabela 2 - Ajuste de parâmetros relativos às curvas de eluição do PCP, a diferentes velocidades, em estado saturado.

Velocidade (10^6 m s^{-1})	1,7	4,9	15,5
$K (\text{cm}^3 \text{g}^{-1})^N$	0,02	0,028	0,02
N	0,5	0,65	1,00
$\mu (\text{s}^{-1})$	0,002 ⁻⁵	0,002	0,001

Estado de saturação parcial em água: Do mesmo modo que para o traçador, a diminuição do teor em água, produz um ponto de saída avançada para a curva de restituição quando comparado ao estado saturado, sendo que a curva se apresenta mais aberta e

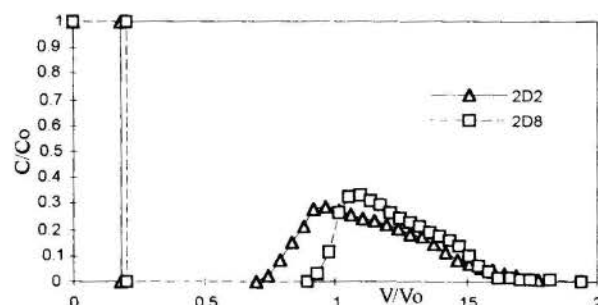


Figura 7 - Curvas de restituição do PCP à saturação parcial, em diferentes etapas do processo hídrico e físico-químico ao qual a coluna foi submetida.

mais baixa à medida que o teor de água diminui. O PCP apresenta um pico mais baixo e deformado por um achatamento, e uma cauda, quando comparado ao KCl na saturação parcial. As curvas também são afetadas pela alteração da distribuição da água presente no meio, sendo que as curvas apresentadas na figura 7 corresponde a diferentes perfis de umidade (2D2 corresponde ao perfil 2D5, e 2D8, ao perfil 2D6).

CONCLUSÕES

A compreensão dos fenômenos de transferência de massa em solos é um problema complexo. Com a finalidade de isolar os problemas hidrico e fisico-químico, foram conduzidos ensaios com um traçador, o qual está associado aos parâmetros hidrodispersivos (D_m , θ_m/θ e α) do modelo apresentado. Os parâmetros fisico-químicos (K , N e μ) foram obtidos por ajuste, mantendo-se constantes aqueles hidrodinâmicos. Tal prática mostrou-se eficiente em meio saturado, porém os resultados à insaturação são satisfatórios apenas parcialmente.

Os resultados experimentais apresentados evidenciam a existência de uma isoterma de adsorção não linear do PCP sobre a areia, e um consumo que pode ser devido a diferentes causas, tais como a passagem do PCP em seu estado neutro a um outro ionizado (PCP⁻), e/ou à fixação sobre a matriz sólida, devido à presença de cátions na mesma. Observou-se ainda, no estado parcialmente saturado, a influência do perfil de umidade sobre as partes descendentes das curvas de restituição de ambos os solutos.

REFERÊNCIAS

Angulo-Jaramillo, R., 1989, "Caractérisation hydrodynamique des sols déformables partiellement saturés. Étude expérimentale à l'aide de la spectrométrie gamma double source. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble.

Coats, K.H. e Smith, B.D., 1964, "Dead-end pore volume and dispersion in porous media". *Petrol. Eng. J.*, Vol. 4, n(1, pp. 73-84.

De Wiest, J.M., 1969, "Flow through porous media". Academic Press, Inc., N.Y.

Gaudet, J.-P., 1978, "Transferts d'eau et de soluté dans les sols non saturés. Mesures et simulation". Thèse Docteur d'État Ès-Sciences Physiques, Université Scientifique et Médicale et Institut National Polytechnique de Grenoble.

Munoz, J.-F., 1992, "Méthodologie d'étude des produits phytosanitaires. Étude d'un bassin versant viticole: L'Ardières (Beaujolais). Mise au point de méthodes analytiques de pesticides. Thèse de Doctorat, CEMAGREF, Université Claude Bernard Lyon I, França.

Novy Quadri, M.G., 1993. "Transferts de solutés dans les sols saturés et non saturés. Application au pentachlorophenol". Tese de Doutorado, Universidade Joseph Fourier-Grenoble I, França.

Novy Quadri, M.G. e Quadri, M.B., 1996. "Apresentação de um modelo simulador do transporte de solutos em colunas de recheio". VI Congresso Latino Americano de Transferência de Calor e Matéria, 1996.

Schweich, D. e Sardin, M., 1986. "Interactions physico-chimiques en présence d'un écoulement, Les mécanismes d'interaction solide-liquide et leur modélisation: application aux études de migration en milieux aqueux. Cap. 4, IEAE-Tecdoc-367.

Van Genuchten, M. Th. e Wierenga, P.J., 1976. "Mass transfer studies in osrbing porous media. 1. Analytical solutions." *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 40, n(4, pp. 473-480.

SUMMARY

Dynamic adsorption experiences of pentachlorophenol were developed in sand columns under saturated and partially saturated conditions. Evidences shown that the adsorption in saturated columns are consistent with non linear Freundlich model, with a partial consumption of the solute. Under partial saturation conditions, it was observed that the response curves of the pesticide were influenced by the humidity profile in soil.



TRANSFERÊNCIA DE MASSA GÁS-SÓLIDO EM ESTRUTURAS POROSAS COMPLEXAS

C. A. M. Abreu, F. R. C. Silva, M. Benachour & A. Knoechelmann

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Pernambuco
50740-521 - Recife - PE - Brasil



RESUMO

Realizou-se análise dinâmica de sistema gás-sólido, aplicando-se o método dos momentos para a quantificação dos processos de transferência de massa do metano em meio de nitrogênio, no interior da estrutura porosa dos sólidos Cu (20 % em peso) suportado sobre γ -alumina e modernita-H. Os coeficiente de transferência de massa nos macroporos (K_T) e difusão nos microporos (D_μ) estão evidenciados com valores de k_T (Cu/Al₂O₃) = $6,96 \cdot 10^{-3}$ m/s, k_T (mod-H) = $5,75 \cdot 10^{-6}$ m/s, D_μ (Cu/Al₂O₃) = $1,97 \cdot 10^{-11}$ m²/s e D_μ (mod-H) = $1,80 \cdot 10^{-12}$ m²/s. Estimativas de tempos de transferências para as duas etapas revelaram um controle do processo global pela etapa de difusão nos microporos.

INTRODUÇÃO

Processos fluido-sólido contínuos em que gases escoam em leitos fixos de sólidos porosos estabelecendo interações, são regidos por cinéticas globais controladas por etapas de transferência de massa intraparticulares. Grãos sólidos com estruturas porosas complexas, onde as dimensões dos poros são comparáveis aos diâmetros das moléculas do gás que se transportam no seu interior, dão origem a processos difusivos ditos configuracionais. Considerando a possibilidade de repartição dos níveis internos dos sólidos sob diferentes escalas de porosidade, torna-se relevante a quantificação dos parâmetros de transporte nestas respectivas escalas.

Materiais utilizados em processos industriais para contato gás-sólido podem ser incluídos na classe de sólidos porosos com estruturas complexas (Rodrigues et al., 1991). Aluminas, zeólitas, carvões ativados, etc., possuem estruturas porosas com distribuição de tamanho de poros, salientando-se micro, meso e macroporos.

A análise do processo contínuo de contato gás-sólido, levando em conta o escoamento e as interações fluido-sólido, deve considerar os efeitos de transferência de massa nos níveis da estrutura porosa interna. Modelos estruturados (Authelin et al., 1988; Ruthven and Shah, 1977) com base nestes níveis podem ser capazes de quantificar os parâmetros representativos dos fenômenos de transporte internos.

Aplica-se, no presente trabalho, técnicas dinâmicas experimentais de estímulo-resposta, num escoamento gasoso em leito poroso, visando a quantificação de parâmetros de transferência de massa intraparticular para estruturas porosas de γ -alumina e zeólita do tipo modernita.

ANÁLISE DINÂMICA E APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS MOMENTOS AOS PROCESSOS DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA FLUIDO-SÓLIDO

A análise do comportamento dinâmico de um sistema constituído de um gás que percola um leito fixo de partículas esféricas porosas, pode relacionar perturbações de concentração de um segundo componente na fase gasosa (Dogu and Smith, 1975; Amost and Schneider, 1994; Scheider and Valus, 1985;

Van Deemter et al, 1956), estabelecidas na entrada do leito, com resposta na saída deste. A modelagem deste procedimento transiente considera as etapas seguintes representativas do processo:

- escoamento da fase gasosa intersticial ao leito fixo;
- transferência de massa fluido-sólido;
- equilíbrio termodinâmico de adsorção gás-sólido na superfície interna da partícula.

Estruturando-se o sólido em dois níveis de porosidade, propõe-se que um componente gasoso transporte-se e interaja nos níveis macro (m) e microporoso (μ). Os fenômenos de transferência de massa nestes níveis podem ser caracterizados como de primeira ordem (Villermaux, 1972), cujos parâmetros tempo de transferência (t_T) e tempo de difusão (t_D) são identificados por:

$$t_T = \alpha L / k_T \quad (1)$$

$$t_D = \gamma L^2 / D \quad (2)$$

com α , k_T e D respectivamente os coeficientes de partição fluido sólido, transferência de massa e difusão; L é uma dimensão característica das partículas ($L = d_p/6$, para esferas) e γ o fator de forma.

No nível das estruturas macroporosas parcela-se o tempo de transferência, tendo-se:

$$t_M = t_{TM} + t_{DM} \quad (3)$$

enquanto nos microporos:

$$t_\mu = t_{T\mu} + t_{D\mu} \quad (4)$$

No processo global, com etapas em série identifica-se o tempo total de transferência (t_m) repartido em duas contribuições:

$$t_m = t_M + (\alpha - \beta / \alpha) t_\mu \quad (5)$$

sendo β a porosidade interna do sólido.

O leito fixo, com fração de vazios, ϵ , constituído de partículas porosas, é percolado pela fase móvel gasosa, a qual transfere-se para o interior do sólido e interage por adsorção com a superfície interna dos poros. Tomando-se o fluido no leito representado por

uma associação de misturadores em série, os balanços de massa fornecem:

- para a fase gasosa, escoando com vazão q , no n -ésimo misturador,

$$q C_{n-1} = q C_n + \frac{V}{J} \frac{d[\varepsilon C_n + (1 - \varepsilon) C'_{ns}]}{dt} \quad (6)$$

com C'_{ns} , C_{n-1} e C_n as concentrações de um componente gasoso, respectivamente nos poros do sólido, na entrada e saída do misturador de volume V/J , onde J é o número total de misturadores;

- na fase gasosa intraparticular,

$$k_T \Omega (C_n - C'_{ns}) = v \frac{dC'_{ns}}{dt} \quad (7)$$

Ω e v são a área externa da partícula e o seu volume; C'_{ns} é a concentração do componente no poro próximo à superfície interna.

Desenvolvendo a equação (6) para o conjunto de J misturadores associados e combinando-a com a equação (7), resulta, no domínio de Laplace, de variável s :

$$G(s) = \left\{ 1 + \frac{T_0}{J} s \left[1 + \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \left(\frac{\alpha}{1 + s t_m} \right) \right] \right\}^{-J} \quad (8)$$

com $G(s) = \frac{C_S(s)}{C_E(s)}$ a função de transferência do sistema, sendo

$C_S(s)$ e $C_E(s)$ as concentrações do componente gasoso na saída e entrada do leito, no domínio de Laplace.

A aplicação da técnica dinâmica fazendo uso de um traçador introduzido no seio da corrente gasosa, alimentada no leito poroso, fornece os momentos (μ_k) das curvas de retenção que podem ser confrontadas às expressões destes momentos, obtidos a partir da função de transferência, através da relação:

$$\mu_k = (-1)^k \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^k G}{ds^k} \quad (9)$$

Conhecendo-se $E(t)$, a distribuição de tempos de retenção (DTR) do gás no leito, tem-se que:

$$\mu_k = \int_0^\infty t^k E(t) dt \quad (10)$$

O tempo de retenção do gás (t_R) e a variancia (σ^2) da distribuição de tempos de retenção são quantificados por:

$$t_R = \int_0^\infty t E(t) dt \quad (11)$$

$$\sigma^2 = \int_0^\infty (t - t_R)^2 E(t) dt \quad (12)$$

Obtendo-se as DTRs tomadas na entrada e saída do leito poroso expressa-se a partir da distribuição de tempos de residência do leito:

$$t_R = \mu_{1S} - \mu_{1E} \quad (13)$$

$$\sigma^2 = \sigma_S^2 - \sigma_E^2 \quad (14)$$

sabendo-se que:

$$\sigma^2 = \mu_2 - \mu_1^2 \quad (15)$$

onde σ_E^2 e σ_S^2 são as variancias das DTR na entrada e saída do leito, respectivamente.

Confrontando-se os momentos de $G(s)$ com aqueles obtidos a partir de $E(t)$, chega-se às relações:

$$\frac{t_R}{t_0} = 1 + \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \alpha \quad (16)$$

$$\frac{G^2}{t_R^2} = \frac{1}{J} + \left[\frac{1}{(\varepsilon/1-\varepsilon) + \alpha} \right] \frac{t_m}{t_R} \quad (17)$$

METODOLOGIA EXPERIMENTAL

Experimentos conduzindo à distribuição de tempos de retenção do metano em leitos de partículas esféricas de γ -alumina (GCO-70, Rhone Poulenc) e cilindros alongados de modernita-H (Zeolon), foram realizados introduzindo-se uma perturbação do tipo degrau negativo na alimentação de gás N_2 no leito. Massas de 1,49-1,51 g dos recheios de γ -alumina ($d_p=1,00$ mm) e modernita-H ($d_p=1,65$ mm, $l=6-8$ mm) preencheram colunas cilíndricas de dimensões 40 mm x 6 mm. Respostas à perturbação devido a eliminação do metano na alimentação foram detectadas na entrada e saída do leito. A mistura gasosa foi aspirada através de um detector a condutividade térmica, com 1-2% da vazão total da fase gasosa. Os sinais foram transmitidos a um microcomputador através de uma interface AD/DA. Experiências foram feitas a três temperaturas para dois materiais. a 45°C, 65°C e 100°C para a γ -alumina e 60°C, 110°C e 150°C para a modernita-H. Teores de 3-4% em volume do metano foram alimentados diluídos em nitrogênio, cujas vazões eram de 0,70 cm^3/s e 1,60 cm^3/s .

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As experiências com leito fixos de Cu (20% em peso)/ γ -alumina e modernita-H, em presença das misturas gasosas $N_2 - CH_4$, nas condições especificadas entre 45°C e 150°C a 1atm, representaram o comportamento dinâmico do traçador CH_4 , introduzido no escoamento de N_2 sobre o leito poroso, mostrando os valores de concentração nas etapas de alimentação no leito, regime permanente e supressão com degrau negativo.

Das curvas discretizadas e normalizadas foi possível calcular os momentos das DTRs na entrada e saída dos leitos. As equações (13) e (14) permitiram a estimação dos tempos de retenção da DTR do leito e variancias, para tempos espaciais entre 0,46 s e 0,97 s para Cu (20%)/ γ -alumina e 0,35 s e 2,5 s para a modernita-H.

Confrontando os dados experimentais aos momentos da função de transferência dos sistemas, recorre-se às equações (16) e (17), as quais, de forma linearizada (figuras 1, 2, 3 e 4) conduzem à estimação de parâmetros J , α , e t_m . Os valores obtidos são considerados valores de inicialização da otimização no domínio real, processada através da inversão de $G(s)$.

Ordens de grandeza próximas para as difusividades no interior das estruturas microporosas do sistema suportado e da modernita-H são indicativos de ocorrência dos processos difusivos em poros de dimensões características dos aglomerados formados, ao nível dos cristalitos da fase metálica. Nos aluminosilicatos (modernita-H) existem macro e microporos geometricamente dispostos, estes últimos interconectados ortogonalmente aos poros maiores. A transferência de massa nos macroporos é quantificada na ordem de 10^3 , mais elevada no sistema suportado em relação aos valores encontrados para a modernita-H. Nos dois casos confirma-se que a etapa controladora é a difusão nos microporos, representada em média de ordem de grandeza de 10^{-4} s para os respectivos tempos de transferência, e nitidamente inferiores aos valores 10^{-1} s para o tempo global de transferência de massa.

CONCLUSÃO

Modelagens dinâmicas dos processos de transferência de massa e interação fluido-sólido entre o metano e o sistema poroso Cu (20% em peso) suportado em γ -alumina modernita-H, associada à técnica de distribuição de tempo de retenção permitem a quantificação dos efeitos de transferência de massa intraparticular. Valores dos coeficientes de transferência de massa e coeficiente de difusão, foram obtidos, identificados nas estruturas macro e microporosas. Abrangendo temperaturas de 45°C a 150°C estimou-se coeficiente de transferência de massa na ordem de 10^{-3} m/s a 10^{-6} m/s nos macroporos e coeficiente de difusão de 10^{-11} m²/s a 10^{-12} m²/s nos microporos dos sólidos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Arnost, D. and Schneider, P., 1994, "Effective Diffusivities from Dynamic Diffusion Cell: the General Moment Analysis", *Chemical Engineering Science*, Vol. 49, 3, pp. 393.
- Authelin, J. R., Schweich, D. and Villermaux, J., 1988, "A New Appraisal of Mass Transfer Processes in Zeolithes of Transient Methods", *Chemical Engineering Technol.*, Vol. 11, pp. 432.
- Box, P., 1965, A New Method of Constrained Optimization and a Comparison with Other Methods", *Computer Journal*, Vol. 8, pp. 42.
- Dogu, G. and Smith, J.M., 1975, "A Dynamic Method for Catalyst Diffusivities", *A. I. Ch. E. Journal*, Vol. 21, 1, pp. 58.
- Kucera, K., 1965, "Contribution to the Theory of Chromatography: Linear non Equilibrium Elution Chromatography", *Journal of Chromatography*, Vol. 19, pp. 237.
- Rodrigues, A. E., Zuping, L. and Loureiro, J. M., 1991, "Residence Time Distribution of Inert and Linearly Adsorbed Species in a Fixed Bed Containing Large-Pore Supports: Application in Separation Engineering", *Chemical Engineering Science*, Vol. 46, 11, pp. 2765.
- Ruthven, D. M. and Shah, D.B., 1977, "Measurements of Zeolitic Diffusivities and Equilibrium Isoterms by Chromatography", *A.I.Ch.E. Journal*, Vol. 23, pp. 4.
- Schneider, P. and Valus, J., 1985, "Transport Parameters of Porous Catalyst via Chromatography with a Single Pellet-String Column", *Chemical Engineering Science*, Vol. 40, 8, pp. 1457.
- Van Deemter, J. J., Zuiderweg, F. J. and Klinkenberg, A., 1956, "A Longitudinal Diffusion and Resistance to Mass Transfer as Causes of non-Ideality in Chromatography", *Chemical Engineering Science*, Vol. 5, pp. 271.
- Villermaux, J., 1972, "Analyse des Processus Chromatographiques Lineaires à l'Aide des Modeles

Phenomenologiques", *Chemical Engineering Science*, Vol. 30, pp. 955.

SUMMARY

Gas-solid systems were analysed dynamically using the moments method to quantify the methane mass transfer processes in nitrogen, in porous catalysts of Cu/ γ -Al₂O₃ and modernita-H. Mass transfer coefficients in macropores and diffusion in micropores were calculated, being $k_{T(Cu/Al_2O_3)} = 6,96 \cdot 10^{-3}$ m/s, $k_{T(mod-H)} = 5,75 \cdot 10^{-3}$ m/s and $D_{\mu(Cu/Al_2O_3)} = 1,97 \cdot 10^{-11}$ m²/s and $D_{\mu(mod-H)} = 1,80 \cdot 10^{-12}$ m²/s. The analysis of the transfer time for both steps showed that the global process was controlled by the diffusion in micropores.



**ANISOTHERMAL ANALYSIS OF SHAPE MEMORY ALLOY BARS
SUBMITTED TO THERMOMECHANICAL LOADINGS**



Pedro Manuel C.L. Pacheco

Departamento de Engenharia Mecânica - CEFET/RJ
20.271.110 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil

Marcelo Amorim Savi

Departamento de Engenharia Mecânica - Universidade de Brasília
70.910.900 - Brasília - DF - Brasil

SUMMARY

Shape memory alloys present a strong temperature dependence on the mechanical behavior. Since it is experimentally verified that thermal boundary conditions may cause different responses, the coupling between thermal and mechanical problems must be considered. In this paper, an internal variables constitutive theory, developed within the framework of the Thermodynamic of Irreversible Processes, is proposed to study the thermomechanical coupling in shape memory alloys. The behavior of a bar submitted to thermomechanical loadings is simulated numerically and the results are presented and analyzed.

INTRODUCTION

Shape memory alloys (SMAs) undergo thermoelastic phase transformations which may be induced either by temperature or stress. Shape memory and pseudoelasticity are effects associated with phase transformations experienced by these alloys.

Shape memory effect is a phenomenon where plastically deformed objects made of SMA may recover their original form after going through a proper heat treatment. Forces may be generated by introducing a constraint to the restoring movement. Because of such remarkable properties, SMAs have found a number of applications in engineering. It could mention self-actuating fastener, self-erectable structures for aerospace hardware, thermally actuators switches, a number of bioengineering devices, and actuators for vibration control of flexible structures. (Schetky, 1979; Borden, 1991; Busch *et al.*, 1992, Rogers *et al.*, 1991).

Microstructural aspects of SMAs shown that these alloys may present two possible phases: Austenite and Martensite. In martensitic phase, plates which may be internally twin-related exist. Hence, different deformation orientations of crystallographic plates constitute what is known by martensitic variants (Zhang *et al.*, 1991).

Figure 1 shows the shape memory effect. A body on austenitic phase ① is cooled and the twinned martensite becomes stable ②. Then a stress field is applied and the body experiments a deformation causing the appearance of other martensitic variants ③. At this instant, by increasing body temperature, phase transformation from martensite to austenite takes place (③→④) which causes the elimination of residual strains.

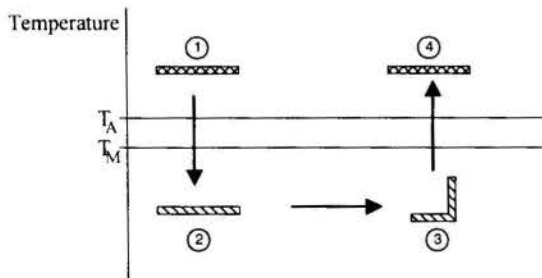


Figure 1 - Shape Memory effect.

Shape memory and pseudoelastic effects may be modeled either by microscopic or macroscopic point of view. The phenomenological aspects of SMA behavior is considered by constitutive models which is formulated to describe these phenomena.

Pacheco *et al.* (1995) present a heat transfer analysis on SMA bars. A constitutive model for anisothermal processes is developed to study the thermomechanical coupling. The behavior of a bar submitted to thermomechanical loadings is simulated numerically and the results are presented and analyzed. Conclusions had shown that a non-homogeneous temperature distribution may cause a non-homogeneous phase transformation which can produce spurious strains or reduce the force needed to do a specific task.

This work revisits the anisothermal analysis of SMA bars considering other thermomechanical loadings.

CONSTITUTIVE MODEL

Fremond (1987) has proposed a three-dimensional constitutive model considering an austenitic phase and two variants of martensite. Internal constraints are imposed for the coexistence of these phases. Savi & Braga (1993a, 1994) discuss some limitations of this three-dimensional description.

An one-dimensional version of Fremond's model is considered here. The thermodynamic state is completely defined by a finite number of state variables: uniaxial deformation (ϵ), temperature (T), the volumetric fractions of martensitic variants (β_1 and β_2) and austenite (β_3). SMA behavior can be characterized by two thermodynamic potentials: the Helmholtz free energy (ψ) and the potential of dissipation (ϕ). Helmholtz free energy can be written as (Savi, 1994):

$$\rho \psi(\epsilon, T, \beta_i) = \rho \sum_{i=1}^3 \beta_i \tilde{\psi}_i(\epsilon, T) + \hat{J}(\beta_i), \quad (1)$$

where ρ is the density and $\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2$ and $\tilde{\psi}_3$ are the free energy associated with two martensitic variants and one austenitic phase (Pacheco *et al.*, 1995). The volumetric fractions of each phase, β_i , must satisfy the following constraints, which establish the coexistence of the phases:

$$\begin{aligned} \beta_i &\geq 0 \quad (i=1,2,3) ; \\ \beta_1 + \beta_2 + \beta_3 &= 1. \end{aligned} \quad (2)$$

\mathbf{J} is the indicator function of the convex C associated with the constraints (2) (Rockafellar, 1970). By using the constraints (2), β_3 can be eliminated and the free energy can be written in terms of two volumetric fractions β_1 and β_2 :

$$\rho\psi(\varepsilon, T, \beta_1, \beta_2) = \rho\tilde{\psi}(\varepsilon, T, \beta_1, \beta_2) + \mathbf{J}(\beta_1, \beta_2), \quad (3)$$

where

$$\begin{aligned} \rho\tilde{\psi}(\varepsilon, T, \beta_1, \beta_2) &= \beta_1 \left[-\alpha\varepsilon + \frac{c_L}{T_M}(T - T_M) \right] + \\ &+ \beta_2 \left[\alpha\varepsilon + \frac{c_L}{T_M}(T - T_M) \right] + \frac{1}{2}E\varepsilon^2 - \frac{c_L}{T_M}(T - T_M). \end{aligned} \quad (4)$$

α and c_L are characteristic material parameters that describe the martensitic transformation, E represents the elastic modulus and T_M is a lower temperature limit for a stable existence of the austenitic phase. \mathbf{J} represents the indicator function of the triangle \mathcal{J} ,

$$\mathcal{J} = \{ (\beta_1, \beta_2) \mid 0 \leq \beta_i \leq 1 \quad (i=1,2) ; \beta_1 + \beta_2 \leq 1 \}. \quad (5)$$

State equations can be obtained from the Helmholtz free energy as follows (Pacheco, 1994; Savi, 1994):

$$\begin{aligned} \sigma &= \rho \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} = E\varepsilon + \alpha(\beta_2 - \beta_1) \\ B_1 &= -\rho \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \beta_1} - (-\lambda_1 + \lambda_3) = \alpha\varepsilon - \frac{c_L}{T_M}(T - T_M) + \lambda_1 - \lambda_3 \\ B_2 &= -\rho \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \beta_2} - (-\lambda_2 + \lambda_3) = -\alpha\varepsilon - \frac{c_L}{T_M}(T - T_M) + \lambda_2 - \lambda_3 \end{aligned} \quad (6)$$

with $(-\lambda_1 + \lambda_3) \in \partial_1 \mathbf{J}$; $(-\lambda_2 + \lambda_3) \in \partial_2 \mathbf{J}$.

σ represents the uniaxial stress, B_i are thermodynamic forces, ∂_i are sub-differentials with respect to β_i (Rockafellar, 1970) and λ_i are the Lagrange multipliers related to the restriction (5). Lagrange multipliers offers a good alternative to represent sub-differentials of the indicator function (Savi & Braga, 1993b).

Considering a quadratic pseudo-potential of dissipation, ϕ , it is possible to write the following complementary equations (Savi & Braga, 1993b):

$$B_i = \frac{\partial \phi}{\partial \beta_i} = \eta \dot{\beta}_i \quad (i = 1,2), \quad (7)$$

where η is a parameter associated with material internal dissipation.

The set of equations (6) and (7) form a complete set of constitutive equations. Using Fourier law to represent the heat conduction process in SMA, the one-dimensional energy equation may be written as (Pacheco, 1994):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{hP}{A} (T - T_\infty) - \rho c \dot{T} &= -B_1 \dot{\beta}_1 - B_2 \dot{\beta}_2 + \\ &+ T \left(-\frac{\partial \sigma}{\partial T} \dot{\varepsilon} + \frac{\partial B_1}{\partial T} \dot{\beta}_1 + \frac{\partial B_2}{\partial T} \dot{\beta}_2 \right), \end{aligned} \quad (8)$$

where Λ and c are material parameters, h is the convection coefficient, P the perimeter, A the cross-section area and T_∞ the medium temperature where the bar is immersed.

Equation (8) presents the balance of energy. Terms on the right side represent the coupling between thermal and mechanical processes. The first two terms are associated with mechanical dissipation and are referred as internal coupling. The last term is referred as thermal coupling and represents the coupling due to temperature dependence of material parameters.

NUMERICAL SOLUTION

Numerical solution considers the operator split technique (Marchuck, 1975). The original coupled problem is decomposed in two uncoupled problems: an evolution, represented by a set of ordinary differential equations (6-7) and a heat conduction problem, represented by a parabolic partial differential equation (8). After split, the two problems can be treated separately by traditional methods considering that the temperature is a known parameter on the evolution problem.

The solution of evolution problem considers a new split. An elastic predictor step, where no transformations take place and the temperature is assumed to be known, is used as a trial state. Projection algorithm proposed by Savi & Braga (1993b) is used to evaluate the feasibility of the trial state. Heat conduction problem is considered to evaluate the actual temperature. Crank-Nicolson algorithm is used to discretize the thermal problem (Pacheco, 1994). An iterative procedure is used to obtain the actual solution. This procedure converges when trial and actual state are the same.

BAR OF SMA

To study heat conduction effects on SMAs, a bar with diameter $d=5\text{mm}$ and length $L=25\text{mm}$ submitted to a thermomechanical loading is considered. A spatial discretization of 11 points is used in the simulations. Material parameters are supposed to be temperature-insensitive and are presented in Table 1 (Sato *et al.*, 1985; Savi, 1994).

For loading rates and ranges of temperature observed in this paper internal and thermal coupling terms are of minor importance and can be neglected. Therefore the energy equation can be reduced to the heat equation currently used in the study of rigid bodies without any loss.

A non-homogenous strain distribution can be obtained if an incomplete transformation occurs at some regions of the bar. In the foregoing analysis the effects of heat transfer are considered.

Table 1 - Material Parameters

E (GPa)	70
α (MPa)	7
c_L (MPa)	0.3813
T_M (K)	246
η (kPa)	20
Λ (W/m K)	10
c (J/kg K)	460.2
ρ (kg/m ³)	6.5×10^3

A bar fixed at the left-end ($x = 0$) and submitted to a stress loading at the right-end ($x=L$) and a temperature loading at the left-end ($x=0$) is considered. The bar is initially with a temperature $T=240K$ then it is immersed in a medium with the same temperature. A constant convection coefficient $h=10W/m^2K$ is assumed. Thermomechanical loading is presented in Figure 2. After the whole bar reaches a constant stress of 15MPa (point B), a thermal loading is applied on the left-end of the bar ($x=0$). A cyclic heat process is imposed varying the temperature from 240K to 280K as a trapezoidal wave with a period of 100s and a loading rate of 1.33 K/s (point B to E).

Figure 3 shows the stress-strain relation for the left-end of the bar ($x=0$). The mechanical loading causes a martensitic transformation and a deformation nearly 0.3% is observed (point B). Thermal loading causes a partial relief of deformation. By heating the bar to a temperature superior to T_M all the martensitic phase, which is generated by the mechanical loading process, will be transformed to austenite causing the strain decreases (B→C). Then, by decreasing the body temperature, the mechanical loading causes, again, the increase of strain (C→D).

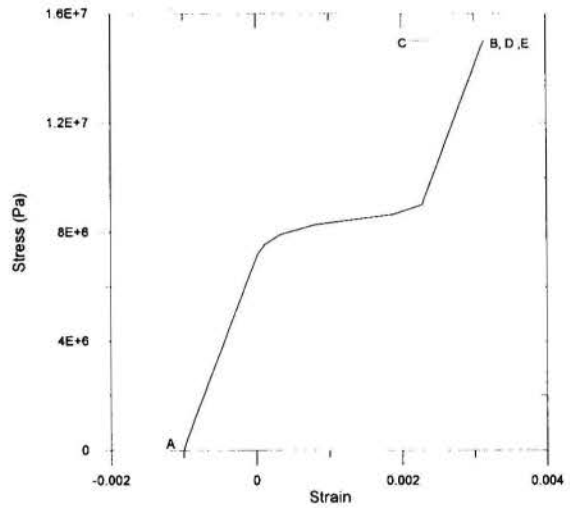
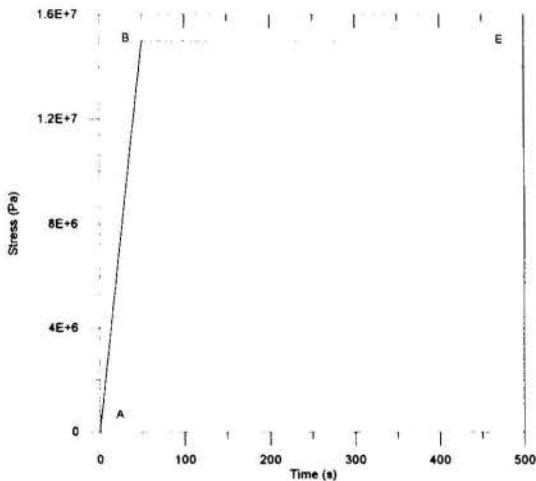
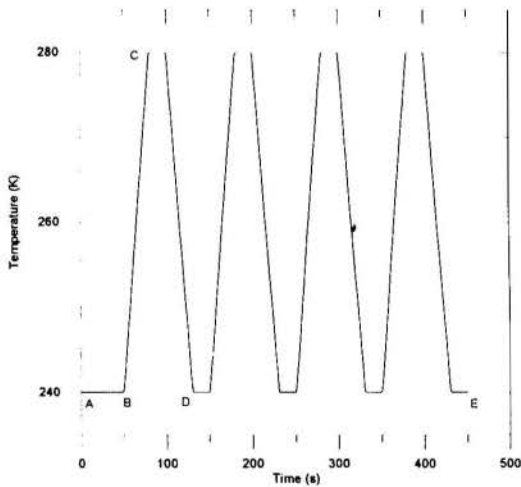


Figure 3 - Stress-strain curve for the left-end of the bar ($x=0$).

Temperature time history for some regions of the bar is shown in Figure 4. Figure 5 presents the temperature distribution across the bar for some time instants.



(a)



(b)

Figure 2 - (a) Mechanical loading; (b) Thermal loading.

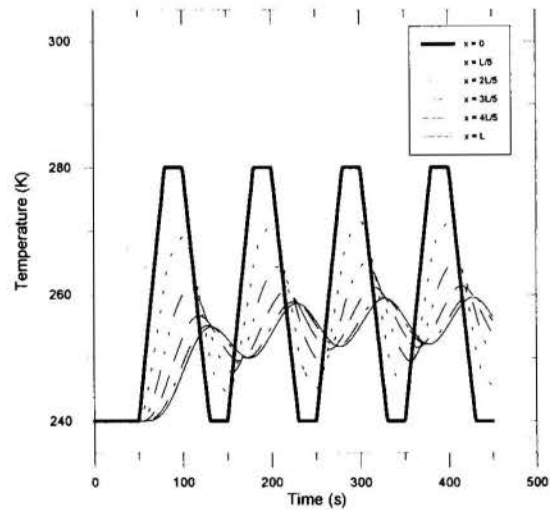


Figure 4 - Temperature time history.

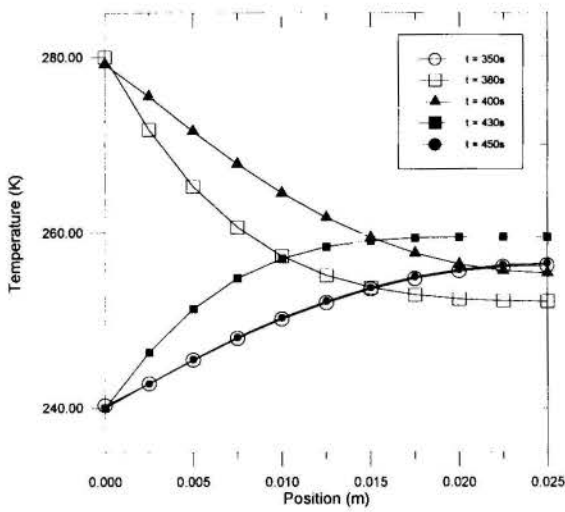


Figure 5 - Temperature distribution for different time instants.

Figures 6 and 7 show strain and material phase evolution, respectively, for three different positions of the bar. At the left-end ($x=0$), the martensitic transformation follows the thermal loading varying as the same way as temperature, while at other positions, a time lag is observed. At the right-end, the temperature evolution does not promote the phase transformation and strains do not change.

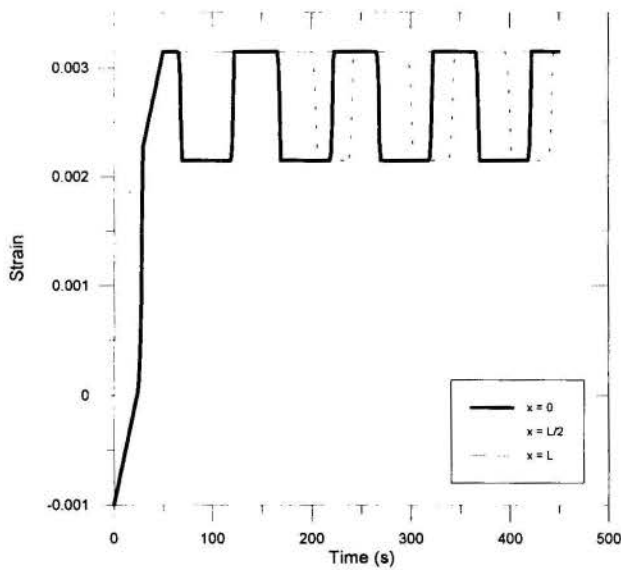


Figure 6 - Strain time history.

The strain distribution across the bar, for several time instants, is shown in Figure 8. As shown in Figures 6 and 7, the mechanical process presents a time lag promoted by the thermal process and a non-homogeneous strain distribution is observed.

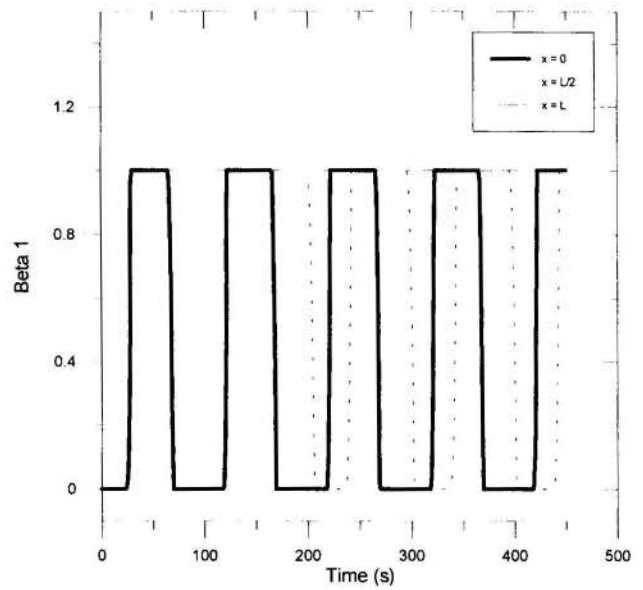
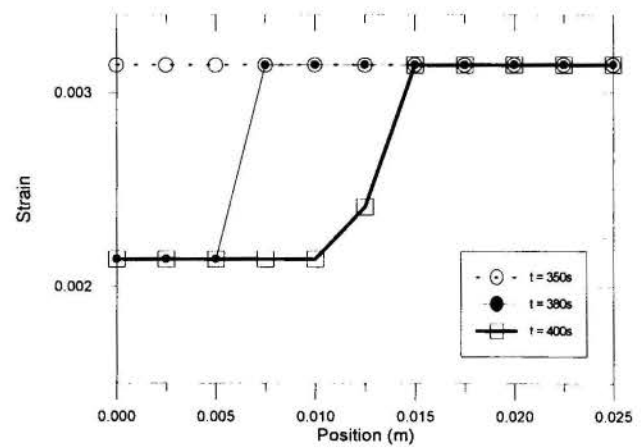
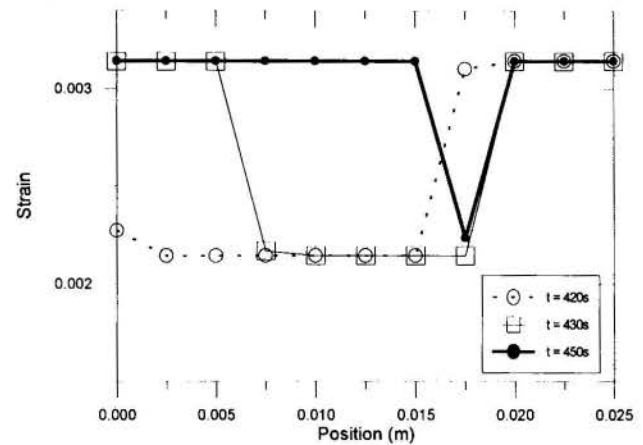


Figure 7 - β_1 time history.



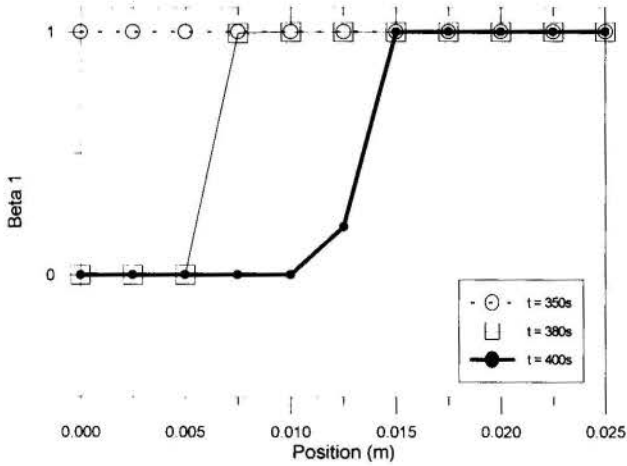
(a)



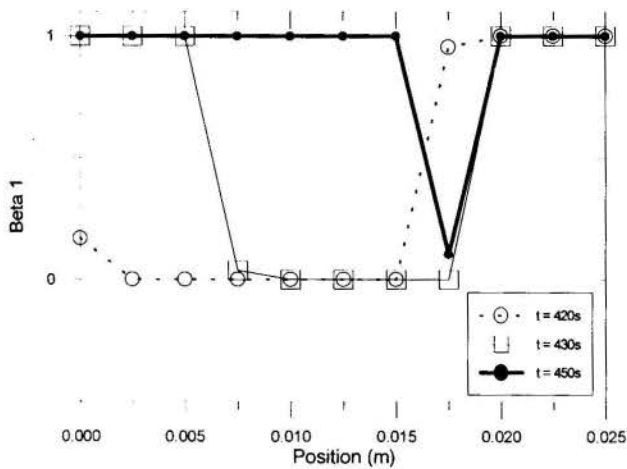
(b)

Figure 8 - Strain distribution. (a) 350s, 380s and 400s; (b) 420s, 430s and 450s.

Material phase distribution presents the same behavior of the strain distribution and is shown, for several time instants, in Figure 9.



(a)



(b)

Figure 9 - β_1 distribution. (a) 350s, 380s and 400s; (b) 420s, 430s and 450s.

It must be noted that, during the thermal loading, strain and phase transformation advances across the bar as a wave. Some parts never experience strain or phase changes. These results show that heat transfer on SMAs is important to define phase transformation and the corresponding strain distribution. These informations are fundamental to simulate the SMA behavior.

The dissipative nature of shape memory effect can be observed on the strain-temperature hysteresis loop which is presented in Figure 10.

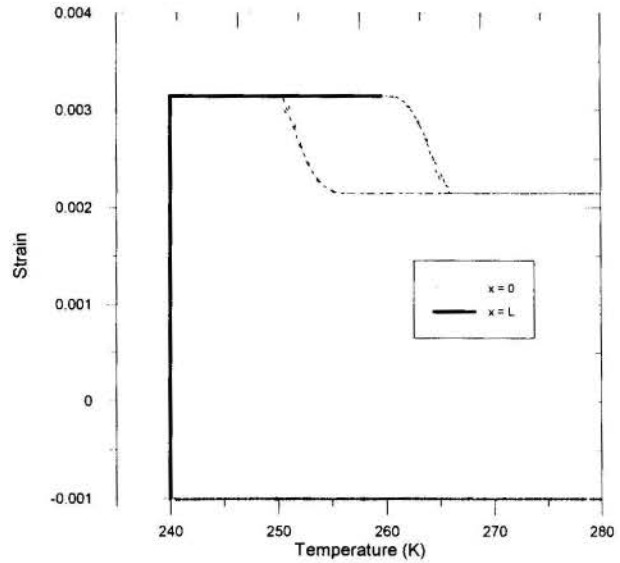


Figure 10 - Strain-temperature hysteresis loop.

CONCLUSIONS

Heat transfer analysis on SMAs is considered. An one-dimensional constitutive model with internal variables is extended for anisothermal processes to study the thermomechanical coupling. The coupling terms of energy equations can be neglected for loading rates and temperature range studied. Temperature dependence indicates, however, that energy equations must be considered on SMAs analysis. The behavior of a bar submitted to thermomechanical loadings is simulated numerically. Results show that thermal conduction is an important feature to describe the mechanical behavior of SMAs.

ACKNOWLEDGMENT

The authors would like to acknowledge the computational support of the National Laboratory of Scientific Computation (LNCC/CNPq).

REFERENCES

- Borden, T., 1991, "Shape Memory Alloys: Forming a Tight Fit", *Mechanical Engineering*, pp.66-72.
- Busch, J.D., Purdy, W.E. & Johnson, A.D., 1992, "Development of a Non-Explosive Release Device for Aerospace Applications", *26th Aerospace Mechanisms Symp.*
- Fremond, M., 1987, "Matériaux à Mémoire de Forme", *C.R. Acad. Sc. Paris*, Tome 34, s.II, No. 7, pp.239-244.
- Marchuck, G.I., 1975, "Methods of Numerical Analysis", Springer-Verlag.
- Pacheco, P.M.C.L., Savi, M.A. & Costa Mattos, H., 1995, "Heat Transfer Analysis on Shape Memory Alloys", *COBEM-CIDIM/95 - 13th Brazilian Congress of Mechanical Engineering*.
- Pacheco, P.M.C.L., 1994, "Analysis of the Thermomechanical Coupling in Elasto-Viscoplastic Materials", Doctoral Thesis, Dept. of Mechanical Eng., PUC-Rio (in Portuguese).

Rockafellar, R.T., 1970, "*Convex Analysis*", Princeton Press, New Jersey.

Rogers, C.A., Liang, C. & Fuller, C.R., 1991, "Modeling of Shape Memory Alloy Hybrid Composites for Structural Acoustic Control", *J. Acoustical Soc. Am.*, v.89, pp.210-220.

Sato, Y., Tanaka, K. & Kobayashi, S., 1985, "Pseudoelasticity and Shape Memory Effect Associated with Stress-Induced Martensitic Transformation: A Thermomechanical Approach", *Trans. Japan Soc. Aero. Space Sci.*, v.28, n.81, pp.150-160.

Savi, M.A. & Braga, A.M.B., 1993a, "Chaotic Vibrations of an Oscillator with Shape Memory", *J. Brazilian Society for Mechanical Sciences - RBCM*, v.XV, n.1, pp.1-20.

Savi, M.A. & Braga, A.M.B., 1993b, "Chaotic Response of a Shape Memory Oscillator with Internal Constraints", *COBEM 93 - 12th Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, Brasilia, Brasil, v.I, pp.33-36.

Savi, M.A., 1994, "*Non-linear Dynamics and Chaos of Mechanical Systems with Shape Memory*", Doctoral Thesis, Dept. of Mechanical Eng., PUC-Rio (in Portuguese).

Savi, M.A. & Braga, A.M.B., 1994, "Constitutive Models for Pseudoelasticity and Shape Memory", *Proceedings of II Brazilian Symposium on Aerospace Technology*.

Schetky, L.M., 1979, "Shape Memory Alloys", *Sci. Am.*, v.241(5), pp.68-76.

Zhang, X.D., Rogers, C.A. & Liang, C., 1991, "Modeling of Two-Way Shape Memory Effect", *ASME - Smart Structures and Materials*, AD.v.24, pp.79-90.

ABCN

EXPERIMENTAL SETUP FOR MEASUREMENT OF OVERALL THERMAL RESISTANCE OF BOLTED JOINTS

Marcia B. H. Mantelli
 Dep. of Mech. Eng. - Fed. Univ. of Santa Catarina
 88040-900- Florianópolis - SC - BRAZIL

Michael M. Yovanovich
 Dep. of Mech. Eng. - University of Waterloo
 N2L-3E5 - Waterloo - Ont. - Canada

SUMMARY

The knowledge of the overall thermal conductance of bolted joints is critical for the thermal design of satellites. A model to predict the overall thermal resistance of bolted joints is available and experimental data were necessary to validate this model. In this paper, an experimental setup for the measurement of overall thermal resistance of bolted joints is described. It basically consists of a heater and a cooler which forces the heat to flow through a bolted joint mounting. The heat delivered and collected from the mounting, is exchanged by radiation, differently from the apparatus found in the literature, which uses conduction. The present setup is designed to operate at cryogenic temperatures. The comparison between the experimental and theoretical results is very good.

INTRODUCTION

With the continued improvements in the performance level of electronic devices, which lead to higher component and package densities, thermal engineers are constantly faced with problems of heat dissipation. Conduction is the most important heat transfer means for many applications, specially satellites, which operates in a vacuum. In space, the electronic equipment is usually installed in plates, which are connected to the satellite structural panels by bolted joints. The heat generated by electronic devices has to flow through these junctions, and, therefore, the knowledge of the overall thermal conductance of these bolted joints is critical for the thermal design of satellites.

Mantelli and Yovanovich (1995) developed a model for the prediction of the overall thermal resistance of bolted joints, which includes the constriction, material and contact resistances connected in series and parallel, according to the heat flux paths. This model needed validation and experimental data were generated to compare with the theoretical results. In this paper, the experimental setup developed for the measurement of overall thermal resistance of bolted joints is described.

LITERATURE REVIEW

The main motivation of this research is to study the bolted joints designed for the SCD1 (First Data Collection Brazilian Satellite). The characteristic that makes this joint different from the ones analyzed in the literature is the presence of washers between plates. Mantelli (1996) showed that, for many applications, the constriction resistance of the heat flux may be the largest thermal resistance among all observed in a bolted joint, including the resistance between contacting surfaces. As the

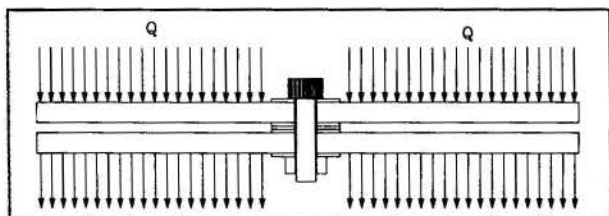


Figure 1. Bolted joint configuration and boundary conditions.

boundary conditions determines the constriction resistance in plates, the experimental apparatus must be designed to reproduce them, as much as possible. Fig. 1 shows the bolted joint configuration studied and a schematic of the boundary conditions (heat delivered and absorbed by the cooler).

Aron and Colombo (1963) were among the first researchers to conduct an experimental study in thermal resistance of bolted joints in vacuum environment. The bolted joint tested was obtained based on a configuration adopted for a particular spacecraft. This configuration is different from the SCD1 mountings. Eliot (1965) developed experimental work very similar to the Aron and Colombo's (1963). Even if the data from these two papers are still being extensively used, their data could not be compared to the theoretical results of Mantelli (1996).

The boundary conditions considered in Mittlebach et al. (1992) experimental work, were similar to the ones adopted in Mantelli's (1996) model. They measured the contact resistance between plates connected by a bolt, not the overall thermal resistance of bolted joints. They did not consider washers between plates and they made their measurements in temperature levels different from the ones achieved in the present work.

Song et al. (1993) obtained the overall thermal resistance of bolted joints subjected to heat fluxes similar to the ones considered by Aron and Colombo (1963). Their experimental points are not suitable for comparison with the Mantelli's (1996) theoretical model.

DESIGN OF THE EXPERIMENTAL SETUP

The experimental setup basically consisted of the heater, the bolted joint mounting and the cold plate. Heat, under steady-state conditions, was radiated from the heater to the mounting upper plate, then conducted through the bolted joint and finally radiated to the cold plate. The setup was developed to fit inside a cylindrical vacuum chamber and it was designed to operate at cryogenic temperatures. Figure 2 presents a schematic view of the experimental setup, which parts are described in the following sections.

Bolted Joint Mounting. Figure 3 presents the mounting used in the tests. It consisted of two Aluminum 6061 T6 circular plates with a diameter of 17.78 cm. The thickness of the upper plate was 0.76 cm and of the lower plate was 0.64 cm. Two identical Stainless Steel washers were used, one between the

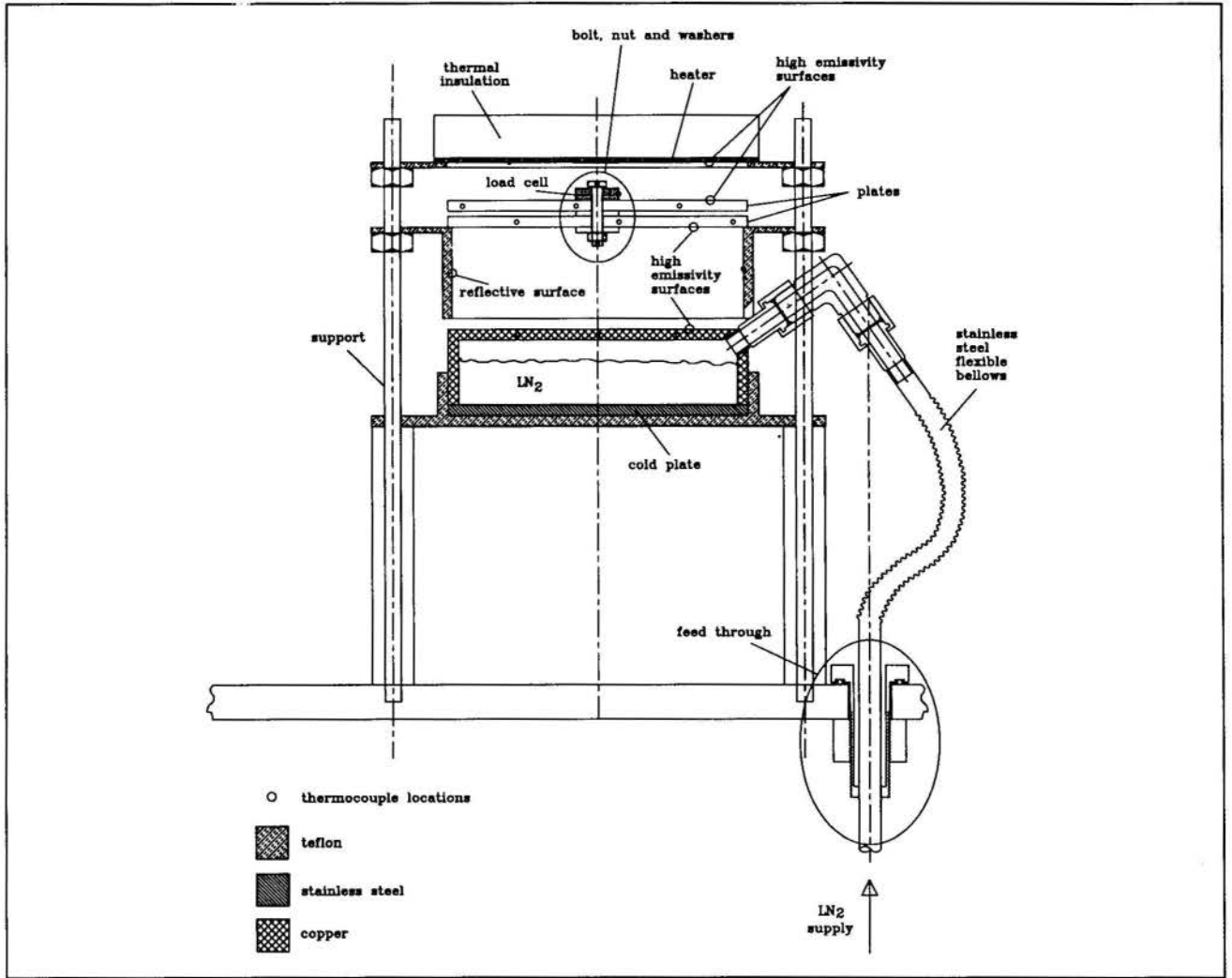


Figure 2. General view of the experimental setup.

plates and other between the lower plate and nut. The dimensions of the washer were: 1.65 cm (external diameter) by 0.74 cm (internal diameter) and 0.32 cm (thickness). A Stainless Steel 304 bolt and nut (specification: 1/4" shaft diameter, 1.5" length, 20 threads/inch, hexagonal head) was used to fasten the mounting components and the load cell (see next section). The flatness deviations of the plate and washer surfaces were found less than 0.3 μm . They were checked using a Krypton 86 monochromatic light source and an optical flat. Three thermocouples were installed in the upper plate, three in the lower plate, one in the nut, two in the bolt and one in each washer (see Figs. 2 and 3). The surfaces of the plates that faced each other were coated with low emissivity aluminum tape, to insulate them from the radiative heat exchange. On the other hand, the opposite surfaces, which faced the cold plate and heater respectively, were coated with high emissivity tape, therefore increasing their emissivities and aiding the radiation heat transfer.

The upper plate was thicker than the lower plate to fit the load cell, since the external diameter of the load cell is larger than the external diameter of the washer. According to Motosh (1975), the material in a plate, which is stressed by tightening can be enveloped by a cone with an angle of 45° . The angle of the cone, with a top area equal to the load cell area, a bottom area equal to the washer area and height equal to the upper plate thickness, is 59.4° . Therefore, the uniform stress applied to the upper face of the upper

plate by the load cell is assumed to be uniformly transferred to the lower face.

Load Cell. The initial stress is an input parameter for the theoretical model. A washer shaped load cell was used to monitor the initial stress applied to the mounting. The stress was applied over a load button placed in the center of the load cell, which had the identical internal and external diameters as the bolt head. An excitation voltage of 12 VDC was applied to the load cell and the resulting sensitivity was 0.0397 mV/N.

The load cell presented two main problems during the tests: a large sensitivity to the variation of temperature and a large zero load shift over a long period of test time. As the "thermal inertia" of the system was large and more than three hours were required to achieve steady-state conditions, it was not possible to find out whether the load cell readings were affected by i) a real stress variation, ii) the load cell zero shift or iii) its sensitivity to the temperature variation. Fortunately, in most practical applications, the stress variation is not an important factor for the overall thermal resistance.

A simple calibration procedure was adopted. Calibrated weights were put over the load cell and the voltage readings were compared with the known applied loads. This calibration was restricted to low loads due to the limited number of available weights. The estimate of the actual initial stress in each mounting

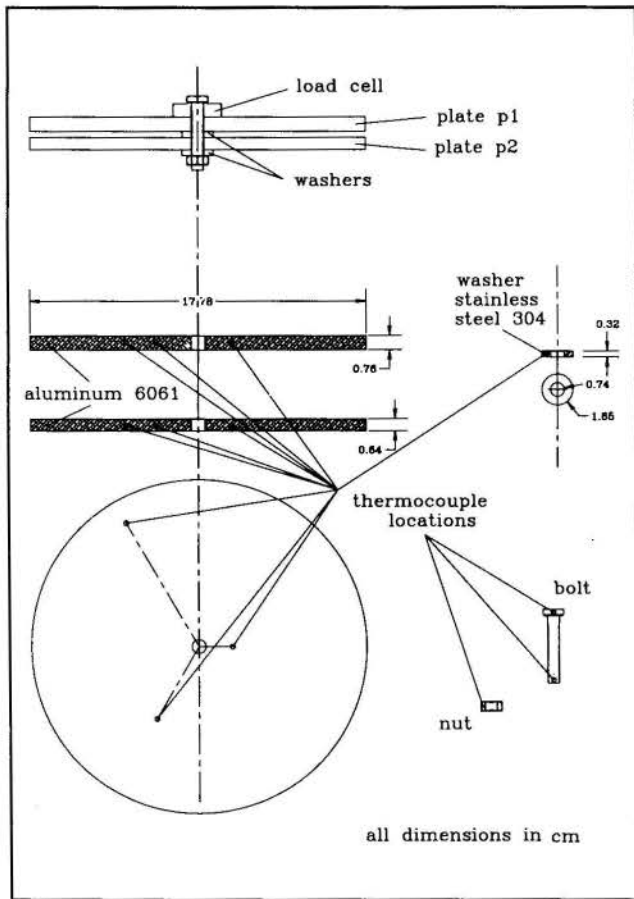


Figure 3. Bolted joint experimental mounting

was made based on this calibration. It should also be noted that during the calibration, the weights were placed perpendicular to the load cell. This is not the actual mounting condition. A bolted joint is tightened by a torque wrench and there is some shearing stress between the mounting components. Therefore, it is expected that there is a difference between the actual and the calibration load measurements, which is difficult to estimate. During the calibration, several measurements were made (around 5) for the same load conditions and a 95% confidence interval was found (according to Young, 1992). Figure 4 shows the plot of the actual load against

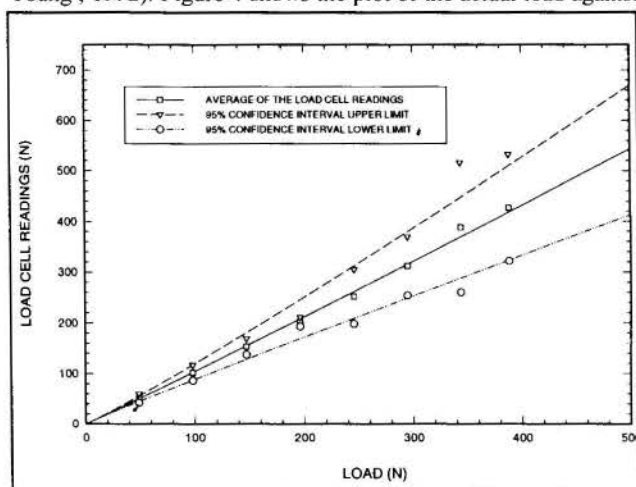


Figure 4. Load cell calibration curves.

the mean value of the measured load (square symbols). For each calibrated load, the upper and lower confidence interval limits were plotted (inverse triangle and circles for the upper and lower 95% uncertainty limits, respectively). Linear curve fits were obtained to help in the estimate of the actual initial stress and its limits. The effect of all these uncertainties, on the overall thermal resistance, is negligible.

Heater. The heater consisted of a circular Aluminum 6061 plate to which a high emissivity Thermofoil Heater, with aluminum foils backing, was attached through a pressure-sensitive adhesive. The heater, of diameter 17.8 cm, had a total electrical resistance of 31.9Ω and its operating temperature was from -54 to 150°C. A base plate, made of a polymeric material (insulating), supported the heater (see Fig. 2). The heater was positioned very close to the upper plate so that the view factor between the upper plate and heater was close to one (≈ 0.97). Radiation was used as the means of heat transfer between the heater and the upper plate.

Cold Plate. The cold plate consisted of a hollow copper cylinder (5.08 cm, high and 17.78 cm, diameter) in which LN₂ was stored. A feed-through connection to stainless steel flexible bellows was used to supply LN₂ to the cold plate, according to Fig. 2. The cold plate volume was designed to keep nitrogen in its liquid phase for at least two hours between fillings. An LN₂ dewar, which was pressurized with compressed air, provided the LN₂. A filled dewar supplied LN₂ to the experiment for two days of tests. The cold plate was supported by a polymeric material base installed in a stainless steel support (see Fig. 2). A cylinder made of the same material, whose internal surface was coated with an aluminum tape, was positioned between the cold plate and the lower plate to redirect the radiation from the lower plate to the cold plate. The supports were made of polymeric material and stainless steel (low thermal conductivity materials), to avoid heat conduction among the setup elements.

ASSEMBLY AND TEST PROCEDURE

The parts of the experimental mounting were assembled as shown in Fig. 2. The torque was applied to the nut by a torque wrench. The zero load reading (zero shift) was taken before assembly. Based on a procedure used in satellite assembly, the torque was applied and released five to ten times before the mounting was finally assembled. The overall thermal resistance measurements were made under steady-state conditions, which were considered achieved when all the temperatures had a variation less than 0.05 K in three minutes (approximately 1.5K/hour). At this condition, the variation of thermal resistance is negligible. The temperatures were measured using Type T (copper-constantan) thermocouples installed as shown in Figs. 2 and 3. The heater power was controlled by a system which also acquired the temperature readings and sent the data to a computer.

Compared to the complete system, which included the stainless steel bell jar, stainless steel base plate, etc., the cold plate can be considered a small heat sink. The lowest temperature level that the lower plate could reach is around 230K. Four different initial stresses were applied to the same junction (9.5 MPa, 3.6 MPa, 2.3 MPa and 18.2 MPa) and the resulting mountings are denoted as A, B, C and D, respectively.

OVERALL THERMAL RESISTANCE DETERMINATION

The overall thermal resistance of bolted joints, is defined as the ratio between the upper and lower plate temperature difference and the heat transferred through the joint, as given by the following equation:

$$R = \frac{T_{p1} - T_{p2}}{Q} \quad (1)$$

where T_{p1} and T_{p2} are estimated from the average of the three temperature readings in each plate. Q is estimated based on the average of the two radiation heat transfer rates: Q_{p1} , which is the heat transfer rate to the upper plate ($p1$, see Fig. 3) and Q_{p2} , which is the heat transfer rate from the lower plate ($p2$, see Fig. 3). These rates are calculated based on the network method for radiation exchange in an enclosure, as given by Ozisik (1989), where cylindrical three zone enclosures are considered for both cases. Figure 5 presents the enclosure and respective radiation network for the heat exchange between the heater and upper plate and between the lower plate and cooler. The heat generated in the heater can irradiate directly to the upper plate or be absorbed by the environment (vertical cylinder wall in Fig 5, which is considered a black body). The upper plate can receive or lose heat from/to the environment, depending on whether the upper plate temperature level is higher or lower than the environment temperature. The same can be observed for the enclosure formed between the lower plate and cooler, with the difference that in this case the vertical wall is a reflecting surface. According to Ozisik (1989), in Fig. 5, E represents the black body emissive power, J is the radiosity (radiation energy leaving the surface, which is composed by the radiation emitted plus the radiation reflected by the surface), F is the view factor between two surfaces, A is the radiation area and Q is the net heat flow in the surface. The surface resistance to radiation is: $(R_i = (1 - \epsilon_i)/A_i \epsilon_i)$ and the resistance to radiation between the radiosities J_i and J_j is: $(R_{i-j} = 1/(A_i F_{i-j}))$. The subscripts i and j are substituted by ht (heater), $p1$ (upper plate), $p2$ (lower plate), bb (black-body), cp (cold plate) and cy (aluminum cylinder). As an example, F_{cy-cp} is the view factor between the aluminum cylinder surface and the cold plate. The total net heat flow leaving the surface is:

$$Q_i = \frac{E_i - J_i}{R_i} \quad (2)$$

The net radiation heat exchange between surfaces i and j is:

$$Q_{i-j} = \frac{E_i - E_j}{R_i + R_{i-j} + R_j} \quad (3)$$

As the emissivity of the black body is 1, $E_{bb} = J_{bb}$ (see Fig 5) and the radiation resistances R_{ht-bb} (given by $1/(A_{ht} F_{ht-bb})$), and R_{bb-p1} (given by: $1/(A_{bb} F_{bb-p1})$) can be combined in series and in parallel with R_{ht-p1} (given by: $1/(A_{ht} F_{p2-cp})$). The resulting Q_{p1} expression, for the heat received by the upper plate is:

$$Q_{p1} = \frac{\sigma (T_{ht}^4 - T_{p1}^4)}{\frac{1-\epsilon_{ht}}{A_{ht}\epsilon_{ht}} \left[A_{ht} F_{ht-p1} \left(A_{ht} F_{ht-bb} \frac{1}{A_{bb} F_{bb-p1}} \right)^{-1} \right] + \frac{1-\epsilon_{p1}}{A_{p1}\epsilon_{p1}}} \quad (4)$$

On the other hand, the heat lost from the lower plate is given by:

$$Q_{p2} = \frac{E_{p2} - J_{p2}}{(1 - \epsilon_{p2}) / A_{p2} \epsilon_{p2}} \quad (5)$$

The value of J_{p2} is obtained from the solution of the following system of equations (Eqs. 6 through 8), which are obtained from the heat balance in the three nodes:

$$\frac{E_{p2} - J_{p2}}{1 - \epsilon_{p2}} = \frac{J_{cy} - J_{p2}}{1} = \frac{J_{cp} - J_{p2}}{1} \quad (6)$$

$$\frac{E_{cy} - J_{cy}}{1 - \epsilon_{cy}} = \frac{J_{p2} - J_{cy}}{1} = \frac{J_{cp} - J_{cy}}{1} \quad (7)$$

$$\frac{E_{cp} - J_{cp}}{1 - \epsilon_{cp}} = \frac{J_{p2} - J_{cp}}{1} = \frac{J_{cy} - J_{cp}}{1} \quad (8)$$

The heat Q (see Eq. 1) transferred through the mounting is given by the average of Q_{p1} and Q_{p2} .

RESULTS

The overall thermal resistances for mountings A, B, C and D are shown in Tables 1 to 4, which also presents the theoretical resistances, calculated by Mantelli (1996) model, the experimental uncertainties (see next section) and the difference between the theoretical and experimental results. The non dimensional resistance is defined as $R^* = R \cdot K_x \cdot L_x$, where T_m is the mean temperature between the upper and lower plates, K_x and L_x are the harmonic means of the conductivities and thicknesses of the upper and lower plates, respectively.

Uncertainty Analysis. The mountings investigated are similar to those presented by Mantelli and Yovanovich (1994). The uncertainty analysis developed in our previous paper is valid for the present work and, therefore, the reader should refer to this paper for details, especially for the bias errors description. Table 5 presents the bias errors found.

The experimental overall thermal resistance is determined through Eq. 1 and its uncertainty is obtained from (see Moffat, 1988):

$$(\Delta R)^2 = \left(\frac{\partial R}{\partial T_1} \right)^2 (\Delta T_1)^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial T_2} \right)^2 (\Delta T_2)^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial Q} \right)^2 (\Delta Q)^2 \quad (9)$$

where Δ is the variation expected for each parameter.

The heat Q transferred by radiation from the heater to the upper plate and from the lower plate to the cold plate are calculated through Eq. 2 through 8. Making 1 the cylinder upper face, 2 the cylinder lower face and 3 the vertical cylindrical wall, the uncertainty obtained in the calculation of the heat flux is given by:

$$\begin{aligned} (\Delta Q_{1,2})^2 &= \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial T_1} \right)^2 (\Delta T_1)^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial T_2} \right)^2 (\Delta T_2)^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial T_3} \right)^2 (\Delta T_3)^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial \epsilon_1} \right)^2 (\Delta \epsilon_1)^2 \\ &+ \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial \epsilon_2} \right)^2 (\Delta \epsilon_2)^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial \epsilon_3} \right)^2 (\Delta \epsilon_3)^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial A_1} \right)^2 (\Delta A_1)^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial A_2} \right)^2 (\Delta A_2)^2 \\ &+ \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial A_3} \right)^2 (\Delta A_3)^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial F_{1,2}} \right)^2 (\Delta F_{1,2})^2 + \left(\frac{\partial Q_{1,2}}{\partial F_{1,3}} \right)^2 (\Delta F_{1,3})^2 \end{aligned} \quad (10)$$

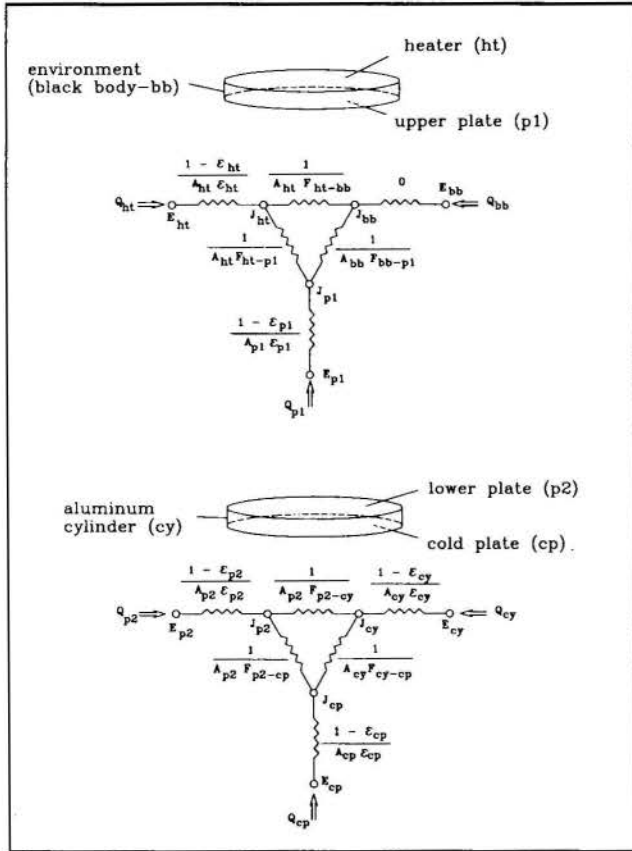


Figure 5. Radiation resistances for the heat exchange between heater and upper plate and between lower plate and cold plate.

Table 1 - Mounting A experimental resistances, uncertainties and comparison with theoretical results.

EXPER. RES.		EXPER. UNCERTAINTY			THEORETICAL RES.		DIFFERENCE (%)	
R (K/W)	R _t *	±Q (W)	±R (K/W)	T _m (K)	R _t (K/W)	R _t *	R _t	R _t *
2.17	0.26	0.01	0.31	8.00	2.05	0.24	5.44	5.42
2.22	0.26	0.02	0.27	6.00	2.04	0.24	8.11	7.93
2.20	0.26	0.02	0.24	4.00	2.03	0.24	7.54	7.47
2.90	0.34	0.03	0.19	-2.00	2.02	0.24	30.48	30.53
2.66	0.31	0.03	0.13	2.00	1.99	0.24	25.31	25.30
2.15	0.25	0.04	0.09	2.00	1.96	0.23	9.06	9.14
2.13	0.25	0.04	0.07	2.00	1.95	0.23	8.73	8.65
2.08	0.25	0.05	0.05	1.00	1.93	0.23	7.12	6.91

Table 2 - Mounting B experimental resistances, uncertainties and comparison with theoretical results.

EXPER. RES.		EXPER. UNCERTAINTY			THEOR. RES.		DIFFERENCE (%)	
R _t (K/W)	R _t *	±Q (W)	±R (K/W)	T _m (K)	R _t (K/W)	R _t *	R _t	R _t *
2.62	0.31	0.01	0.33	-1.5	2.75	0.33	-4.92	-4.95
2.89	0.34	0.01	0.32	2.0	2.72	0.32	5.91	5.71
3.30	0.39	0.01	0.33	4.0	2.77	0.33	16.09	16.00
3.27	0.39	0.02	0.28	4.0	2.66	0.31	18.74	18.81
2.96	0.35	0.03	0.12	-2.0	2.35	0.28	20.87	20.92
2.80	0.33	0.04	0.07	5.0	2.21	0.26	21.04	20.87

where F is the view factor between surfaces. Equation 10 was applied to Eqs. 4 through 8.

Table 3 - Mounting C experimental resistances, uncertainties and comparison with theoretical results.

EXPER. RES.		EXPER. UNCERTAINTY			THEORETICAL RES.		DIFFERENCE (%)	
R _t	R _t *	±Q (W)	±R (K/W)	T _m (K)	R _t (K/W)	R _t *	R _t	R _t *
4.17	0.49	0.02	0.38	-8.0	3.25	0.38	22.02	22.01
4.04	0.48	0.01	0.33	-0.5	3.14	0.37	22.27	22.26
3.98	0.47	0.02	0.27	4.0	3.02	0.36	24.20	24.11
3.71	0.44	0.02	0.24	4.0	2.96	0.35	20.18	20.28
3.57	0.42	0.02	0.16	3.0	2.77	0.33	22.31	22.13
3.43	0.40	0.03	0.10	4.0	2.59	0.31	24.36	24.41

Table 4 - Mounting D experimental resistances, uncertainties and comparison with theoretical results.

EXPER. RES.		EXPER. UNCERTAINTY			THEORETICAL RES.		DIFFERENCE (%)	
R _t	R _t *	±Q (W)	±R (K/W)	T _m (K)	R _t (K/W)	R _t *	R _t	R _t *
2.21	0.26	0.02	0.25	8.0	1.87	0.22	15.15	15.30
2.14	0.25	0.03	0.09	6.0	1.86	0.22	13.08	13.18
2.07	0.24	0.05	0.06	4.0	1.85	0.22	10.62	10.80

Table 5 - Bias errors

error type	description	value
measurement errors	length	±10 ⁻⁶ m
	emissivity of aluminum plates	±0.032
	emissivity of aluminum tape	±0.005
	emis. of kapton over aluminum	±0.007
	emissivity of heater (kapton)	±0.014
	emissivity of stainless steel	±0.120
	emissivity of kapton over copper	±0.013
	temperature (all range)	±1 °C
conceptual errors	no heat was considered to be exchanged by the nut	-0.77 W
disturbance errors	temperature	< 10 ⁻⁵ °C
data acquisition / computation errors	temperature	±0.5 °C

Comparison Between Experimental and Theoretical Results.

Figures 6, 7, 8 and 9 presents the comparison between the data obtained and the theoretical results. The non-dimensional temperature, used in the x axis of the plots, is defined as: $T_m^* = (T_m - K_s \cdot L_s) / q \cdot b^2$, where K_s and L_s are defined as before. The solid curve represents the theory, the symbols represent the experimental points while the vertical bars represent the experimental uncertainties. One should observe that the comparison between data and theory is very good. This paper is not intended to analyze this difference. This study is available in Mantelli (1996).

CONCLUSIONS

The aim of this paper was to describe the experimental setup developed to produce data to be compared with the theoretical results for the overall thermal resistances of bolted joints. For the first time in the literature, bolted joint with washers between plates was studied. The overall thermal resistance of bolted joints, subjected to temperature levels varying from 230 to 350 K were obtained. One should observe that data for temperature levels under room temperature are not common, in the literature. This temperature range covers most of the temperatures of the satellite components in orbit.

The comparison between experimental and theoretical results was very good, specially if one considers the large number of physical parameters, which includes the determination of this overall resistance. This fact, together with the low values of uncertainty observed (see Tables 1 to 4) shows that the experimental setup was well designed. Actually, the setup described in this paper is mounted in the vacuum facilities of the Microelectronic Heat Transfer Laboratory of the University of Waterloo. It was developed as a part of the Ph. D. thesis of the main author. This same apparatus is currently being mounted in the Satellite Thermal Control Laboratory (NCTS) of the Federal University of Santa Catarina, where experimental and theoretical studies in bolted joints will continue.

ACKNOWLEDGEMENTS

The first author acknowledges the financial support of CNPq (Brazilian Research Agency), under grant no.202018/91.1. The second author acknowledges the financial support of the Natural Science and Engineering Research Council, Canada.

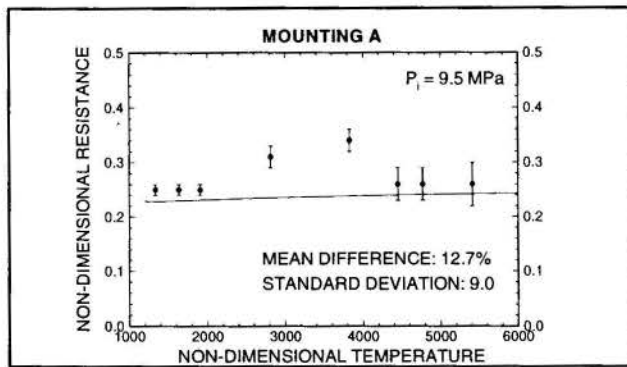


Figure 6. Comparison between experimental data and theoretical results for mounting A.

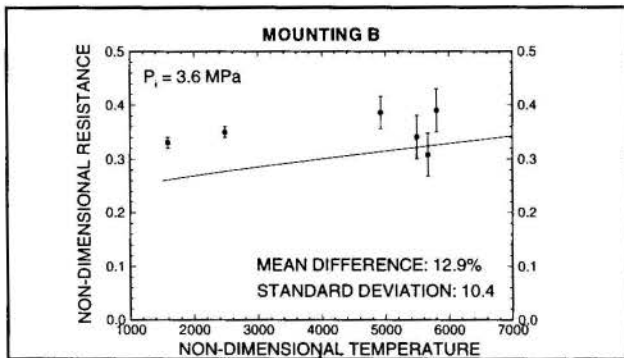


Figure 7. Comparison between experimental data and theoretical results for mounting B.

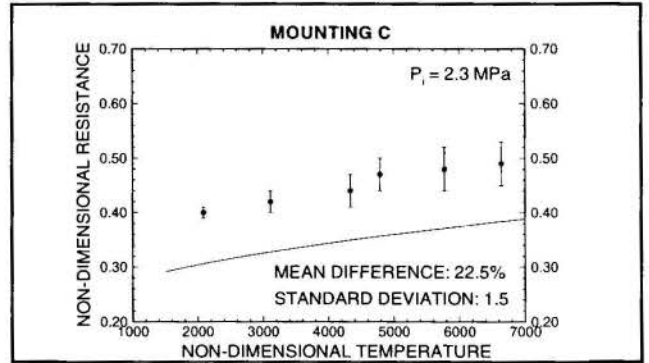


Figure 8. Comparison between experimental data and theoretical results for mounting C.

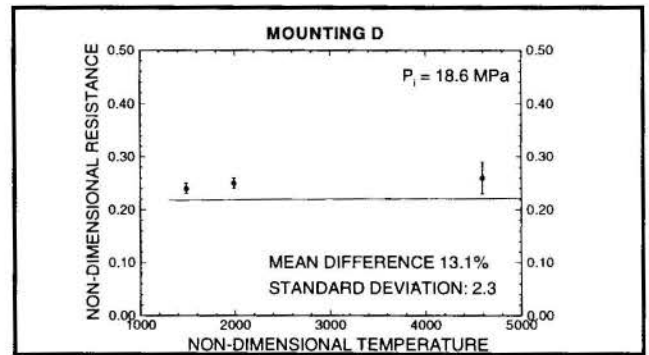


Figure 9. Comparison between experimental data and theoretical results for mounting D.

REFERENCES

Aron, W. and Colombo, G., 1963, "Controlling Factors of Thermal Conductance Across Bolted Joints in a Vacuum Environment," *ASME paper 63-WA-196*.

Elliott, D.H., 1965, "Thermal Conduction Across Aluminum Bolted Joints," *ASME paper 65-HT-53*.

Mantelli, M.B.H., 1996, *Overall Thermal Resistance of Bolted Joints: Models With Experimental Verification*, Ph. D. Thesis, University of Waterloo, Canada.

Mantelli, M.B.H. and Yovanovich, M.M., 1995, "Analytical Model for the Overall Thermal Resistance of Bolted joints", *AIAA paper no. 95-0420*, Reno, Nevada, January 1995.

Mantelli, M.B.H. and Yovanovich, M.M., 1994, "Experimental Determination of the Overall Thermal Resistance of Satellite Bolted Joints", *AIAA paper no. 94-0123*, Reno, Nevada, January 1994.

Mittlebach, M., Vogt, L.S., Fletcher, L.S. and Peterson, G.P., 1992, "The Interfacial Pressure Distribution and Thermal Conductance of Bolted Joints", *ASME-HTD*, Vol. 212, pp. 9-17.

Moffat, R.J., 1988, "Describing the Uncertainties in Experimental Results," *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 1, pp. 3-17.

Motosh, I.N, 1975, "Stress Distribution in Joints of Bolted or Riveted Connections", *Journal of Engineering for Industry*, February, pp. 157-161.

Ozisik, M.N., 1989, *Heat Transfer: a Basic Approach*, MacGraw Hill Book Company Inc, New York, USA.

Song, S., Moran, K.P., Augi, R. and Lee, S., 1993, "Experimental Study and Modelling of Thermal Contact Resistance Across Bolted Joints", *AIAA paper no. 93-0844*, Reno, Nevada.

Young, J.C., 1992, *Basic Statistical Methods for Process Improvement*, University of Waterloo, Canada.



CÁLCULO NUMÉRICO SIMPLIFICADO DA TEMPERATURA DO NÚCLEO DE CONDUTORES CAA

Guilherme E. Filippo Fernandes Filho
Departamento de Energia
Universidade Estadual Paulista - UNESP
12500-000 - Guaratinguetá - SP - Brasil



SUMÁRIO

Este trabalho apresenta um método numérico simplificado para calcular a temperatura do núcleo de cabos de alumínio com alma de aço (CAA). São consideradas situações determinísticas para as condições ambientais, ou seja, intensidade e direção do vento, temperatura e insolação. Os efeitos pelicular e de proximidade da passagem da corrente elétrica são tratados à semelhança de uma metodologia aplicada em aquecimento por indução eletromagnética. Não é considerada a geração interna de calor pelo efeito da histerese magnética. Para o cálculo da condução radial de calor, é assumido uma condutividade radial efetiva, da ordem de cem vezes inferior à do próprio metal condutor. Este trabalho trata apenas do regime permanente. Finalmente é apresentado um exemplo de aplicação.

INTRODUÇÃO

As empresas de energia elétrica no Brasil tipicamente utilizam redes aéreas com cabos nus de alumínio (CA) para o fornecimento aos seus clientes em baixa e média tensão, fora das áreas de grande concentração urbana. A distribuição primária geralmente é realizada num nível de 13,8 KV. Para as chamadas "travessias", ou seja, rios, auto-estradas, estradas de ferro ou outros obstáculos, é costume usar cabos de alumínio com alma de aço (CAA), posto que os vãos são maiores, e maiores são as solicitações mecânicas. Estas "travessias" muitas vezes constituem o gargalo do sistema de distribuição numa dada região. Ocorrendo um evento qualquer que impossibilite a condução de corrente elétrica por uma delas, as outras serão sobrecarregadas.

Cada empresa distribuidora tem a sua própria Norma Técnica de distribuição de energia elétrica, onde é estabelecida a capacidade de condução de corrente de todos os tipos de cabos condutores por elas utilizados (Cavaretti, 1987). Em regra, a capacidade de condução é determinada para situações de regime permanente, a partir dos trabalhos clássicos de House e Tuttle (1959), Morgan (1967) e da Norma IEEE 738 (1986). Para fins de projeto aplica-se um coeficiente de segurança sobre o valor calculado, tipicamente de 70%.

A determinação da capacidade de condução de corrente é essencialmente um problema de transmissão de calor, ou seja, o calor gerado por efeito Joule dentro do cabo deve ser dissipado para o ambiente. As condições de contorno são consideradas constantes, levando-se em conta a pior situação possível para efeito de refrigeração dos cabos (método determinístico). Admite-se uma temperatura ambiente de 40°C, vento de 2,2 Km/h perpendicularmente ao cabo e insolação total de 1000 W/m². Para estas condições ambientais a temperatura média dos cabos não deve ultrapassar os 70°C para cabos CA e 85°C para cabos CAA.

Para todos os efeitos, as empresas distribuidoras consideram para os cabos de alumínio com alma de aço (CAA) a mesma capacidade de corrente dos cabos de alumínio sem alma de aço (CA) com a mesma bitola. A temperatura média de trabalho dos cabos é limitada para evitar a perda de resistência mecânica devido a fluência (creep) e recozimento, além do possível engoailamento dos fios do cabo. Não há pretensão de discutir sobre os aspectos mecânicos e de materiais envolvidos nesta questão.

O objetivo deste trabalho é desenvolver um método de cálculo da capacidade de condução de corrente para cabos condutores de alumínio com alma de aço (CAA), em regime permanente e sob condições climáticas determinísticas. Este método deve levar em conta os efeitos pelicular e de proximidade da condução de corrente.

Os resultados obtidos num exemplo de aplicação são confrontados com os resultados do método tradicional de cálculo. Sua aplicação é sugerida nas situações onde o efeito pelicular é acentuado devido à componentes harmônicas ou à utilização de materiais magnéticos.

CÁLCULO CLÁSSICO DA CAPACIDADE DE CORRENTE

O propósito deste item é fazer uma breve revisão da metodologia tradicionalmente utilizada para a determinação da capacidade de corrente de cabos condutores e apontar suas mais significativas limitações.

A partir do balanço térmico em regime permanente, Morgan (1967) estabelece a capacidade de corrente de um cabo condutor:

$$I = \frac{Q_r + Q_c - Q_s}{R \{1 + \alpha(T_m - 20)\}} \quad (1)$$

onde:

I = corrente total do cabo (A)

Q_r = calor dissipado por radiação (W/m²)

Q_c = calor dissipado por convecção (W/m²)

Q_s = calor recebido por insolação (W/m²)

R = resistência AC por unidade de comprimento (Ω/m)

α = coeficiente de variação da resistência com a temperatura (°C⁻¹)

T_m = temperatura média do condutor (°C)

Como já mencionado, dentro da metodologia determinística o calor de insolação usualmente é considerado igual a 1000 W/m² de área projetada do cabo (House e Tuttle, 1959 e Morgan, 1967). O leitor poderá encontrar um rigoroso tratamento desta questão no trabalho de Davis (1978). Cabe lembrar que a insolação considera tanto a radiação solar direta quanto a difusa.

Para o cálculo do calor dissipado por convecção, considera-se a temperatura ambiente igual a 40 °C e o vento atingindo-o perpendicularmente a 0,61 m/s. Inúmeros trabalhos relatam

expressões para a determinação do coeficiente de película, entre eles House e Tuttle (1959), Morgan (1967), Davis (1977b) e Lin (1992).

O calor dissipado por radiação é calculado considerando que toda superfície externa do cabo irradia para o ambiente a 40°C. Os valores assumidos para a emissividade e absorvidade são os propostos por Black e Rehberg (1985).

Quando se trata de determinar a capacidade de corrente para cabos de linhas elétricas de alta e extra alta tensão, muitas vezes o modelo determinístico é substituído por outros, visando a maximização da transmissão de energia elétrica. Entre eles destacam-se: monitoração da temperatura do cabo em tempo real (Davis, 1977a; Foss et al 1983a e 1983b; Seppa et al, 1993), monitoração da tensão mecânica do cabo em tempo real (Seppa, 1994), modelos determinísticos horo-sazonais (Eletrobras, 1984) e modelos estatísticos (Bianchi, 1992). A razão destes modelos deve-se às condições altamente aleatórias do ambiente. As variações da intensidade e direção do vento, aliadas as variações da temperatura ambiente implicam em significativas alterações da capacidade de dissipação de calor por convecção. O mesmo ocorre com a insolação, cuja carga térmica varia ao longo do dia, depende das condições das nuvens, do tipo de terreno e assim por diante.

Em linhas de distribuição primária, por razões econômicas, não é cabível qualquer tipo de monitoração em tempo real. Dada a grande quantidade de circuitos e a dispersão geográfica, os modelos estatísticos não são aceitos. Resta portanto, a simplificação do método determinístico.

Não se deve perder de perspectiva que na prática nunca haverá um regime permanente, ainda que a corrente seja constante, posto que as condições climáticas estão variando a todo instante, particularmente o vento (Morgan, 1992; Seppa e Witlatch, 1992; Seppa et al, 1993 e Seppa, 1994).

Dentro deste modelo simplificado, a temperatura é considerada a mesma em todo o interior do cabo. Através de medidas experimentais sabe-se que a diferença de temperatura entre a superfície e o núcleo pode ser superior a 15 °C (Lin, 1992 e Black et al, 1988). A condução de calor radial é um fenômeno complexo, dado que o cabo é constituído por camadas de fios torcidos helicoidalmente. Em primeira análise considera-se uma geometria cilíndrica para a representação do cabo. Ainda assim existe o problema da resistência térmica entre as camadas, que consiste do contato entre os próprios fios das camadas, além da transmissão de calor pelas folgas entre os fios e as camadas. A figura 1 ilustra a seção real de um cabo.



Figura 1 : Seção de um cabo CAA

Um dos mais amplos estudos sobre a condição radial de calor foi realizado por Morgan (1990). Suas conclusões indicam que o calor radial é transferido principalmente pelos "air-gaps" dos fios de camadas adjacentes em contato e pelos vãos de ar entre fios das próprias camadas. Todo processo de convecção e radiação no interior do cabo é desprezível. Por outro lado, a área de contato entre metal-metal é dependente da tração sobre o cabo e tende a aumentar com o tempo devido à fluência. Ocorrendo engaiolamento do cabo, aumentam os "air-gaps" e os vãos de ar, dificultando a transmissão de calor.

Como mostrado por Morgan e Geddey (1992) a distribuição angular da temperatura superficial é variável, dependendo da insolação e do ângulo de ataque do vento. Além disso, devido à torção dos fios do cabo, num intervalo de meio

passo de hélice, um mesmo fio estará numa posição alterada de 180°, ou seja, inverte-se a posição facial na superfície, podendo haver condução de calor por ele próprio, complicando enormemente o cálculo térmico. Para todos os efeitos, considera-se a mesma temperatura em todas as posições da superfície.

Deixando de lado as complexidades mencionadas acima, por meio de medidas das temperaturas do núcleo e da superfície do cabo em túneis de vento, obtém-se uma condutividade radial efetiva para cabos CAA (Morgan, 1967):

$$k_r = \frac{P}{2 \cdot \pi \cdot (T_1 - T_2)} \times \left(1/2 - \frac{R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} \times \ln \frac{R_2}{R_1} \right) \quad (2)$$

onde:

P = potência gerada por efeito Joule por unidade de comprimento (w/m)

T₁ = temperatura na alma de aço (°C)

T₂ = temperatura na superfície do cabo (°C)

R₁ = raio externo da alma de aço (m)

R₂ = raio externo do cabo (m)

Este valor pode variar de 0,5 a 6 W/m.°C (Morgan, 1990 e Morgan e Geddey, 1992). Esta condutividade é da ordem de cem vezes menor que a condutividade do alumínio (220 W/m.°C).

A distribuição da temperatura no interior do cabo é dada por Black e Collins, (1988) e Morgan (1990):

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dT}{dr} \right) + \frac{I^2 \rho_0 (1 + \alpha T)}{A_b \cdot A} = 0 \quad (3)$$

onde:

r = raio (m)

T = temperatura (°C)

ρ₀ = resistividade do alumínio a 0 °C (Ω.m)

α = coeficiente da variação da resistividade com a temperatura (°C⁻¹)

A = área da seção espacial do cabo (m²)

A_b = área da seção do material condutor (m²)

A equação acima pressupõe que a corrente elétrica distribui-se uniformemente por todos os fios do cabo, não levando em conta os efeitos pelicular e de proximidade. Estes efeitos fazem com que a densidade de corrente elétrica nos fios das camadas externas do cabo seja maior que nas camadas internas, promovendo uma maior geração de calor por efeito Joule na superfície. Propõe-se a seguir um método numérico que leve em conta estes fatores.

MÉTODO NUMÉRICO SIMPLIFICADO

A distribuição da temperatura num cilindro de raio r e comprimento infinito com geração interna de calor por efeito Joule é dada por:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} + \frac{\rho J^2(r)}{k} = 0 \quad (4)$$

Para calcular a distribuição radial da geração de calor considerando o efeito pelicular, aplica-se o método proposto por Lavers (1978), o qual é largamente aceito para cálculos de sistemas de aquecimento por indução e condução direta. O aquecimento por histerese magnética é considerado desprezível.

Para uma geometria cilíndrica uni-dimensional, as equações de Maxwell em regime estacionário senoidal reduzem-se a:

$$\frac{d}{dr}(\rho \cdot J) = j \cdot \omega \cdot \mu \cdot H \quad (5)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr}(r \cdot H) = J \quad (6)$$

onde:

J = densidade de corrente (A/m^2)

H = intensidade de campo magnético (A/m)

ρ = resistividade do material ($\Omega \cdot m$)

μ = permeabilidade magnética (T/Am)

ω = frequência angular (rad/s)

Para aplicação do método numérico simplificado, o cabo é modelado como sendo constituído por camadas maciças de metal condutor, formando anéis concêntricos, como mostrado na figura 2a, exagerando as folgas entre elas. O raio médio de cada uma coincide com o raio médio da respectiva camada verdadeira do cabo, e sua espessura é tal que sua seção transversal é igual a área total das seções dos fios que formam a camada do cabo.

Por outro lado, cada camada (j) é dividida em anéis (i) com espessura Δr , conforme figura 2b, para que se possa executar o cálculo numérico da difusão do campo eletromagnético, e assim determinar a distribuição do calor gerado internamente. A grade para a solução das equações (4) e (5), seguindo o método de Lavers, é dada na figura abaixo:

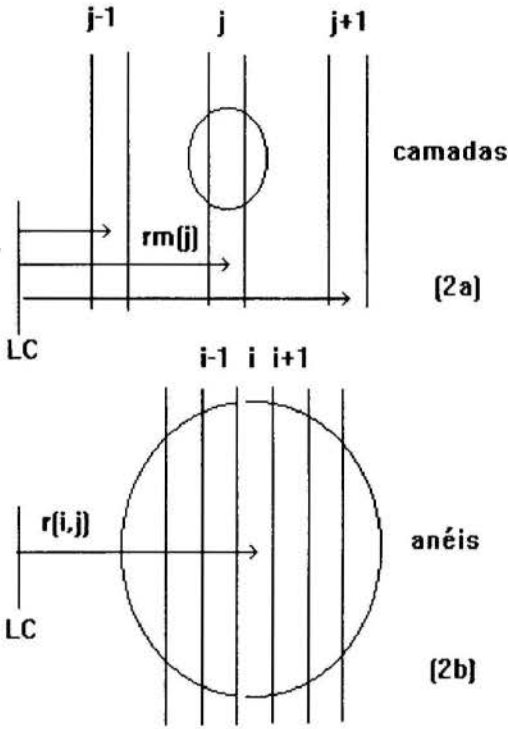


Fig 2: a = Grade para solução do problema
b = Detalhe da grade

$J_{i,j}$ é constante na região:

$$r_{i,j} - \Delta r \leq r \leq r_{i,j}$$

$H_{i,j}$ é constante na região

$$r_{i,j} - \frac{\Delta r}{2} \leq r \leq r_{i,j} + \frac{\Delta r}{2}$$

Inicialmente é arbitrado um valor para $J_{1,1}$, e calcula-se a corrente no primeiro anel da primeira camada:

$$I_{1,1} = \pi \cdot J_{1,1} \cdot \left(\frac{\Delta r}{2}\right)^2 = \pi \cdot J_{1,1} \cdot \frac{\Delta r^2}{4} \quad (7)$$

Pela Lei de Ampere, a intensidade do campo magnético em r_1 é:

$$H_{1,1} = \frac{I_{1,1}}{2 \cdot \pi \cdot r_{1,1}} \quad (8)$$

Considera-se que o campo magnético é constante no intervalo $0 \leq r \leq \Delta r$. Conhecendo-se $H_{1,1}$ pode-se calcular o valor de $I_{2,1}$ a partir da equação (5):

$$J_{2,1} = J_{1,1} + j \cdot \frac{\omega \cdot \mu_{1,1}}{\rho_{1,1}} \cdot \Delta r \cdot H_{1,1} \quad (9)$$

Os anéis seguintes são calculados por:

$$r_{i,1} = r_{i-1,1} + \Delta r$$

$$I_{i,1} = \pi \cdot J_{i,1} \cdot \Delta r (2r_{i,1} - \Delta r)$$

$$H_{i,1} = \frac{1}{2 \pi \cdot r_{i,1}} \cdot \sum_{i=1}^I I_{i,1}$$

$$J_{i+1,1} = J_{i,1} + j \cdot \frac{\omega \mu_{i,1}}{\rho_{i,1}} \Delta r \cdot H_{i,1} \quad (10)$$

A corrente no último anel da camada será:

$$I_{N+1,1} = \pi \cdot J_{N+1,1} \cdot \Delta r \cdot \left(r_N + \frac{\Delta r}{4}\right) \quad (11)$$

e a corrente total da primeira camada será:

$$I_{T,1} = \sum_{i=1}^{N+1} I_{i,1} \quad (12)$$

Para a camada seguinte, admite-se que a densidade de corrente do primeiro anel seja igual a densidade de corrente do último anel da camada anterior, ou seja: $J_{N+1,1} = J_{1,2}$

$$I_{1,2} = \pi \cdot J_{1,2} \cdot \Delta r \cdot \left(a + \frac{\Delta r}{4}\right) \quad (13)$$

$$H_{1,2} = \frac{I_{T,1} + I_{1,2}}{2 \pi \cdot r_{1,2}} \quad (14)$$

onde a é o raio interno da camada.

A partir daí procedem-se os cálculos segundo as equações (9), (10), (11) e (12). Repete-se o procedimento, incluindo as equações (13) e (14), para as demais camadas.

A solução final da corrente total para o cabo é comparada com a corrente especificada. Caso não haja convergência adota-se outro valor para $J_{1,1}$. Repete-se este procedimento até que seja obtida a convergência.

O calor gerado por efeito Joule em cada camada é dado pelo somatório do calor gerado em cada anel. Os efeitos da variação da resistividade com a temperatura são considerados, bem como a natureza magnética do núcleo de aço.

$$P_{i,j} = \frac{\rho_j I_{i,j}^2}{2 \pi \cdot r_{i,j} \cdot \Delta r} \quad (15)$$

e

$$P_j = \sum P_{i,j} \quad (16)$$

O leitor poderá encontrar detalhada explicação deste método nos trabalhos de Lavers (1978) e Burke e Lavers (1978).

Para o cálculo do gradiente da temperatura aplica-se uma formulação numérica em termos de elementos de resistência, apresentada em qualquer livro de cálculo numérico ou de transferência de calor. Embora não seja um método que apresente grande precisão, a mesma não é exigida, dada as imprecisões das condições de contorno, e, especialmente da condutividade radial efetiva.

Cada camada é considerada um elemento nodal, e portanto são isotérmicas. Admitindo um cabo com quatro camadas, as equações seriam:

$$T_1 = \frac{P_1 + \frac{T_2}{R_1^+}}{\frac{1}{R_1^+}}$$

$$T_2 = \frac{P_2 + \left(\frac{T_1}{R_2^-} + \frac{T_3}{R_2^+} \right)}{\frac{1}{R_2^-} + \frac{1}{R_2^+}}$$

$$T_3 = \frac{P_3 + \left(\frac{T_2}{R_3^-} + \frac{T_4}{R_3^+} \right)}{\frac{1}{R_3^-} + \frac{1}{R_3^+}}$$

$$T_4 = \frac{(P_4 + Q_S \cdot 2 \cdot R) + \left(\frac{T_3}{R_4^-} + \frac{T_{amb}}{R_4^+ \cdot RAD} + \frac{T_{amb}}{R_4^+ \cdot CONV} \right)}{\frac{1}{R_4^-} + \frac{1}{R_4^+ \cdot RAD} + \frac{1}{R_4^+ \cdot CONV}} \quad (17)$$

onde as resistências térmicas são dadas por:

$$R_1^+ = \frac{\Delta r_a}{2\pi \cdot (r_{m1} + \Delta r_a / 2) \cdot k_r}$$

$$R_2^+ = \frac{\Delta r_b}{2\pi \cdot (r_{m2} + \Delta r_b / 2) \cdot k_r}$$

$$R_2^- = \frac{\Delta r_a}{2\pi \cdot \left(r_{m2} - \frac{\Delta r_a}{2} \right) \cdot k_r}$$

$$R_3^+ = \frac{\Delta r_c}{2\pi \cdot \left(r_{m3} + \frac{\Delta r_c}{2} \right) \cdot k_r}$$

$$R_3^- = \frac{\Delta r_b}{2\pi \cdot \left(r_{m3} - \frac{\Delta r_b}{2} \right) \cdot k_r}$$

$$R_4^- = \frac{\Delta r_c}{2\pi \cdot \left(r_{m4} - \frac{\Delta r_c}{2} \right) \cdot k_r}$$

$$R_{4,RAD}^+ = \frac{1}{[\sigma \epsilon \cdot 2\pi \cdot R \cdot (T_4^2 + T_{amb}^2) \cdot (T + T_{amb})]}$$

$$R_{4,CONV}^+ = \frac{1}{(h \cdot 2\pi \cdot R)} \quad (18)$$

As equações (17) e (18) são não-lineares e devem ser resolvidas por iteração. As temperaturas são em graus Kelvin.

Foi desenvolvido um programa em FORTRAN para a solução do sistema termo-elétrico.

EXEMPLO DE APLICAÇÃO

Um dos cabos de alumínio com alma de aço mais utilizados pelas concessionárias de energia elétrica para travessias será analisado como exemplo. Trata-se do cabo #336,4 mcm, cujas características são apresentadas a seguir.

Condutor LINNET:	336,4 mcm
	$S_{al} = 170,45 \text{ mm}^2$
	$S_{TOTAL} = 198,17 \text{ mm}^2$
	$\Phi_{aço} = 6,47 \text{ mm}$
	$\Phi_{total} = 18,29 \text{ mm}$
	$N_{al} = 26 \times 2,888 \text{ mm}$
	$N_{aço} = 7 \times 2,245 \text{ mm}$

1ª camada:	$N_{aço} = 1$	$S_{aço} = 3,958 \text{ mm}^2$
2ª camada:	$N_{aço} = 6$	$S_{aço} = 23,750 \text{ mm}^2$
3ª camada:	$N_{al} = 10$	$S_{al} = 65,506 \text{ mm}^2$
4ª camada:	$N_{al} = 16$	$S_{al} = 104,810 \text{ mm}^2$

Considerando $k_r = 1,20 \frac{W}{m^\circ C}$, as resistências térmicas serão:

$$R_1^+ = \frac{1,684}{7,54 \cdot \left(0,561 + \frac{1,684}{2} \right)} = 0,1592$$

$$R_2^+ = \frac{2,567}{7,54 \cdot \left(2,245 + \frac{2,567}{2} \right)} = 0,0965$$

$$R_2^- = \frac{1,684}{7,54 \cdot \left(2,245 - \frac{1,684}{2} \right)} = 0,1592$$

$$R_3^+ = \frac{2,888}{7,54 \cdot \left(4,812 + \frac{2,888}{2} \right)} = 0,0612$$

$$R_3^- = \frac{2,567}{7,54 \cdot \left(4,812 - \frac{2,567}{2} \right)} = 0,0965$$

$$R_4 = \frac{2,888}{7,54 \left(7,700 - \frac{2,888}{2} \right)} = 0,0612$$

Os resultados gerados pelo programa computacional indicam:

Corrente Nominal (A)	Temperatura do Núcleo (°C)
440	71
510	79
530	82
550	85

Para este tipo de cabo, as companhias de distribuição costumam utilizar a capacidade de corrente igual a 440 A quando ele é parte integrante de um circuito com cabos CA, e 510 A quando se trata de um circuito inteiramente constituído de cabos CAA. Para as condições ambientais consideradas, em nenhum dos casos acima a diferença de temperatura entre a superfície e o núcleo ultrapassa 3 °C.

CONCLUSÃO

A aplicação do método de Lavers para o cálculo da distribuição radial do calor gerado internamente por efeito Joule em cabos condutores CAA e sua utilização na determinação da capacidade de corrente mostrou-se plenamente satisfatória. No caso do exemplo apresentado observa-se que para uma corrente de 510 A, a temperatura do núcleo atinge 79 °C para as condições ambientais consideradas. O modelo clássico estabelece 80 °C para a temperatura média do cabo a 510 A.

Tanto em cabos condutores CA como CAA, o efeito pelicular não é significativo em condições normais. Assim, o método numérico simplificado ora proposto não se justificaria. Entretanto, ele torna-se uma ferramenta muito poderosa na determinação da capacidade de corrente em cabos condutores sujeitos a condições especiais, onde o efeito pelicular é apreciável. Entre estas situações destacam-se os cabos condutores de aço utilizados na distribuição de energia elétrica a baixo custo na zona rural, onde o efeito pelicular se pronuncia devido à natureza magnética do material. Outra aplicação que merece destaque é a determinação da capacidade de corrente para cabos CA ou CAA que alimentam cargas especiais com significativas componentes harmônicas, nas quais o efeito pelicular das harmônicas superiores torna-se importante. Em ambos os casos, o método clássico falha na determinação da capacidade de corrente.

BIBLIOGRAFIA

Bianchi, A., 1992, "Capacidade de Corrente de Linhas de Transmissão Aéreas - Enfoque Probabilístico", EPUSP, Dissertação de Mestrado, São Paulo.

Black, W.Z. and Rehberg, R.L., 1985, "Simplified Model for Steady State and Real-Time Ampacity of Overhead Conductors", IEEE - *Trans. on Power Apparatus and Systems*, Vol. 104, pp.2942-2953.

Black, W.Z. et al, 1988, "Theoretical Model for Temperature Gradients Within Bare Overhead Conductors", IEEE- *Trans. on Power Delivery*, Vol. 3, pp.707-715.

Burke, P.E. and Lavers, J.D., 1978, "Resistance Heating of a Circular Billet - Two Simple Analytic Models", IEEE - *Trans. on Industry Applications*, Vol. 14, pp.433-437.

Cavaretti, J.L., 1987, "Projetos de Redes de Distribuição Aérea Primária", Norma Técnica PND 2.2, Eletropaulo, São Paulo.

Davis, M.W., 1977a, "A New Thermal Rating Approach: The Real-Time Thermal Rating System for Strategic Overhead Conductor Transmission Line. Part I - General Description and Justification of the Real-Time Thermal Rating System", IEEE - *Trans on Power Apparatus and Systems*, Vol. 96, pp.803-809.

Davis, M.W., 1977b, "A New Thermal Rating Approach: The Real-Time Thermal Rating System for Strategic Overhead Conductor Transmission Line. Part II - Steady-State Thermal Program", IEEE - *Trans on Power Apparatus and Systems*, Vol. 96, pp.810-825.

Davis, M.W., 1978, "A New Thermal Rating Approach: The Real-Time Thermal Rating System for Strategic Overhead Conductor Transmission Line. Part III - Solar Radiation Considerations", IEEE - *Trans on Power Apparatus and Systems*, Vol. 97, pp.444-456.

Eletrobras, 1984, "Diretrizes Básicas para Projetos de Linhas de Transmissão. Parte II - Extra-Alta Tensão (345 a 750 KV). Vol 1 - Projeto Básico", DPE/DEST/DVET, Rio de Janeiro.

Foss, S.D. et al, 1983, "Dynamic Thermal Ratings. Part I - Dynamic Ampacity Rating Algorithm", IEEE *Trans. on Power Apparatus and Systems*, Vol. 102, pp.1858-1864.

Foss, S.D. et al, 1987, "Significance of the Conductor Radial Temperature Gradient Within a Dynamic Line Rating Methodology", IEEE - *Trans. on Power Delivery*, Vol. 2, pp. 502-511.

House, H.E. and Tuttle, P.D., 1959, "Current-Carrying of ACSR", *Trans of AIEE*, Vol. 59, pp.1169-1177.

IEEE-ANSI Standard 738/1986, "IEEE Standard for Calculation of Bare Overhead Conductor Temperature and Ampacity under Steady-State Conditions", IEEE, 1986.

Lavers, J.D., 1978, "An Efficient Method of Calculating Parameters for Induction and Resistance Heating Installations with Magnetic Loads", IEEE - *Trans. on Industry Applications*, Vol. 14, pp.427-432.

Lin, S.H., 1992, "Heat Transfer in an Overhead Electrical Conductor", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 35, pp.795-801.

Morgan, V.T., 1967, "Rating of Bare Overhead Conductors for Continuous Currents", *Proc. of IEE*, Vol. 114, pp.1473-1482.

Morgan, V.T., 1990, "The Radial Temperature Distribution and Effective Radial Thermal Conductivity in Bare Solid and Stranded Conductors", IEEE - *Trans. on Power Delivery*, Vol. 5, pp.1443-1452.

Morgan, V.T., 1992, "Statistical Distribution of the Temperature Rise of an Overhead-Line Conductor Carrying Constant Current", *Electric Power Sys. Research*, Vol. 24, pp.237-243.

Morgan, V.T. and Geddey, D.K., 1992, "Temperature Distribution Within ACSR Conductors", CIGRE, paper 22-101, Paris.

Seppa, T.O. and Whitlatch, W.F., 1992, "Wind Studies Show a Low Daytime Thermal Risk for Transmission Conductors", *Transmission and Distribution*, May, pp.44-45.

Seppa, T.O. et al, 1993, "Summer Thermal Capabilities of Transmission Lines in Northern California Based on a Comprehensive Study of Wind Conditions", IEEE - *Trans. on Power Delivery*, Vol. 8, pp.1551-1561.

Seppa, T.O., 1994, "Factors Influencing the Accuracy of High Temperature Sag Calculation", IEEE - *Trans. on Power Delivery*, Vol. 9, pp.1079-1089.

SUMMARY

This paper presents a simplified numerical method in order to determine the temperature in the nucleus of aluminium conductor steel reinforced (ACSR). Environmental conditions like temperature , velocity and direction of the wind and solar radiation are supposed to be constants. The skin and proximity effects of electrical current have the same numerical treatment of a methodology applicable to induction heating. The internal heating generated by hysteresis is not appreciate. The radial temperature gradient is calculated by an effective radial thermal conductivity , generally one hundred times smaller than the conductivity of conductor itself. This work deals with steady-state only. Finally it presents an application.



THE CONJUGATE GRADIENT METHOD APPLIED TO INVERSE PROBLEMS IN HEAT CONDUCTION



Antônio J. Silva Neto
 Promon Engenharia
 Av. Pres. Juscelino Kubitschek 1830
 São Paulo, SP, 04543-900

SUMMARY

When an inverse problem involves function estimation, we have an infinite dimensional optimization problem in which we search for the solution in a space of functions. Recently the conjugate gradient method with an adjoint equation has been applied with success to several function estimation problems in heat conduction with no prior information on the quantity to be estimated. In this paper we present the steps involved on the application of the method. Some results are also presented.

INTRODUCTION

Inverse heat conduction problems have numerous important applications in various branches of engineering and science. For example, the determination of thermal properties (Silva Neto and Özisik, 1993a, 1995, Dantas and Orlande, 1995, Macêdo and Orlande, 1995), initial conditions (Hsieh and Lin, 1986, Silva Neto and Özisik, 1994a), and heat source strengths with space and time dependence (Silva Neto and Özisik, 1993b, 1994b) have applications in mechanical, chemical and aerospace engineering.

For the inverse heat conduction problems involving function estimations, the conjugate gradient method with an adjoint equation (Alifanov, 1979, Jarny et al., 1991) has proved to be very efficient because of the built in regularization and small number of iterations to achieve convergence.

In the following sections we describe the basic steps involved on the application of the method to linear inverse heat conduction problems as well as the results for the estimation of timewise varying strengths of heat sources.

FORMULATION OF THE PROBLEM

Consider a one-dimensional plate initially at a uniform temperature with insulated boundaries, that contains a heat source of unknown strength. The dimensionless formulation of this transient heat conduction problem is given by

$$\frac{\partial^2 \Theta(X, \tau)}{\partial X^2} + G(X, \tau) = \frac{\partial \Theta(X, \tau)}{\partial \tau} \quad \text{in } 0 < X < 1, \tau > 0 \quad (1a)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial X} = 0 \quad \text{at } X = 0 \text{ and } X = 1, \text{ for } \tau > 0 \quad (1b)$$

$$\Theta(X, \tau) = 0 \quad \text{for } \tau = 0, \text{ in the region} \quad (1c)$$

where the dimensionless quantities include $\Theta(X, \tau)$ the temperature, X the spatial variable, $G(X, \tau)$ the source strength and τ the time.

THE INVERSE ANALYSIS

The strength of the heat source $G(X, \tau)$ is not known, but transient temperature measurements taken in the medium are available. The objective is to estimate the strength of the heat source using the temperature measurements that are available.

The application of the conjugate gradient method with an adjoint equation involves the steps briefly described below.

The Direct Problem. The direct problem consists on the solution of system (1) considering the strength of the heat source known.

The Sensitivity Problem. To obtain the sensitivity problem we consider a small perturbation on the strength of the heat source ΔG , causing a small perturbation on the temperatures $\Delta \Theta$. We subtract then the original problem (1), from the one considering the perturbations, resulting:

$$\frac{\partial^2 \Delta \Theta(X, \tau)}{\partial X^2} + \Delta G(X, \tau) = \frac{\partial \Delta \Theta(X, \tau)}{\partial \tau} \quad (2a)$$

$$\frac{\partial \Delta \Theta}{\partial X} = 0 \quad \text{at } X = 0 \text{ and } X = 1, \text{ for } \tau > 0 \quad (2b)$$

$$\Delta \Theta(X, \tau) = 0 \quad \text{for } \tau = 0, \text{ in the region} \quad (2c)$$

The Adjoint Problem and the Gradient Equation. The inverse problem is solved as an optimization problem by requiring that the unknown function $G(X, \tau)$ minimize the functional J defined by

$$J[G(X, \tau)] = \int_0^{\tau_f} \sum_{m=1}^M [\Theta_m(\tau) - Z_m(\tau)]^2 d\tau \quad (3)$$

where τ_f is the final time, M is the number of sensors, and Θ_m and Z_m are the dimensionless computed and measured temperatures, respectively, at each sensor location as a function of time.

The adjoint problem is developed by multiplying Eq.(1a) by the adjoint function $\lambda(X, \tau)$, integrating the resulting expression over time and space domain and then adding the result to the functional given by Eq.(3). After a perturbation on the strength of the heat source ΔG , that causes a small perturbation on the temperature $\Delta\Theta$ as we have seen before for the sensitivity problem, we obtain

$$\begin{aligned} \Delta J = & \int_0^{\tau_f} \int_0^1 \sum_{m=1}^M 2[\Theta_m(\tau) - Z_m(\tau)] \\ & \times \Delta\Theta \delta(X - X_m) dX d\tau \\ & + \int_0^{\tau_f} \int_0^1 \lambda(X, \tau) \left[\frac{\partial^2 \Delta\Theta}{\partial X^2} + \Delta G(X, \tau) \right. \\ & \left. - \frac{\partial \Delta\Theta}{\partial \tau} \right] dX d\tau \quad (4) \end{aligned}$$

Using integration by parts and the boundary and initial conditions of the sensitivity problem, and requiring the coefficients of $\Delta\Theta$ to vanish, we obtain the adjoint problem

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \lambda(X, \tau)}{\partial X^2} + \sum_{m=1}^M 2 [\Theta_m(\tau) - Z_m(\tau)] \\ \times \delta(X - X_m) = - \frac{\partial \lambda(X, \tau)}{\partial \tau} \quad (5a) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial X} = 0 \quad \text{at } X = 0 \text{ and } X = 1 \quad (5b)$$

$$\lambda = 0 \quad \text{for } \tau = \tau_f \quad (5c)$$

and the following integral term is left

$$\Delta J = \int_0^{\tau_f} \int_0^1 \lambda(X, \tau) \Delta G(X, \tau) dX d\tau \quad (6)$$

Note that system (5) is different from the standard initial value problems. Here the final time condition at $\tau = \tau_f$ is specified instead of the customary initial condition at $\tau = 0$.

By the definition of gradient, the following relation holds (Alifanov, 1979)

$$\Delta J = \int_0^{\tau_f} \int_0^1 J'_G(X, \tau) \Delta G(X, \tau) dX d\tau \quad (7)$$

By comparison we conclude that the gradient of the functional is given by

$$J'_G(X, \tau) = \lambda(X, \tau) \quad (8)$$

The Conjugate Gradient Method of Minimization. We consider the following iterative procedure for the estimation of the unknown strength of the heat source (Polak, 1971)

$$G(X, \tau)^{k+1} = G(X, \tau)^k - \beta^k P(X, \tau)^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

where the direction of descent is given by

$$P(X, \tau)^k = J'_G(X, \tau)^k + \gamma^k P(X, \tau)^{k-1} \quad \text{with } \gamma^0 = 0 \quad (10)$$

and the conjugate coefficient is given by

$$\gamma^k = \frac{\int_0^{\tau_f} \int_0^1 [J'_G(G^k)]^2 dX d\tau}{\int_0^{\tau_f} \int_0^1 [J'_G(G^{k-1})]^2 dX d\tau} \quad (11)$$

The step size β^k is determined by minimizing the functional with respect to β^k , resulting

$$\beta^k = \frac{\sum_{m=1}^M \int_0^{\tau_f} [\Theta_m(G^k) - Z_m] \Delta\Theta(P^k) d\tau}{\sum_{m=1}^M \int_0^{\tau_f} [\Delta\Theta(P^k)]^2 d\tau} \quad (12)$$

The Stopping Criterion. The criterion of stopping the iterations when there is a small variation on ΔG from one iteration to the next does not work because the errors of the input data may cause unwanted oscillations on the solution. Therefore the discrepancy principle is used instead (Alifanov, 1974, Alifanov and Mikhailov, 1978).

$$J[G(X, \tau)^{k+1}] < \varepsilon^2 \quad (13)$$

where

$$\varepsilon^2 \equiv \int_0^{\tau_f} \sum_{m=1}^M \sigma^2 d\tau \equiv M \sigma^2 \tau_f \quad (13a)$$

The Solution Algorithm. The direct problem, the sensitivity problem, the adjoint function, the gradient equation and the conjugate gradient algorithm are used as follows:

- choose an initial guess $G(X, \tau)^0$
- solve the direct problem (1) to obtain $\Theta(X, \tau)$
- solve the adjoint problem (5) to obtain $\lambda(X, \tau)$
- compute the gradient function $J_G(X, \tau)$, Eq.(8)
- compute the conjugate coefficient γ^k , Eq.(11)
- compute the direction of descent $P(X, \tau)^k$, Eq.(10)
- using $\Delta G(X, \tau)^k = P(X, \tau)^k$ (Jarny et al., 1991) solve the sensitivity problem (2) to obtain $\Delta\Theta(X, \tau)$
- compute the step size β^k , Eq.(12)
- compute $G(X, \tau)^{k+1}$, Eq.(9)
- go back to the second step if the stopping criterion (13) is not satisfied
- stop the iterative procedure.

RESULTS

The functions exhibiting an abrupt change are generally the most difficult cases to recover with an inverse analysis. In order to show the good performance of the conjugate gradient method with an adjoint equation under such strict conditions, we present the results for the source estimation problem involving triangular and rectangular forms of variation with time.

As real measured data was not available, we generated simulated measured data containing measurement errors by adding random errors to the computed exact temperatures as

$$Z_{m,i} = \Theta_{m,i} + \sigma e_{m,i} \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ m = 1, 2, \dots, M \quad (14)$$

where M is the number of sensors and N is the number of measurements taken with each sensor at regular time intervals $\Delta\tau$, from time $\tau = 0$ till $\tau = \tau_f$. For the results presented in Figs. 1 and 2 only two sensors are used, i.e. $M = 2$, one on each boundary surface of the region, $X = 0$ and $X = 1$, in order to avoid the use of sensors within the medium.

In Eq. (14) σ is the standard deviation of measurement errors which is assumed to be the same for all measurements, and

$e_{m,i}$ is the computer generated random error with a normal distribution.

For the test case shown in Fig. 1 we consider a planar surface heat source located at $X = 0,90$. The exact timewise dependence of the strength of the heat source is shown by the solid line. The estimated values of $G(\tau)$ were obtained with the conjugate gradient method considering measured data containing measurement errors of standard deviation $\sigma = 0,01$ and $\sigma = 0,05$ that correspond to measurement errors of 2,6 % and 13 % respectively.

The conjugate gradient method presents a difficulty in estimating $G(\tau)$ for the final time $\tau = \tau_f$. The reason for this is that λ vanishes for $\tau = \tau_f$ as is apparent from Eq.(5c).

Then, from Eqs.(8), (10) and (9) it can be concluded that G^{k+1} will always be equal to the initial guess G^0 for $\tau = \tau_f$. This implies that the solution obtained for $G(\tau)$ at the final time may not be correct because it will be equal to the initial guess. However, such a difficulty at the final time can be alleviated by repeating the calculations with an initial guess chosen from the estimated value of $G(\tau)$ taken few time steps before the final time τ_f and repeating the calculations until sufficient convergence is reached (Silva Neto and Özisik, 1992).

In Fig. 1 we note that the agreement between the exact and estimated results is very good everywhere in the time domain except close to the final time.

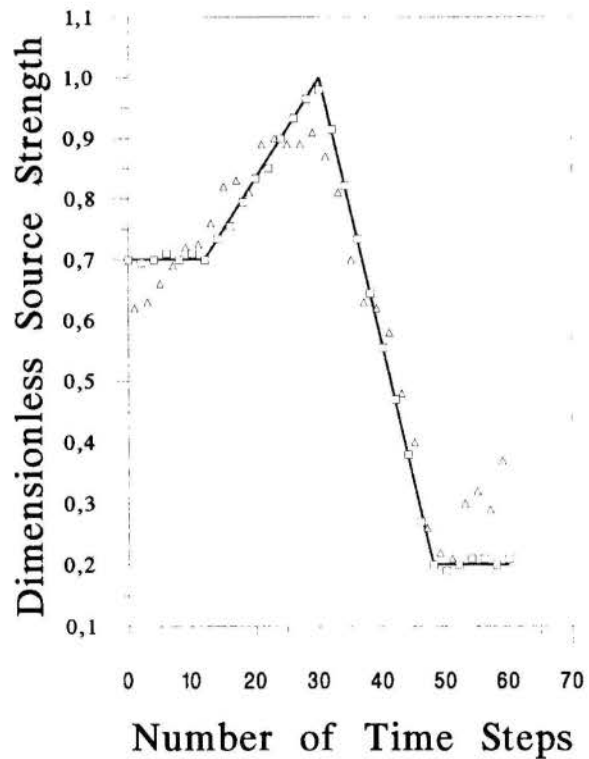


Figure 1 - The estimation of the strength of a plane surface heat source varying with time as a triangular function.

□ $\sigma = 0,01$ Δ $\sigma = 0,05$

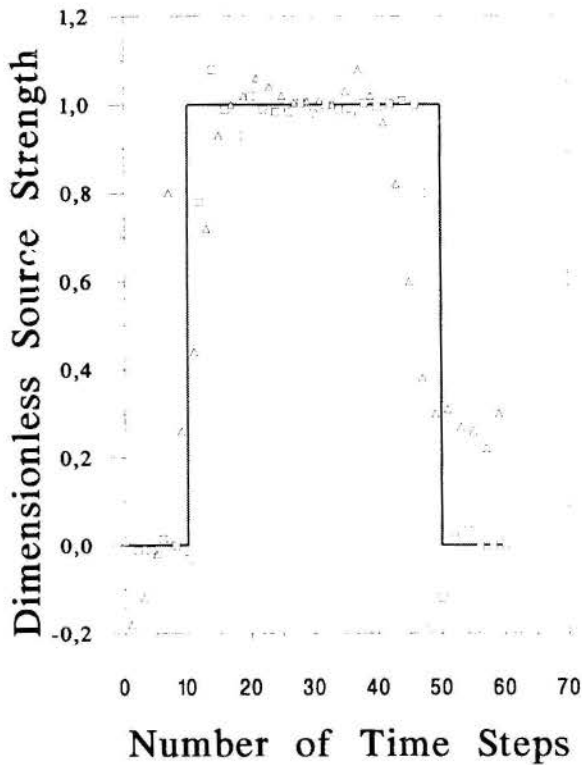


Figure 2 - The estimation of the strength of a plane surface heat source varying with time as a rectangular function.
 $\square \sigma = 0,01$ $\Delta \sigma = 0,05$

For the test case shown in Fig. 2 we consider a planar surface heat source located at $X = 0,70$. The exact timewise dependence of the strength of the heat source is shown by the solid line. The estimated values of $G(\tau)$ were obtained with the conjugate gradient method considering measured data containing measurement errors of standard deviation $\sigma = 0,01$ and $\sigma = 0,05$ that correspond also to measurement errors of 2,6 % and 13 % respectively.

From the results presented in Figs. 1 and 2 we conclude that good estimations are obtained with the conjugate gradient method with an adjoint equation even with poor initial data.

For both cases here presented, less than 60 iterations were required for the estimations of $G(\tau)$. Each function estimation took an average of 10 minutes of CPU time on a RISC 6000 station.

REFERENCES

Alifanov, O.M., 1974, "Solution of an Inverse Problem of Heat Conduction by Iteration Methods", *J. of Engineering Physics*, Vol. 26, pp. 471-476.

Alifanov, O.M. and Mikhailov, V.V., 1978, "Solution of the Nonlinear Inverse Thermal Conductivity Problem by the Iteration Method", *J. of Engineering Physics*, Vol. 35, pp. 1501-1506.

Alifanov, O.M., 1979, *Identification of Heat Transfer Processes of Flying Vehicles (An Introduction to the Theory of Inverse Heat Transfer Problems)*, Mashinostroenie Publishing Agency, Moscow.

Dantas, L.B. and Orlande, H.R.B., 1995, "A Function Estimation Approach for the Determination of the Temperature Dependence of Volumetric Heat Capacity", *Proc. 13th Brazilian Congress on Mechanical Engineering*, Belo Horizonte, Brazil.

Hsieh, C.K. and Lin, J., 1986, "Solution of Inverse Heat Conduction Problems with Unknown Initial Conditions", *Proc. 8th International Heat Transfer Conference*, Vol. 2, pp. 609-614.

Jarny, Y., Özisik, M.N. and Bardon, J.P., 1991, "A General Optimization Method Using Adjoint Equation for Solving Multidimensional Inverse Heat Conduction", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 34, pp. 2911-2919.

Macêdo, E.N. and Orlande, H.R.B., 1995, "Inverse Problem for Estimating the Latent Heat of Solidification", *Proc. 13th Brazilian Congress on Mechanical Engineering*, Belo Horizonte, Brazil.

Polak, E., 1971, *Computational Methods in Optimization*, Academic Press, New York.

Silva Neto, A.J. and Özisik, M.N., 1992, "Two Dimensional Inverse Heat Conduction Problem of Estimating the Time-Varying Strength of a Line Heat Source", *J. Appl. Phys.*, Vol. 71, No. 11, pp.5357-5362.

Silva Neto, A.J. and Özisik, M.N., 1993a, "An Inverse Problem of Estimating Thermal Conductivity, Optical Thickness, and Single Scattering Albedo of a Semi-Transparent Medium", *Proc. Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice*, ASME, editors N. Zabaras, K.A. Woodbury and M. Raynaud, pp. 267-273.

Silva Neto, A.J. and Özisik, M.N., 1993b, "Inverse Problem of Simultaneously Estimating the Timewise-Varying Strengths of Two Plane Heat Sources", *J. Appl. Phys.*, Vol. 73, No. 5, pp. 2132-2137.

Silva Neto, A.J. and Özisik, M.N., 1994a, "An Inverse Heat Conduction Problem of Unknown Initial Condition", *Proc. 10th International Heat Transfer Conference*, Brighton, England.

Silva Neto, A.J. and Özisik, M.N., 1994b, "The Estimation of Space and Time Dependent Strength of a Volumetric Heat Source in a One-Dimensional Plate", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 37, No. 6, pp. 909-915.

Silva Neto, A.J. and Özisik, M.N., 1995, "An Inverse Problem of Simultaneous Estimation of Radiation Phase Function, Albedo and Optical Thickness", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 53, No. 4, pp. 397-409.

ANALYSIS OF HEAT CONDUCTION FOR FOOD FREEZING BY SPACE-TIME FINITE ELEMENT METHOD

Nelson Moraga, Gerardo Díaz and Aldo Aedo
 Department of Mechanical Engineering
 Universidad de Santiago de Chile
 Casilla 442, Correo 2, Santiago, Chile

SUMMARY

An space-time formulation for the finite element method has been developed for bidimensional transient heat conduction non linear problems with liquid-solid phase changes and applied to a process of freezing of cylindrical and plate shaped foods. Experiments on freezing trou meat molded into cylinders and parallelepiped were performed to measure time history of temperature in the mass center and to validate the numerical method.

INTRODUCTION

Over the past years, numerical simulation has become an important tool that has been applied to solve problems in almost every engineering discipline. Numerical methods such as finite differences; volumes and elements have been developed and tested against analytical solutions and experimental data.

Most of the finite element formulations developed for different thermal problems make use of a space domain discretization leaving the time variation to the discrete nodal quantities. The idea of time discretization to solve a thermoelasticity problem was presented by Nickell and Sackman (1968) and since then, Yu and Hsu (1985) have used this formulation to solve a one dimensional linear problem of unsteady heat conduction and Bonnerot and Jamet (1977) have reported numerical solution for the Stefan problem. More recently, French (1993) developed a space-time formulation for solving the wave equation that is also useful for second-order hyperbolic problems. Aliabadi and Tezduyar (1993) shown that space-time finite element solutions can be applied to study compressible flows involving moving boundaries and interfaces and Pironneau et al. (1992) have used this approach to solve the advection-diffusion equation including time-dependent domains.

MATHEMATICAL MODEL AND SOLUTION

Liquid-solid phase change bidimensional heat conduction problems can be formulated in terms of the apparent specific heat as suggested by Hsiao (1985), in terms of the non linear heat diffusion equation

$$C_a(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n k(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (1)$$

with an initial condition of uniform temperature, and boundary conditions of symmetry in both axis and external convection with a time-dependent fluid temperature.

$$T(t=0) = 0 = \frac{\partial T}{\partial r}(r=0) = 0 ; \quad \frac{\partial T}{\partial z}(z=0) = 0 \quad (2)$$

$$-k(T) \frac{\partial T}{\partial r}(r=a) = h_a(t) [T(r=a) - T_f(t)] ; \quad (3)$$

$$-k(T) \frac{\partial T}{\partial z}(z=1) = h(t) [T(z=1) - T_f(t)] \quad (4)$$

Space-time finite element method for a bi-dimensional transient problem is based in a discretization process that makes use of non-physical eight nodes finite volumes that include time as the third coordinate and hence:

$\Delta V = 2\pi r \Delta r \Delta z \Delta t$. The Galerkin formulation yields to the general equation

$$-\iiint k \frac{\partial T}{\partial r} \frac{\partial N_i}{\partial r} 2\pi r \, dr \, dt \, dz - \iiint k \frac{\partial T}{\partial z} \frac{\partial N_i}{\partial z} 2\pi r \, dr \, dt \, dz \quad (5)$$

$$-\iiint \rho C \frac{\partial T}{\partial t} N_i 2\pi r \, dr \, dt + \int_{S_1} k N_i \frac{\partial T}{\partial r} \, dS_1 + \int_{S_2} k N_i \frac{\partial T}{\partial z} \, dS_2 = 0$$

where S_1 and S_2 are radial and axial conduction areas. Linear interpolation functions for the eight node element allows the definition of the interpolation matrix

$$N = \frac{1}{V} \begin{pmatrix} (r_5 - r) (z_4 - z) (t_2 - t) \\ (r_6 - r) (z_3 - z) (t - t_1) \\ (r_7 - r) (z - z_2) (t - t_4) \\ (r_8 - r) (z - z_1) (t_3 - t) \\ (r - r_1) (z_8 - z) (t_6 - t) \\ (r - r_2) (z_7 - z) (t - t_5) \\ (r - r_3) (z - z_6) (t - t_8) \\ (r - r_4) (z - z_5) (t_7 - t) \end{pmatrix} \quad (6)$$

Integrating by parts allows for the calculation of each one of

the integrals in the last equation for the eight nodes element. Hence, the radial heat conduction I_1 for each element is

$$I_1 = C_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{72} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{72} & -\frac{1}{36} \\ & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{72} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{72} \\ & & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{72} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & -\frac{1}{36} \\ & & & \frac{1}{18} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{72} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} \\ & & & & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{72} & \frac{1}{36} \\ & & & & & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{72} \\ & & & & & & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} \\ & & & & & & & \frac{1}{18} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \end{bmatrix} \quad (7)$$

where $C_1 = -2\pi k (x_2^2 - x_1^2) (\Delta z)^3 (\Delta t)^3 / V^2$

The axial heat conduction I_2 can be computed from

$$I_2 = C_2 \begin{bmatrix} \frac{IR_1}{3} & \frac{IR_1}{6} & -\frac{IR_1}{6} & -\frac{IR_1}{3} & \frac{IR_2}{3} & \frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{3} \\ & \frac{IR_1}{3} & -\frac{IR_1}{3} & -\frac{IR_1}{6} & \frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{3} & -\frac{IR_2}{3} & -\frac{IR_2}{6} \\ & & \frac{IR_1}{3} & \frac{IR_1}{6} & -\frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{3} & \frac{IR_2}{3} & \frac{IR_2}{6} \\ & & & \frac{IR_1}{3} & -\frac{IR_2}{3} & -\frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{3} \\ & & & & \frac{IR_2}{3} & \frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{3} \\ & & & & & \frac{IR_2}{3} & -\frac{IR_2}{3} & -\frac{IR_2}{6} \\ & & & & & & \frac{IR_2}{3} & \frac{IR_2}{6} \\ & & & & & & & \frac{IR_2}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \end{bmatrix} \quad (8)$$

where $C_2 = -2\pi k \Delta z (\Delta t)^3 / V^2$ and the IR_i , $i = 1, 2, 3$ are evaluated from the integrals

$$\begin{aligned} IR_1 &= \int_{x_1}^{x_7} (x_7 - x)^2 x dx ; IR_2 = \int_{x_1}^{x_7} (x - x_1)^2 x dx \\ IR_3 &= \int_{x_1}^{x_7} (x_7 - x) (x - x_1) x dx \end{aligned} \quad (9)$$

The unsteady term, describing the rate of change for the internal energy in the element that include time a third "spatial" coordinate is

$$I_3 = C_3 \begin{bmatrix} -\frac{IR_1}{6} & \frac{IR_1}{6} & \frac{IR_1}{12} & -\frac{IR_1}{12} & -\frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{12} & -\frac{IR_2}{12} \\ \frac{IR_1}{6} & \frac{IR_1}{6} & \frac{IR_1}{12} & -\frac{IR_1}{12} & -\frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{12} & -\frac{IR_2}{12} \\ -\frac{IR_1}{12} & \frac{IR_1}{12} & \frac{IR_1}{6} & -\frac{IR_1}{6} & -\frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{6} \\ \frac{IR_1}{12} & \frac{IR_1}{12} & \frac{IR_1}{6} & -\frac{IR_1}{6} & -\frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{6} \\ -\frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{12} & -\frac{IR_2}{12} & -\frac{IR_3}{6} & \frac{IR_3}{6} & \frac{IR_3}{12} & -\frac{IR_3}{12} \\ \frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{6} & \frac{IR_2}{12} & -\frac{IR_2}{12} & -\frac{IR_3}{6} & \frac{IR_3}{6} & \frac{IR_3}{12} & -\frac{IR_3}{12} \\ -\frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_3}{12} & \frac{IR_3}{12} & \frac{IR_3}{6} & -\frac{IR_3}{6} \\ \frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{12} & \frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_2}{6} & -\frac{IR_3}{12} & \frac{IR_3}{12} & \frac{IR_3}{6} & -\frac{IR_3}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \end{bmatrix} \quad (10)$$

where $C_3 = -2\rho c \pi (\Delta t)^2 (\Delta z)^3 / V^2$

An energy balance between internal heat conduction and external convective heat transfer performed in the S_1 external radial surface is

$$\int_{S_1} k N_i \frac{\partial T}{\partial r} dS_1 - \int_{S_1} h_r (T - T_\infty) N_i dS_1 = \int_{S_1} h_r N_i N_j T_j dS_1 - \int_{S_1} h_r T_\infty N_i dS_1 \quad (11)$$

that can be evaluated in two terms, the first one in terms of the unknown surface temperature

$$\int_{S_1} h_r N_i N_j T_j dS_1 = C_4 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 4 & 2 & 1 & 2 \\ & & & & 4 & 2 & 1 & 2 \\ & & & & & 4 & 2 & 1 \\ & & & & & & 4 & 2 \\ & & & & & & & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \end{bmatrix} \quad (12)$$

with $C_4 = 2\pi R h_r (\Delta r)^2 (\Delta z)^3 (\Delta t)^3 / 36 V^2$ and a second term that includes the fluid temperature

$$\int_{S_1} h_r T_\infty N_i dS_1 = C_5 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (13)$$

where $C_5 = 2\pi R h_r T_\infty \Delta r (\Delta z)^2 (\Delta t)^2 / 4 V$

A similar approach in the axial direction yields to the following equation for the energy balance at the external axial surface

$$\int_{S_2} k N_i \frac{\partial T}{\partial z} dS_2 = \int_{S_2} h_{zu} N_i N_j T_j dS_2 - \int_{S_2} h_{zu} T_\infty N_i dS_2 \quad (14)$$

where the first integral include the unknown surface temperature

$$\int_{S_2} h_{zu} N_i N_j T_j dS_2 = C_6 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 IR_1 & IR_1 & 0 & 0 & 2 IR_1 & IR_1 & 0 & 0 \\ & 2 IR_1 & 0 & 0 & IR_1 & 2 IR_1 & 0 & 0 \\ & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 2 IR_2 & IR_2 & 0 \\ & & & & & & 2 IR_2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \end{bmatrix} \quad (15)$$

where $C_6 = 2\pi h_{zu} (\Delta z)^2 (\Delta t)^3 / 6 V^2$. The second integral takes into account the external fluid temperature

$$\int_{S_2} h_{zu} T_\infty N_i dS_2 = \frac{2\pi h_{zu} T_\infty \Delta z (\Delta t)^2}{2V} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ IFS_1 \\ 0 \\ 0 \\ IFS_1 \\ 0 \\ IFS_2 \\ 0 \\ IFS_2 \end{bmatrix} \quad (16)$$

in terms of the following two radial integrals

$$IFS_1 = \int_{r_1}^{r_2} (r_2 - r) r dr ; IFS_2 = \int_{r_1}^{r_2} (r - r_1) r dr \quad (17)$$

EXPERIMENTS AND RESULTS

The transient space finite element formulation was tested by predicting and measuring the evolutions of the temperature at different positions, in a cylindrical and a plate shaped food that underwent freezing processes in a chamber, with air ambient temperature variable in time.

The experimental procedure used trout (*oncorhynchus mikiis*) meat, without bones molded in two shapes: (1) a cylinder, 55mm in diameter, 100 mm in length and 257 g weight and (b) a parallelepiped of 12 by 90 x 240 mm and 257 g weight. Temperature inside the meat and of the ambient air inside a 0.8 m³ chamber was measured with T types thermocouples, 0.3 mm in diameter with an accuracy of $\pm 1^\circ\text{C}$, at intervals of 5 s. A Cole Parmer scanner was used together with a MAC 14 computer program in order to capture the temperature signal with a personal computer (386DX, 40 Mhz, 8Mb RAM memory). The food was placed inside the chamber, initially both at ambient temperature, and two fans were used to move cool air at a measured speed of 1 m/s. Air temperature changes were accurately registered at 5 seconds intervals during 9000 s and they are shown in figure 1. As it can be noticed, after 1270 s an oscillatory change of the air temperature was caused by the action of a thermostat. The overall trend of air temperature with time was included in the mathematical model by using a logarithmic term for the initial period ($t < 1270$ s) and then by a sinusoidal wave with both amplitude and periods that change with time. Both transient real changes of air temperature and the approached ones are shown in figure 1.

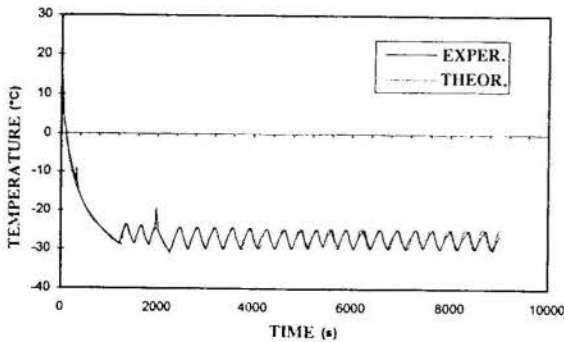


Fig.1. Time variation of air ambient temperature inside the freezing chamber.

The properties of the trout meat were calculated by using a thermodynamics model based on a binary mixture of water and solids, Morales et al. (1994). This was built into a subroutine that was incorporated in the finite-element program. The initial data needed and its values at 15°C were the following: density = 1100 kg/m³; thermal conductivity = 0.497 W/m² °C; specific heat = 3.153 kJ/kg °C; enthalpy = 280055 J/kg; while the crioscopic temperature was equal to 1.8 °C and the water content was equal to 64%.

The physical domain was discretized by using 10 nodes in radial direction, 12 nodes in the axial direction for a quarter of the cylinder, assumed to be symmetric in both spatial direction. Time steps ranging from 0.1 to 1 s were used in all calculations with the smaller values for the time intervals when the cooling speed of air was greater. The overall heat transfer coefficient was calculated to be equal to 38 W/m² °C.

Figure 2 shows a comparison between the measured temperature in the mass center of the plate shaped trout food and two numerical simulations performed by using the time space finite element method and a numerical model based on finite differences with a similar discretization, Jacob (1995). The predicted values for the time history are seen to compare well with the measured data. During the first 5000 seconds the finite element results are closer than the transient temperature calculated with the finite difference method, and the opposite is true for the final stage of the cooling process.

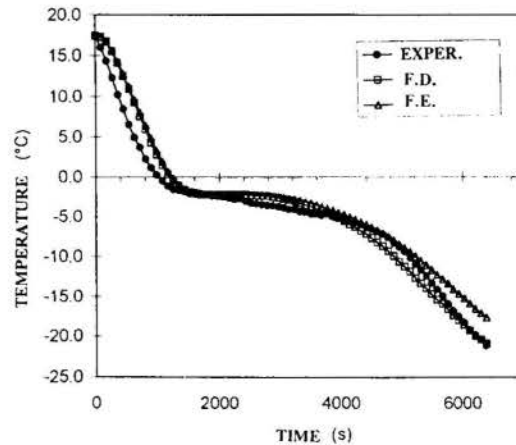


Fig.2. Predicted and measured cooling curve of the mass center for a plate shaped trout.

Figure 3 shows a comparison between the measured temperature in the mass center of the cylindrical shaped food, made of trout meat, and the predicted value calculated by using the time-space formulation of the finite element method. Overall agreement is noticed to be good, with some minor differences observed after the phase change of the water content has taken place.

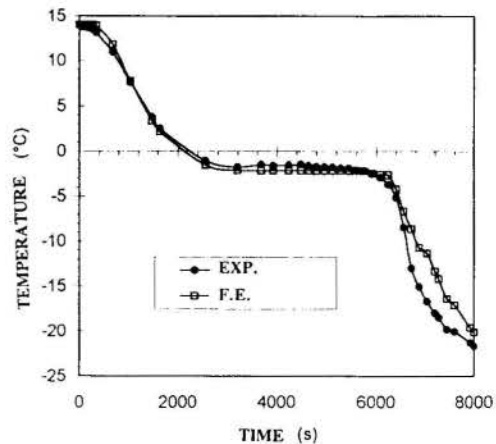


Fig.3. Comparison of finite element results and measured data for transient temperature the mass center of trout meat cylindrically shaped.

CONCLUSIONS

An space-time formulation for the finite element has been developed to solve bidimensional unsteady non linear heat conduction problems with liquid-solid phase changes and the details of the matrices development has been presented.

Meat of trouts has been molded into plates and cylindrical shapes and the solidification of the water content of the food in a chamber has been studied under time varying air ambient temperature. Experiments have been performed to measure the temperature variation in time in the food during freezing. The prediction obtained making use of the time-space finite element model for the unsteady temperature variation of the center of mass has been shown to agree well with the measured values and with numerical data obtained by using a finite difference explicit method.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the support, in part, of the CONICYT-FONDECYT 195-0458 project, and of DICYT, at the Universidad de Santiago de Chile.

REFERENCES

- Aliabadi S.K. and Tezduyar, T.E., 1993, "Space-time finite element computation of compressible flows involving moving boundaries and interfaces", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 107, 209-223.
- Bonnerot R. and Jamet P, 1977, "Numerical computation of the free boundary for the two-dimensional Stefan problem by space-time elements", *Journal of Computational Physics*, 25, 163-181.
- French D.A., 1993, "A space-time finite element method for the wave equation", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 107, 145-157.
- Hsiao, J.S., 1985, "An efficient algorithm for finite-difference analyses of heat transfer with melting and solidification", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 8, pp. 653-666.
- Jacob, M.N., 1995, "Numerical and experimental study of 1D and 2D heat conduction during meat freezing of regular shaped foods", Thesis Mechanical Engineering, Universidad de Santiago de Chile (in spanish).
- Morales-Blancas E., Lescano C.E and Moraga N.O., 1994, "Predicción de las propiedades termofísicas de los alimentos durante la congelación utilizando el criterio de la depresión del punto de congelación de una solución binaria ideal", *Actas V Congreso Latinoamericano de Transferencia de Calor y Materia*, Venezuela, Tomo I, pp. II B-1.
- Nickell R.E. and Sackman J.J., 1968, "Aproximate solutions in linear coupled thermoelasticity", *J. Appl. Mech., ASME Trans., Ser. E*, 35 (2), 255-266.
- Pironneau O., Liou J. and Tezduyar T., 1992, "Characteristic-Galerkin and Galerkin/least-squares space-time formulations for the advection-diffusion equation with time-dependent domains", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 100, 117-141.
- Yu J.R. and Hsu T.R., 1985, "Analysis of heat conduction in solids by space-time finite element method". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 21, pp. 2001-2012.



FLUXO DE CALOR NÃO-ESTACIONÁRIO EM MEIOS MULTI-COMPOSTOS

Paulo Otto Beyer

Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
90050-170 - Porto Alegre - RS - Brasil



SUMÁRIO

Neste trabalho é apresentada uma metodologia semi-analítica para o cálculo do fluxo de calor não-estacionário em meios multi-compostos. O método baseia-se na aplicação da transformada de Laplace e inversão numérica por quadratura de Gauss. O método é aplicado à paredes externas de edificações sujeitas à radiação solar e convecção para o ar. As paredes são compostas por vários meios com propriedades térmicas diferentes. Faz-se uma ampla revisão bibliográfica e análise de erro para o método.

INTRODUÇÃO

A motivação que levou ao desenvolvimento deste assunto foi basicamente o fato de que a envoltória das edificações apresenta um comportamento térmico não-estacionário, principalmente pelo fato das condições externas jamais estacionarem como conjunto. Este comportamento reflete-se diretamente no comportamento térmico dos ambientes internos da edificação, interferindo em aspectos importantes como conforto térmico e dimensionamento dos sistemas de climatização, e consequente consumo de energia.

Procura-se então uma metodologia capaz de realizar de forma semi-analítica o cálculo dos fluxos de calor existentes na envoltória da edificação. Neste trabalho é dada especial atenção à paredes externas multicompostas.

A metodologia analítica procurada apresenta como principal vantagem em relação aos métodos numéricos tradicionais o fato de não necessitar incrementos seqüenciais no tempo e/ou espaço. Esta metodologia poderá futuramente ser incorporada à programas computacionais de dimensionamento ou simulação de sistemas de climatização.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Foram procurados trabalhos versando sobre a difusão de calor e migração de umidade não-estacionários em meios multi-compostos. Os trabalhos encontrados foram divididos em quatro grupos: Métodos numéricos, funções de transferência, métodos analíticos e transformada de Laplace.

Métodos Numéricos. Os trabalhos encontrados foram subdivididos em difusão de calor e migração de umidade, análise de pontes térmicas e medições experimentais.

Difusão de calor e migração de umidade. Spolek et al (1985) preocupam-se com o fato de que o isolamento de paredes para conservação de energia aumenta a possibilidade de condensação de umidade no interior destas. Ojanen e Kohonen (1989) analisam a influência higrótérmica da convecção do ar na estrutura de paredes. Burch e Thomas (1992) apresentam uma análise da acumulação de umidade em uma parede multicamada de madeira sujeita ao clima de inverno, através de um modelo transiente, unidimensional, em diferenças finitas, que prediz a transferência acoplada de calor e massa. Karagiozis e Kumaran (1993)

verificam o desempenho de barreiras contra vapor em paredes através de análises numéricas.

Pontes térmicas. Standaert (1985) analisa pontes térmicas transientes bi e tridimensionais por métodos numéricos, baseados em técnicas de balanço energético. Burch (1992) faz uma avaliação de pontes térmicas utilizando um modelo em diferenças finitas para predizer o desempenho térmico estacionário e transiente.

Metodologias experimentais. Chorneyko e Besant (1989) apresentam um modelamento térmico da base de uma edificação com e sem piso isolado, através da instrumentação do porão de uma casa para medir os fluxos de calor e distribuição de temperaturas nas paredes isoladas e piso não isolado durante um ano.

Funções de Transferência e Funções Z. Foram divididas em funções de transferência e transformada Z.

Funções de transferência. Ackerman e Dale (1987) comparam medições experimentais e previsões computacionais das perdas de calor em paredes de concreto isoladas e não-isoladas de porões em climas frios. Burch et al (1990) mostram uma comparação de dois métodos de teste para determinar os coeficientes da função de transferência para uma parede usando um calorímetro de câmara quente calibrada, onde verifica experimentalmente e compara dois métodos de teste dinâmico para caracterizar o desempenho térmico transiente de paredes compostas. Seem et al (1990) apresentam um modelo para reduzir as funções de transferência, colocando que os métodos da função de transferência são mais eficientes para resolver problemas de transferência de calor transientes de tempos longos que Euler, Crank-Nicolson ou outras técnicas clássicas. Mais recentemente, Spitler e McQuiston (1993) desenvolvem um manual para cálculo de cargas de aquecimento e resfriamento, na forma do novo ASHRAE Cooling and Heating Load Calculation Manual, com ênfase em novas técnicas e dados.

Transformada Z. Eunilkim (1988) discute as bases e formalismo dos fatores de peso ambiental em termos de funções de transferência discretas de um modelo de zona simples, utilizando técnicas de transformada-Z, para analisar os fenômenos de transferência energética transiente em edificações. Haghghat e Liang (1992) apresentam uma revisão das alternativas de determinação da condução de calor transiente através da envoltória de edificações. Krarti et al (1994) descrevem um algoritmo que calcula a transferência detalhada de calor entre o solo e edifícios, com análise do efeito do isolamento. Uma forma semelhante

às funções Z são os fatores de resposta. Irving (1992) coloca que os fatores de resposta térmica oferecem uma forma acurada do desempenho dos componentes da edificação.

Métodos Analíticos Gerais. Nesta seção serão vistos métodos analíticos que não utilizam a transformada de Laplace. Apresentam a subdivisão: Separação de variáveis e séries de potência, métodos integrais e outros métodos analíticos.

Separação de variáveis e séries de potência. Burow e Weigand (1990) analisam a condução de calor unidimensional em um sólido semi-infinito onde a temperatura superficial é uma função harmônica periódica. Chang e Payne (1991) procuram uma solução analítica exata para a condução de calor em uma placa com duas camadas de materiais diferentes com condutividade linearmente dependente da temperatura. Tsai e Crane (1992) preocupam-se com a transferência de calor entre superfícies com contato imperfeito. Choudhury e Jaluria (1994) obtêm uma solução analítica para a distribuição de temperatura transiente em uma placa plana e em uma barra cilíndrica de comprimento finito movendo-se a velocidade constante com transferência de calor convectivo na superfície.

Métodos integrais. Haji-Sheikh e Beck (1990) apresentam um procedimento para obter soluções precisas para muitos problemas de condução transiente em geometrias complexas usando um método integral baseado em Galerkin (IBG). Vujanovic e Jones (1990) consideram três métodos analíticos para procurar as soluções aproximadas de problemas de condução de calor unidimensional, transiente e não linear baseando-se nas equações canônicas de transferência de calor. Bouzidi (1991) propõe um modelo analítico para o tratamento da difusão térmica não-estacionária e unidirecional em uma parede multicamada plana, cilíndrica ou esférica.

Outros métodos analíticos. Shapiro e Motakef (1990) investigam experimental e analiticamente a transferência de calor e massa unidimensional transiente com troca de fase em uma placa porosa. Caulk (1990) desenvolve um método especial para calcular as temperaturas da solução estacionária periódica em corpos sólidos com condições de contorno em alta-freqüência, com coeficientes variáveis temporais determinados por um método Galerkin. Grandjean e Thibault (1991) apresentam um novo critério para assumir resistência térmica interna negligenciável em problemas de condução de calor transientes. Claridge (1992) apresenta o TC 4.7 Procedimento para Análises Energéticas Simplificadas (PAES), que não incorpora massa térmica como um fator na estimativa das necessidades energéticas de aquecimento e resfriamento de um prédio. Hou et al (1993) apresentam um método de elementos discretos para meios compostos e condução de calor unidimensional, utilizando a função de Green. Wei e Shian (1993) apresentam uma solução analítica para o campo tridimensional de temperaturas no líquido e zonas termicamente afetadas ao redor de uma cavidade de solda produzida por uma radiação móvel distribuída de densidade energética baixa ou alta. Xin e Tao (1994) investigam uma solução analítica para a condução de calor transiente em dois meios semi-infinitos em contato com diversos materiais.

Transformada de Laplace. Neste item serão apresentados métodos que utilizam a transformada de Laplace, divididos em métodos híbridos e inversão por séries ou tabelas.

Métodos híbridos. Estes métodos em geral utilizam a Transformada de Laplace associada com alguma metodologia numérica. Chen e Chang (1990) desenvolvem uma aplicação do método híbrido em problemas inversos de condução de calor combinando transformada de Laplace e elementos finitos. Kolev e Van der Linden (1993) apresentam uma aplicação da transformada de Laplace na solução de problemas de transferência de

calor e massa transientes em sistemas de escoamento. Chen e Lin (1993) investigam uma simulação numérica da condução de calor hiperbólico.

Inversão por séries ou tabelas. Kolev e Pungor (1987) discutem o problema de resolver numericamente modelos hidráulicos baseados no fluxo tamponado disperso axialmente pela transformada de Laplace, que é aplicável para o modelamento matemático de diferentes fluxos através de sistemas. Ku e Chan (1990) propõe uma técnica para estender o método da transformada de Laplace de forma a obter uma solução de forma fechada para problemas não lineares de troca de fase, utilizando transformadas inversas conhecidas. Blackwell (1990) obtém uma solução analítica para o perfil de temperatura em um sólido semi-infinito com uma fonte com decaimento exponencial e condição de contorno convectiva usando transformadas de Laplace e soluções tabeladas da transformada inversa. Zedan e Mujahid (1993) desenvolvem um método preciso e eficiente para calcular a resposta transiente de uma parede composta sujeita a fluidos com temperatura variável periodicamente em um lado e constante no outro.

DESENVOLVIMENTO DO PROBLEMA

Seja um elemento multicomposto por diversos meios i , sendo que i varia de 1 até M . O problema tem no lado esquerdo uma temperatura $T_a(t)$, função horária cíclica, que será posteriormente analisada, e um coeficiente de convecção conhecido. No lado direito existe uma temperatura e um coeficiente de convecção, ambos constantes. Os meios i são compostos por materiais diferentes, sendo que entre eles pode ou não existir contato térmico perfeito.

A equação básica do problema é:

$$\frac{\partial^2 T_i(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_i} \frac{\partial T_i(x,t)}{\partial t} \quad \begin{matrix} x_i < x < x_{i+1} \\ i = 1, 2, \dots, M \\ t > 0 \end{matrix} \quad (1)$$

sujeita às condições de contorno, interface e inicial acima definidas, que podem ser vistas em Beyer (1995).

O problema resolvido considera contato térmico perfeito entre os meios. A condição inicial é uma função que deve ser ajustada conforme a distribuição de temperaturas nos diversos meios ao fim de cada período de cálculo, no caso de condição externa cíclica.

SOLUÇÃO ANALÍTICA

Aplicando a Transformada de Laplace à equação básica do problema 1 vem:

$$\frac{d^2 \bar{T}_i(x,s)}{dx^2} - \frac{s}{\alpha_i} \bar{T}_i(x,s) = -\frac{T_{oi}(x)}{\alpha_i} \quad (2)$$

Nesta equação $\bar{T}_i(x,s) = L\{T_i(x,t); t \rightarrow s\}$, onde L é o operador transformada de Laplace. Deve-se também aplicar a Transformada de Laplace às condições de contorno e após propor uma solução para a equação 2, qual seja:

$$\begin{aligned} \bar{T}_i(x,s) = & A_i(s) \exp(-R_i x) + B_i(s) \exp(R_i x) \\ & + \frac{\exp(-R_i x)}{2R_i \alpha_i} \int_{x_i}^x \exp(R_i x) (a_i + b_i x + c_i x^2) dx \\ & - \frac{\exp(R_i x)}{2R_i \alpha_i} \int_{x_i}^x \exp(-R_i x) (a_i + b_i x + c_i x^2) dx \end{aligned} \quad (3)$$

Nesta equação R_i vale $\sqrt{s/\alpha_i}$ e a distribuição inicial de temperaturas $T_{oi}(x)$, para melhor ajuste ao campo inicial real de temperaturas, é tomada como polinômios quadráticos $a_i + b_i x + c_i x^2$. As exponenciais constantes da equação formam uma base para uma solução apropriada. A equação 3 deve ser integrada e após deve ser colocada junto com suas derivadas nas condições de contorno. Com isto pode-se montar um sistema linear para obtenção dos coeficientes A_i e B_i . Este sistema linear tem a variável s complexa participando do cálculo dos coeficientes. Estes coeficientes devem ser colocados nas equações da função $T_i(x,t)$, solução do problema 1a, que é encontrada pela fórmula de inversão da transformada de Laplace. Neste trabalho utiliza-se o cálculo desta integral de inversão por Quadratura Gaussiana, substituindo-se a variável complexa s pelos valores dos pontos da Quadratura.

QUADRATURA GAUSSIANA

A quadratura de Gauss é um método de integração numérica que utiliza intervalos com espaçamentos desiguais. Utiliza polinômios ortogonais para aproximação das funções a serem integradas. Como estes polinômios efetivamente aproximam as funções, pode-se utilizar esquemas de integração numérica baseadas em polinômios ortogonais. A derivação das fórmulas de quadratura, em termos gerais, inclui a normalização do intervalo de integração, a amostragem da função a ser aproximada nas raízes desigualmente espaçadas do polinômio ortogonal e a geração do polinômio de interpolação. As fórmulas de quadratura são então desenvolvidas pela integração de polinômios de interpolação. A escolha do polinômio depende do tipo de função e dos limites de integração.

A aproximação numérica da integral é (Hornbeck 1975):

$$\bar{I} = C [A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + \dots + A_n f(x_n)] \quad (4)$$

onde os x_i são os n pontos com espaçamento variável determinados pelo tipo e grau do polinômio ortogonal utilizado, e os A_i são os fatores de peso encontrados no curso da derivação. O termo C é uma constante determinada pelos limites da integral.

Para utilização da quadratura de Gauss, deve-se colocar que a solução do problema 3 é feita pelo retorno do domínio s para o domínio t , através da integral de inversão:

$$T_i(x,t) = \frac{1}{2\pi j} \int_{s=c-j\infty}^{c+j\infty} \exp(st) \bar{T}_i(x,s) ds \quad (5)$$

Fazendo $st = p$ para obter uma integral definida sem o parâmetro t no termo exponencial, introduzindo o termo $c'=c/t$, escolhendo a fórmula de Quadratura Gaussiana apropriada, segundo Heydarian e Mullincaux (1981) e relacionando a função $F(p_k)$ com a função $\bar{T}_i(x, p_k/t)$, que deve ser invertida, tem-se:

$$T_i(x,t) = \frac{1}{2\pi j} \int_{c-j\infty}^{c+j\infty} \exp(p) \frac{\bar{T}_i(x, p_k/t)}{t} dp = \sum_{k=1}^n A_k (p_k/t) \bar{T}_i(x, p_k/t) \quad (6)$$

Pode-se então calcular $T_i(x,t)$ substituindo-se s por p_k/t . Os termos A_k e p_k podem ser encontrados para até $n = 24$ com 30 casas decimais em Stroud e Secrest (1966). A substituição $s \rightarrow p_k/t$ é utilizada para encontrar as constantes de integração A_i e B_i do problema e junto com os valores de A_k para encontrar $T_i(x,t)$.

É necessário pois inverter a matriz n vezes para qualquer x ou t procurado diretamente, independente de incremento nestas variáveis.

APLICAÇÃO DO MÉTODO

O desempenho térmico da envoltória de edificações tem participação importante no conforto térmico interno e no consumo de energia no caso de utilização de condicionamento artificial. A envoltória das edificações está normalmente em processo transiente de transferência de calor, seja em resfriamento ou aquecimento. Este cálculo transiente tem como principal forma de realização atualmente o uso do Método da Função de Transferência (ASHRAE 1993, Mitalas 1972) que apresenta algumas limitações em termos de flexibilidade, incremento temporal e campo de temperaturas. Outra metodologia possível é o uso do Método dos Volumes Finitos, que por ser numérico apresenta as necessidades típicas de incrementos espaciais e temporais, sendo porém mais flexível às paredes.

TEMPERATURA SOL-AR

A condição de contorno externa é de 3ª espécie, com troca de calor por convecção. Nesta troca, no caso de paredes externas de edificações, deve estar incluído o efeito da radiação solar, o que é feito com a introdução de uma temperatura fictícia chamada temperatura Sol-Ar (ASHRAE 1993).

O método analítico exige uma função excitação contínua, e a temperatura Sol-Ar apresenta como desvantagem o fato da radiação solar ser descontínua ao longo do dia.

A solução do problema está baseada na função externa, e a precisão da resposta está diretamente dependente da precisão desta função, que pode ser obtida pela utilização de um polinômio em dupla precisão.

A utilização de um único polinômio para as 24 h traz polinômios de graus elevados, com oscilações importantes em torno do valor original. Para contornar este problema, o período de 24 h foi dividido em períodos menores, e ajustado um polinômio, de menor grau, para cada um destes períodos, obtendo-se a precisão observada na figura 1. No final de cada período, deve-se conhecer o campo de temperaturas dentro da parede, que traz a condição inicial do problema para o ciclo seguinte.

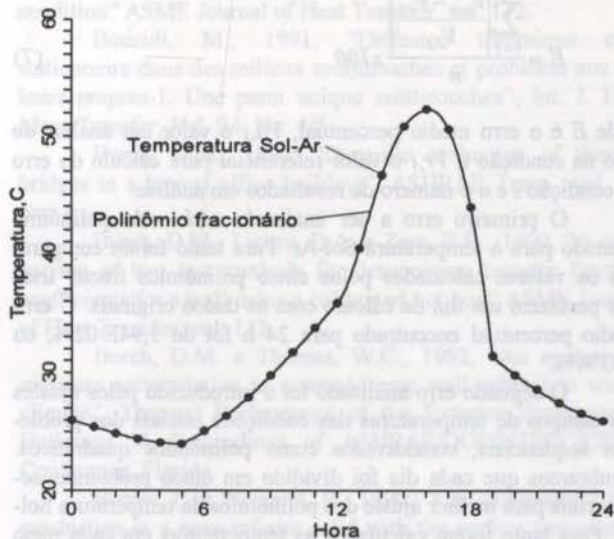


Figura 1. Resultado do polinômio para temperatura Sol-Ar

A parede, estando em processo transiente de fluxo de calor, apresenta distribuições não lineares de temperatura. Neste trabalho, são considerados ajustes do campo de temperatura por polinômios quadráticos do tipo $a_i + b_i x + c_i x^2$.

A distribuição de temperaturas e polinômios considerados como condição inicial para as 19 h do quarto dia (regime cíclico) para o estuque e concreto do problema resolvido podem ser vistas na figura 2.

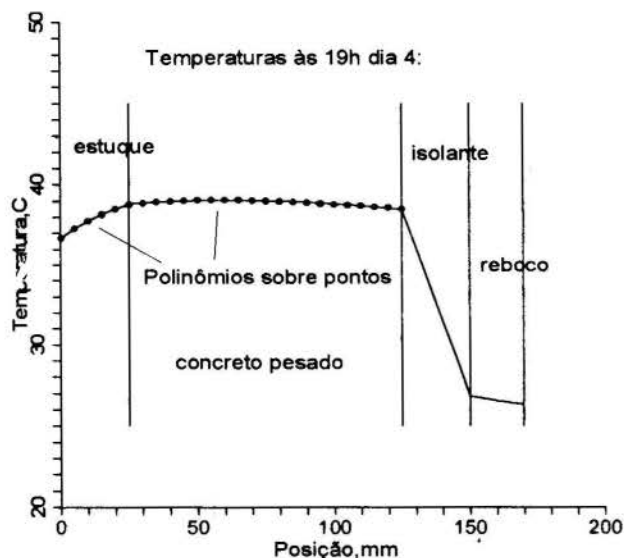


Figura 2. Distribuição de Temperaturas e Polinômios

PROBLEMA RESOLVIDO

Para avaliar o comportamento do método foi resolvido o problema constante em ASHRAE (1993), pg. 26.17 (Beyer 1994, 1995), e passou-se a avaliação de erros do método.

ANÁLISE DE ERROS

Os erros do sistema aqui analisados foram calculados pela seguinte equação geral:

$$E = \frac{\sum_{i=1}^n \left| \frac{V_{a,i} - V_{r,i}}{V_{r,i}} \right|}{n} \times 100 \quad (7)$$

onde E é o erro médio percentual, $V_{a,i}$ o valor em análise de erro na condição i , $V_{r,i}$ o valor referencial para cálculo do erro na condição i e n o número de resultados em análise.

O primeiro erro a ser analisado será o do polinômio ajustado para a temperatura Sol-Ar. Para tanto foram comparados os valores calculados pelos cinco polinômios fracionários que perfazem um dia de cálculo com os dados originais. O erro médio percentual encontrado para 24 h foi de $3,94E-02\%$, ou $0,0394\%$.

O segundo erro analisado foi o introduzido pelos ajustes dos campos de temperaturas das condições iniciais dos problemas sequenciais, considerados como polinômios quadráticos. Lembramos que cada dia foi dividido em cinco problemas sequenciais para melhor ajuste dos polinômios da temperatura Sol-Ar. Para tanto foram calculadas as temperaturas em cada meio no final de cada intervalo de tempo, em espaçamento de 5 mm (cinco milímetros), e calculadas as correspondentes temperaturas com os polinômios quadráticos ajustados para cada condição inicial e para cada um dos quatro meios constituintes da parede,

num total de 5 períodos x 4 meios = 20 cálculos de erro conforme equação 7. Foi então feito a média dos 20 cálculos de erro, chegando-se ao valor de $4,405E-03\%$, ou $0,0044\%$ de erro para as condições iniciais.

As próximas análises de erro feitas são ligadas ao método da quadratura Gaussiana propriamente dito, sendo interessante colocar primeiramente uma visão conceitual do erro nas quadraturas.

O melhor método para avaliar a precisão de uma integral calculada por quadratura de Gauss é comparar os resultados para vários valores de n , ou seja, para diversas quantidades de pontos de quadratura. O grau de precisão pode então ser considerado proporcional ao número de casas decimais corretas nas respostas. Pode-se às vezes encontrar grande variação entre as respostas, devido à presença de singularidades ou oscilações em $f(x)$. Para grandes valores do número de pontos de quadratura pode-se ter deteriorações nas respostas causadas por erro de arredondamento ou truncagem nos cálculos.

Pode-se ter uma idéia da potência da quadratura de Gauss pelo conhecimento de que o método opera essencialmente com um polinômio de interpolação de grau $2n-1$. Portanto, se $n=10$, o polinômio de interpolação é de grau 19. Como o polinômio de interpolação é de grau $2n-1$, o método é exato para integração de polinômios de graus $2n-1$ ou menos.

Esta última consideração não pode ser aplicada diretamente ao problema em análise, pois a função em integração é composta por exponenciais, conforme equação 3. Pode-se porém dizer que os polinômios das condições iniciais são de grau 2 e o polinômio da temperatura Sol-Ar não passa de grau 10. Convém salientar que os dois participam da solução do problema.

O problema em análise foi então resolvido para diversos valores de pontos de quadratura, especificamente para $n = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14$ e 16 , e os resultados horários do quarto dia foram sequencialmente comparados. Chamou-se aqui, entretanto, de variação em vez de erro. Os resultados obtidos foram:

Varição de 02 para 04 pontos de quadratura: 10,4%
 Varição de 04 para 06 pontos de quadratura: 0,0177%
 Varição de 06 para 08 pontos de quadratura: 0,0015%
 Varição de 08 para 10 pontos de quadratura: 0,00018%
 Varição de 10 para 12 pontos de quadratura: 0,000094%
 Varição de 12 para 14 pontos de quadratura: 0,00046%
 Varição de 14 para 16 pontos de quadratura: 0,0046%

Observa-se claramente que o sistema vai convergindo até $n = 12$ quando passa a divergir, provavelmente por erros de arredondamento ou truncagem, já que a matriz dos coeficientes A_i e B_i tem que ser invertida n vezes para se encontrar os coeficientes de integração. Escolhe-se portanto, como valor ideal para o problema em análise o valor de $n=12$.

Para testar a estabilidade do método foram introduzidas modificações nos valores de entrada do problema e observadas as variações nas respostas. Neste sentido, num primeiro cálculo, a temperatura Sol-Ar foi variada em mais e menos dez graus hora a hora e foi observada a variação na temperatura da face interna da parede, também hora a hora. Num segundo cálculo, a condutividade térmica dos meios constituintes (e por consequência a difusividade térmica) foi variada em mais e menos dez por cento, e observada a variação obtida no fluxo interno de calor hora a hora.

No primeiro caso, a variação de mais e menos 10°C hora a hora na temperatura Sol-Ar causou exatas variações de mais e menos $1,37^\circ\text{C}$ hora a hora na temperatura da face interna da parede, mostrando grande estabilidade do sistema, pois a perturbação foi simétrica em relação à excitação inicial, e a resposta da

parede foi exatamente simétrica. Salienta-se aqui que quando da variação menos dez graus, algumas vezes a temperatura da face interna da parede ficou menor que a temperatura interna do ambiente, resultando em carga térmica negativa (entrada de calor na parede), e mesmo assim o sistema apresentou-se estável.

No segundo caso, com variação das propriedades térmicas dos materiais, um acréscimo de 10 % na condutividade e difusividade térmica causou um aumento de 6,7 % no fluxo de calor interno, e uma diminuição de 10 % causou uma diminuição de 7 % no fluxo de calor. As variações não foram idênticas pois não variou-se as demais condições do problema como coeficientes de convecção, excitação, espessuras, densidades e calor específico.

A última análise de precisão e estabilidade feita sobre o sistema traz junto um retorno à um procedimento já utilizado, que foi a de ajuste da temperatura Sol-Ar utilizando um polinômio único para as 24 h, com oscilações inerentes em torno do valor correto da temperatura. Este procedimento foi abandonado procurando-se melhorar a precisão do método. Como atualmente já se conhecem respostas precisas, é possível comparar as respostas obtidas com polinômios fracionários, que divide o dia em cinco problemas, com as respostas obtidas com polinômio único para todo o dia. Perde-se em precisão, mas ganha-se em esforço computacional, pois pode-se ter incrementos temporais de 24 h, em vez de 5 h.

A diferença média entre os fluxos de calor calculados pelos dois métodos, hora a hora para o quarto dia foi de 1,24%, podendo-se resolver cinco problemas seqüenciais no lugar de aproximadamente dezoito, dependendo da hora a ser calculada. Considera-se resultados razoáveis do ponto de vista de estabilidade e precisão, principalmente em Engenharia, para uma boa economia computacional. Este aspecto ganha muito em relevância se for comparado com os métodos numéricos, que teriam que discretizar o domínio espacial e temporal, para os quatro dias. Os dois procedimentos, em termos de excitação e resposta aparecem na figura 3. Notas-se que, devido ao amortecimento da parede, não fazem muita diferença as oscilações da excitação, sendo muito difícil distinguir diferenças nas respostas do problema. Para uma parede mais leve (150mm tijolo) a diferença fica em 2,14%.

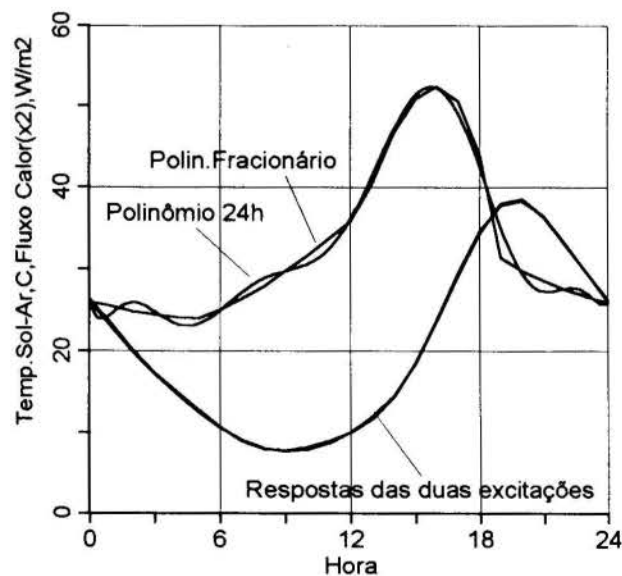


Figura 3. Resposta com polinômios fracionário e diário

CONCLUSÕES

O Método Laplace/Gaussiana apresenta facilidades de uso, permitindo flexibilidade em relação à possibilidade de calcular-se qualquer tipo de parede, inclusive com alterações nos coeficientes de película.

Em relação aos métodos numéricos tradicionais, o Método Laplace/Gaussiana apresenta como grande vantagem o fato de não depender de incremento seqüencial seja na variável espacial ou na temporal. Com isto consegue uma rapidez de cálculo bem maior, pois pode-se chegar diretamente ao quarto dia de cálculo somente calculando-se a distribuição de temperatura ao fim de cada período fracionário ou dia de cálculo, já que o método analítico tem inerente em sua formulação o efeito temporal total da função excitação do problema. Também o método analítico permite o cálculo das temperaturas somente nas interfaces, por eliminar a necessidade de discretização do domínio espacial. Consegue-se com isto uma diminuição significativa no tempo computacional para solução do fluxo em superfícies opacas multicamadas.

Existe também a possibilidade do método ser estendido ao cálculo de migração de massa (vapor d'água) nas paredes, pois o método Laplace-Gaussiana permite o conhecimento do campo interno de temperaturas.

Em termos de erro conclui-se que o método é estável e preciso o suficiente para a grande maioria das aplicações de Engenharia, com ganhos no esforço computacional.

REFERÊNCIAS

- Ackerman, M. e Dale, J.D., 1987, "Measurement and prediction of insulated and uninsulated basement wall heat losses in a heating climate", ASHRAE Transactions, vol. 93, part 1.
- ASHRAE, 1993, "Handbook of Fundamentals", ASHRAE, pp.26.17-26.28.
- Beyer, P.O. e Vilhena, M.T.M.B., 1994, "Fluxo de Calor Transiente em Paredes Externas Multicamadas", V Encontro Nacional de Ciências Térmicas, São Paulo, Brasil.
- Beyer, P.O., Vielmo, H.A. e Vilhena, M.T.M.B., 1995, "Estudo Comparativo entre Soluções para a Transferência de Calor em Paredes Multicamadas", XIII Congresso Brasileiro e II Ibero Americano de Engenharia Mecânica, Belo Horizonte, MG.
- Blackwell, B.F., 1990, "Temperature profile in semi-infinite body with exponential source and convective boundary condition" ASME Journal of Heat Transfer, vol. 112.
- Bouzidi, M., 1991, "Diffusion thermique non-stationnaire dans des milieux multicouches et problème aux valeurs propres-1. Une paroi unique multicouches", Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 34, No. 4/5.
- Burch, D.M., 1992, "Dynamic evaluation of thermal bridges in a typical office building", ASHRAE Trans., vol. 98, part 1.
- Burch, D.M., Licita, B.A. e Zarr, R.R., 1990, "A comparison of two test methods for determining transfer function coefficients for a wall using a calibrated hot box" ASME Journal of Heat Transfer, vol. 112.
- Burch, D.M. e Thomas, W.C., 1992, "An analysis of moisture accumulation in a wood-frame wall subject to winter climate", Thermal Performance of the Exterior Envelopes of Buildings V, Proceedings of ASHRAE/DOE/BTECC/CIBSE Conference, Florida.
- Burrow, P. e Weigand, B., 1990, "One-dimensional heat conduction in a semi-infinite solid with the surface temperature a harmonic function of time: a simple approximate solution for the transient behavior", ASME Journal of Heat Transfer, vol. 112.

- Caulk, D.A., 1990, "A method for analyzing heat conduction with high-frequency periodic boundary conditions", *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 112.
- Chang, K.C. e Payne, U.J., 1991, "Analytical solution for heat conduction in a two-material-layer slab with linearly temperature dependent conductivity", *ASME J. of Heat Transf.*, vol. 113.
- Chen, H-T e Chang, S-M., 1990, "Application of the hybrid method to inverse heat conduction problems", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, No. 4.
- Chen, H-T. e Lin, J-Y., 1993, "Numerical analysis for hyperbolic heat conduction", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, No. 11.
- Chorneyko, D.S. e Besant, R.W., 1989, "Thermal modeling of a basement with insulated and uninsulated floor", *Thermal performance of the exterior envelopes of buildings IV. - Proceedings of the ASHRAE/DOE/BTECC/CIBSE Conference*, Orlando.
- Choudhury, S.R. e Jaluria, Y., 1994, "Analytical solution for the transient temperature distribution in a moving rod or plate of finite length with surface heat transfer", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 37, No. 8.
- Claridge, D.E., 1992, "A thermal mass treatment for the TC 4.7 simplified energy analysis procedure", *ASHRAE Transactions*, vol. 98, part 1.
- Eunilkov, D.H., 1988, "Basis and formalism of room weighting factors - thermal discrete transfer functions of a single zone model", *ASHRAE Transactions*, vol. 94, part 2.
- Grandjean, B.P.A. e Thibault, J., 1991, "A new criterion for assuming negligible internal thermal resistance in transient heat conduction problem", *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 113.
- Haghighat, F. e Liang, H., 1992, "Determination of transient heat conduction through building envelopes - a review", *ASHRAE Transactions*, vol. 98, part 1.
- Haji-Sheikh, A. e Beck, J.V., 1990, "Green's function partitioning in Galerkin-based integral solution of the diffusion equation", *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 112.
- Heydarian, M. e Mullineaux, N., 1981, "Solution of Parabolic Partial Differential Equations", *Appl. Math. Mod.*, 5, pp.448-449.
- Hornbeck, R. W., 1975, "Numerical Methods", Quantum Publishers, New York.
- Hou, S., Cogley, A.C. e Sharma, A., 1993, "A discrete element method for composite media: one-dimensional heat conduction", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, No. 12.
- Irving, A.D., 1992, "Dynamic response factor estimation: A point algebraic method", *ASHRAE Transactions*, Vol. 98, Part 2.
- Karagiozis, A.N. e Kumaran, M.K., 1993, "Computer model calculations on the performance of vapor barriers in canadian residential buildings", *ASHRAE Transactions*, Vol. 99, Part 2.
- Kolev, S.D. e Pungor, E., 1987, "Numerical solution of hydraulic models based on the axially dispersed plug flow model by Laplace transforms", *Analytica Chimica Acta*, 194.
- Kolev, S.D. e Van der Linden, W.E., 1993, "Application of Laplace transforms for the solution of transient mass and heat transfer problems in flow systems", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, No. 1.
- Krarti, M., Claridge, D.E. e Kreider, J.F., 1994, "A foundation heat transfer algorithm for detailed building energy programs", *ASHRAE Transactions*, Vol.100, Part 2.
- Ku, J.Y. e Chan, S.H., 1990, "A generalized Laplace transform technique for phase-change problems", *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 112.
- Mitalas, G.P., 1972, "Transfer Function Method of Calculating Cooling Loads, Heat Extraction Rate and Space Temperature", *ASHRAE Journal*, 14(12).
- Ojanen, T. e Kohonen, R., 1989, "Hygrothermal influence of air convection in wall structures", *Thermal performance of the exterior envelopes of buildings IV. - Proceedings of the ASHRAE /DOE/BTECC/CIBSE Conference*, Orlando.
- Seem, J.E., Klein, S.A., Beckman, W.A. e Mitchell, J.W., 1990, "Model reduction of transfer functions using a dominant root method", *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 112.
- Shapiro, A.P. e Motakef, S., 1990, "Unsteady heat and mass transfer with phase change in porous slabs: analytical solutions and experimental results", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, No. 1.
- Spitler, J.D. e McQuiston, F.C., 1993, "Development of a revised Cooling and Heating Load Calculation Manual", *ASHRAE Transactions*, Vol. 99, Part 1.
- Spolek, G.A., Oosterhout, G.R. e Apfel, R.I., 1985, "Transient heat and mass transfer in walls", *Thermal performance of the exterior envelopes of buildings III. - Proceedings of the ASHRAE / DOE/BTECC Conference*, Florida.
- Standaert, P., 1985, "Thermal bridges. A two-dimensional and three-dimensional transient thermal analysis", *Thermal performance of the exterior envelopes of buildings III. - Proceedings of the ASHRAE/DOE/BTECC Conference*, Florida.
- Stroud, A.H. e Secrest, D., 1966, "Gaussian Quadrature Formulas", Prentice Hall, New Jersey.
- Tsai, Y.M. e Crane, R.A., 1992, "An analytical solution of a one-dimensional thermal contact conductance problem with one heat flux and one insulated boundary condition" *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 114.
- Vujanovic, B.D. e Jones, S.E., 1990, "Approximate solutions of canonical heat conduction equations" *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 112.
- Wei, P.S. e Shian, M.D., 1993, "Three-dimensional analytical temperature field around the welding cavity produced by a moving distributed high-intensity beam", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.115.
- Xin, R.C. e Tao, W.Q., 1994, "Analytical solution for transient heat conduction in two semi-infinite bodies in contact" *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 116.
- Zedan M.F. e Mujahid, A.M., 1993, "Laplace transform solutions for heat transfer in composite walls with periodic boundary conditions", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.115.

ABSTRACT

In this work, the Laplace transform technique with numerical inversion is used to develop solutions for the problem of one-dimensional heat conduction in multilayered walls. In this method, the partial derivatives with respect to time variable are removed from differential equation by the application of the Laplace transform, the resulting system of ordinary differential equations are solved and the temperature transform is inverted by numerical method. This method is based on Gaussian Quadrature, a method for the approximation of integrals. The advantage of the Laplace/Gaussian method is that there is no need to step in time or position. The solution for any value of t or x can be found immediately. To evaluate the method, an error analysis was made.



ESTUDO COMPARATIVO DE PROCEDIMENTOS HEURÍSTICOS PARA A SÍNTESE DE REDES DE TROCADORES DE CALOR

Oliveira, S.G.; Mendonça, E.S.; Pessoa, F.L.P.; Mach Queiroz, E.

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal do Rio de Janeiro
21945-970 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil



RESUMO

Neste trabalho é apresentado um estudo comparativo entre dois métodos heurísticos de síntese de redes de trocadores de calor, Rudd et al (1973) e Ponton & Donaldson (1974). Algoritmos computacionais que realizam simultaneamente a síntese com ou sem o projeto das unidades foram elaborados. É proposta uma modificação no procedimento de síntese sem projeto: definição de um valor máximo para a interseção de temperaturas nos equipamentos. A comparação é realizada nos resultados obtidos em um exemplo com dez correntes de processo.

INTRODUÇÃO

A recuperação de calor em unidades de processamento químico vem sendo estudada há muito tempo, com o propósito de reduzir o consumo de utilidades. Este objetivo é viabilizado através de um conjunto de trocadores de calor especialmente localizados na planta de processamento (rede de trocadores de calor). A definição desta rede é um problema de síntese, que tem como objetivo a rede ótima, definida em termos de um custo global mínimo.

Uma das formas propostas para resolver o problema da síntese foi a utilização de métodos heurísticos, que aplicam regras práticas na montagem da rede. Este procedimento não passa pela dificuldade de uma análise envolvendo um grande número de redes potenciais, porém não garantem que a solução seja a rede ótima.

Utilizando argumentos termodinâmicos, um método semi-heurístico (evolutivo) foi desenvolvido, denominado Tecnologia do Ponto de Estrangulamento Energético ("Pinch Technology"), que monta redes tomando como referencial a definição de metas a serem atingidas (número mínimo de unidades e consumo mínimo de utilidades). Paralelamente, vários trabalhos foram desenvolvidos utilizando formulação matemática (método algorítmico), ou seja, técnicas de programação linear e não linear inteiras mistas que, apesar da complexidade computacional envolvida, é a única que garante a obtenção da rede ótima.

Nos procedimentos tradicionais de síntese, o coeficiente global de transferência de calor nos trocadores é usualmente considerado constante, quando da determinação de suas áreas. Este fato é responsável pela incerteza das áreas utilizadas nos cálculos de otimização e, posteriormente, na etapa de projeto detalhado dos trocadores de calor, pela obtenção de unidades com áreas marcadamente diferentes das estimadas na síntese. Com o objetivo de evitar estas grandes discrepâncias, Jegede & Polley (1992) utilizam um algoritmo que realiza o projeto dos equipamentos baseado no prévio conhecimento do diferencial de pressão em cada corrente através de correlações termofluidodinâmicas, que relacionam a queda de pressão com o coeficiente de transferência de calor. Obtém-se, assim, uma maior precisão no cálculo das áreas de troca térmica ao longo da síntese, ainda durante o processo de otimização.

Nesta mesma linha, trabalhos mais recentes (Robert, 1993, Ravagnani, 1994 e Oliveira, 1995) incluem na síntese de redes de

trocadores de calor o projeto dos mesmos que, considerado ainda nesta fase, evita a proposta de soluções envolvendo trocadores de calor com características de construção inviáveis.

Uma forma alternativa à realização simultânea do projeto é efetuar a síntese, incorporando como restrição adicional, uma prevenção da interseção de temperaturas (Mendonça et al, 1994). Esta restrição pode ser relaxada através da adoção de uma interseção de temperaturas pré-estabelecida. Este procedimento tem como característica a redução do esforço computacional, em relação ao procedimento com projeto, proposto anteriormente.

O objetivo deste trabalho é comparar dois métodos heurísticos de síntese, Rudd et al (1973) e Ponton & Donaldson (1974), com e sem a realização simultânea do projeto das unidades. Além disso, incorpora uma restrição para a interseção de temperaturas, no procedimento sem projeto (síntese tradicional), com a intenção de aproximar esses resultados daqueles obtidos pelo procedimento com projeto. O exemplo 10SPI, proposto na literatura por Pho & Lapidus (1973), é utilizado como suporte para esta comparação.

MÉTODOS HEURÍSTICOS

Têm por objetivo a geração de uma rede de trocadores de calor que viabilize as trocas térmicas especificadas pelo processo, estando este resultado balizado por um ponto ótimo relacionado ao custo mínimo de equipamentos e utilidades requeridas. A troca térmica especificada pelo processo é sintetizada em uma tabela onde são listadas todas as correntes com as respectivas temperaturas de entrada e saída.

Heurística de Rudd et al (1973). Esta heurística seleciona as possíveis trocas de calor, elegendo prioritariamente as correntes quentes e frias que possuam as maiores temperaturas de entrada. Após a seleção das correntes, supondo-se a configuração de escoamento contra-corrente, determina-se a carga térmica da troca, balizada pela menor carga para atingir a meta entre os fluidos quente e frio e por um valor mínimo do diferencial de temperatura (ΔT_{min}) nas extremidades do equipamento. O valor do ΔT_{min} é arbitrado no início do procedimento de síntese, que possui o seu resultado a ele relacionado.

Heurística de Ponton & Donaldson (1974). Este método escolhe as correntes que serão acopladas de acordo com a seguinte regra: corrente quente de maior temperatura de entrada

com a corrente fria de maior temperatura de saída. Após a identificação do par, verifica-se o ΔT_{min} nas extremidades do trocador e calcula-se a carga térmica do equipamento, através de um procedimento análogo ao utilizado no método anterior.

A síntese tradicional tem como característica considerar os coeficientes de transferência de calor especificados constantes e utilizar somente trocadores de calor contra-corrente, para o cálculo da área total da rede.

PROJETO DOS TROCADORES DE CALOR

O projeto de trocadores de calor tem como ponto de partida o conhecimento das condições especificadas pelo processo e das propriedades físicas dos fluidos envolvidos. A partir destes dados, há várias formas de abordagem, todas ditadas pela natureza das relações termodinâmicas que descrevem os escoamentos no interior do equipamento. Neste trabalho, foi escolhida uma abordagem que tem por base o compromisso que existe entre os valores do coeficiente de transferência de calor (h) e a perda de carga (Δp) em escoamentos através de dutos ou regiões de seção reta fechada (escoamentos internos). Este procedimento permite, a partir da especificação do Δp em cada fluido, a estimativa das principais características geométricas do trocador de calor e garante, ainda, uma utilização da energia disponível para o escoamento na promoção de condições favoráveis à transferência de calor.

Esta filosofia de projeto foi utilizada por Jegede & Polley (1992) na definição da meta de área mínima de troca térmica na síntese de redes de trocadores de calor pela abordagem proposta pela Tecnologia do Ponto de Estrangulamento Energético.

Oliveira (1995), utilizando este procedimento de projeto, analisa os resultados da síntese através dos dois métodos heurísticos citados, executando simultaneamente o projeto das unidades. Isto elimina a possibilidade de que trocadores de calor inviáveis venham a ser gerados. Neste mesmo trabalho é também proposta uma adaptação desta metodologia de projeto para equipamentos que envolvam a mudança de fase de um dos fluidos, considerado puro, objetivando principalmente o projeto dos aquecedores.

Projeto dos Equipamentos sem Mudança de Fase. A primeira configuração testada é sempre a de um trocador multitubular com única passagem no casco e tubos (CT I-1), em contra-corrente, independentemente de haver interseção de temperaturas. Após a definição do posicionamento dos fluidos, que tem como critério a passagem do fluido com maior resistência de depósito (R_f) pelo lado dos tubos, a partir dos Δp das correntes, calcula-se os coeficientes de transferência de calor (h) para o lado dos tubos e para o lado do casco.

O desenvolvimento das relações entre Δp e h nos dois lados dos trocadores de calor é apresentado a seguir. Maiores detalhes estão disponíveis em Jegede & Polley (1992).

Desprezando a perda de carga nos cabeçotes, a queda de pressão no escoamento por dentro dos tubos pode ser estimada por:

$$\Delta p_t = 2 \cdot f \cdot (l / Di) \cdot u^2 \cdot \rho \cdot n_{pt} \quad (1)$$

onde u é a velocidade média do escoamento nos tubos, ρ é a densidade do fluido, n_{pt} o número de passagens nos tubos, l o comprimento dos tubos, Di o diâmetro interno dos tubos e f o fator de atrito de Fanning, que para escoamento turbulento ($Re \geq 2 \times 10^4$) em tubos lisos é determinado por:

$$f = 0,046 \cdot Re^{-0,2} \quad (2)$$

Mantendo a hipótese de escoamento turbulento na mesma faixa de Re , utiliza-se a equação de Dittus-Boelter para calcular o coeficiente de transferência de calor:

$$ht = 0,023 \cdot (k / Di) \cdot Pr^{1/3} \cdot Re^{0,8} \quad (3)$$

onde k é a condutividade térmica do fluido, Pr e Re os números de Prandtl e Reynolds.

Através de uma manipulação algébrica envolvendo (1), (2) e (3), chega-se a relação entre Δp e h :

$$\Delta p_t = K_{pt} \cdot A \cdot ht^{3,5} \quad (4)$$

onde A é a área de troca térmica e K_{pt} é uma constante, que envolve propriedades físicas do fluido e parâmetros geométricos do equipamento:

$$K_{pt} = \frac{12464,66 \cdot Di^{1,5} \cdot \mu^{3,0}}{(Vi \cdot Do) \cdot k^{3,5} \cdot \rho^2 \cdot Pr^{1,17}} \quad (5)$$

sendo μ a viscosidade do fluido, Do o diâmetro externo dos tubos e Vi a vazão volumétrica do fluido que escoar pelos tubos.

O equacionamento do escoamento através do casco está baseado nas correlações de queda de pressão e coeficiente de transferência de calor propostas por Kern (1950). As chicanas são segmentadas simples, com corte de 25% (valor padrão), e a hipótese de regime turbulento ($Re > 100$) é adotada também para o escoamento através do casco. Para a queda de pressão tem-se:

$$\Delta p_c = f \cdot D_s \cdot (Nb + 1) \cdot (Re \cdot \mu)^2 / (2 \cdot \rho \cdot De^3) \quad (6)$$

onde Nb é o número de chicanas, De o diâmetro equivalente, e D_s o diâmetro do casco.

O fator de atrito f e o diâmetro equivalente considerado para o cálculo com arranjo triangular são definidos como (Kern (1950)):

$$f = 1,79 \cdot Re^{-0,19} \quad (7)$$

$$De = (2 \cdot \sqrt{3} \cdot Pt^2 - \pi \cdot Do^2) / \pi \cdot Do \quad (8)$$

sendo Pt o espaçamento entre os tubos.

O coeficiente de transferência de calor para o lado do casco é estimado por (Kern (1950)):

$$h_c = 0,36 \cdot (k / De) \cdot Pr^{1/3} \cdot (\rho \cdot De / \mu)^{0,55} \cdot v^{0,55} \quad (9)$$

onde v é a velocidade média do escoamento no casco.

Combinando as equações (6), (7), (8) e (9), chega-se a relação entre Δp e h :

$$\Delta p_c = K_{pc} \cdot A \cdot hc^{5,1} \quad (10)$$

onde a constante K_{pc} reúne as propriedades físicas do fluido e parâmetros geométricos:

$$K_{pc} = \frac{563,7 \cdot Pt \cdot (Pt - Do) \cdot De^{1,11}}{(\pi^2 \cdot Do \cdot Vo) \cdot Pr^{1,7} \cdot \rho^2 \cdot \mu^{2,62} \cdot k^{5,1}} \quad (11)$$

onde Vo é a vazão volumétrica de fluido através do casco.

As equações (4) e (10), são complementadas pela equação da carga térmica do trocador:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ef} \quad (12)$$

sendo U o coeficiente global e ΔT_{ef} o diferencial de temperatura efetivo entre os fluidos quente e frio.

Definidas as relações, a partir do conhecimento das propriedades físicas dos fluidos e da especificação de parâmetros geométricos básicos: diâmetro interno e externo dos tubos, espaçamento entre tubos, determina-se de forma sequencial o coeficiente global U , a área de troca térmica A e os diversos parâmetros que a caracterizam: o número de tubos, o comprimento dos tubos e o diâmetro do casco do equipamento, através de expressões específicas. Pode-se, então, estimar a relação entre o comprimento do trocador e o diâmetro do casco (L/Ds), que deverá possuir valores entre 4 e 15. Caso isto não ocorra, o algoritmo passa a testar, de forma progressiva, a possibilidade de múltiplas passagens, em números pares, através dos tubos. Maiores detalhes sobre este algoritmo podem ser encontrados em Oliveira (1995).

Projeto dos Aquecedores. No caso dos aquecedores o fluido de serviço mais comum para o aquecimento dos fluidos de processo é o vapor d'água saturado, e o procedimento apresentado anteriormente se restringe a fluidos que não mudam de fase. Logo uma adaptação deste procedimento para fluidos que mudam de fase foi necessária.

Como hipótese foi considerado que o fluido de serviço, que muda de fase, escoará sempre pelo lado do casco, portanto as relações desenvolvidas para o lado dos tubos se mantêm as mesmas. No lado do casco considera-se a ocorrência de condensação de fluido puro sobre matriz tubular na posição horizontal, com velocidade de escoamento desprezível. Desta forma (Incropera & DeWitt (1990)):

$$hc = 0,725 \cdot \left(\frac{\rho_l \cdot (\rho_l - \rho_v) \cdot g \cdot \lambda \cdot k_l^3}{\mu_f \cdot \sqrt{N} \cdot D_o \cdot (T_v - T_w)} \right)^{1/4} \quad (13)$$

onde hc é o coeficiente de transferência de calor, g é a aceleração da gravidade assumida $9,81 \text{ m/s}^2$, λ calor latente de condensação, T_v temperatura do vapor e T_w temperatura da parede.

Combinando a equação (13) com as relações para o lado dos tubos, e para a carga térmica do equipamento, constrói-se um algoritmo para o projeto dos aquecedores de acordo com as condições do processo. Neste caso, há a necessidade de dois processos iterativos, um relacionado a N e outro para a determinação de T_w . Obtida a convergência, ficam determinadas as características geométricas básicas do equipamento (detalhes em Oliveira, 1995).

SÍNTESE INCORPORANDO A PREVENÇÃO DA INTERSEÇÃO DE TEMPERATURAS

A interseção de temperaturas (*temperature crossing* - ΔT_m) em um trocador existe quando a temperatura de saída da corrente, fria é maior do que a temperatura de saída da corrente quente. A tolerância à existência de interseção de temperaturas durante os procedimentos de síntese tradicionais é função da hipótese de escoamento contra-corrente puro. Com objetivo de evitar este fato que, em última análise, pode gerar na síntese tradicional trocas cujos equipamentos apresentem projeto inviável ou área muito superior a prevista, e ao mesmo tempo criar um

procedimento alternativo à realização simultânea do projeto das unidades, propõe-se a incorporação aos métodos heurísticos de síntese de mais uma restrição: as trocas recomendadas não devem apresentar uma interseção superior a um determinado limite (ΔT_m).

Esta nova restrição implica na necessidade de se limitar, ao longo da síntese, a temperatura de saída da corrente fria a um valor máximo de $T_{sq} + \Delta T_m$.

O procedimento para incorporar esta restrição, desenvolvido por Robert (1993) e Mendonça et al (1994), se caracteriza por definir uma chamada carga térmica no ponto de interseção (Q_m), que é determinada supondo-se que os fluidos quente e frio tenham suas temperaturas de saída implicando na presença da interseção máxima estabelecida (ΔT_m).

Como as heurísticas utilizadas seguem parâmetros de escolha distintos, o procedimento para se adicionar esta nova restrição deve ser adaptado a cada regra.

Procedimento para regra de Rudd et al. A carga térmica de interseção é calculada conforme sua definição:

$$Q_m = \frac{\dot{m}_q \cdot C_{p_q} \cdot (T_{eq} - T_{ef} + \Delta T_m)}{1 + (\dot{m}_q \cdot C_{p_q} / (\dot{m}_f \cdot C_{p_f}))} \quad (14)$$

que implica nas seguintes temperaturas de saída:

$$T_{sq_m} = T_{eq} - Q_m / (\dot{m}_q \cdot C_{p_q}) \quad \text{e} \quad (15)$$

$$T_{sf_m} = T_{sq_m} - \Delta T_m \quad (16)$$

Com a carga térmica de interseção e as respectivas temperaturas de saída há três possibilidades:

Caso 1: A temperatura de saída do fluido frio é menor do que T_{sf_m} e a temperatura de saída do fluido quente é maior do que T_{sq_m} , quando a carga térmica do equipamento e a temperatura de saída do fluido quente são determinadas por:

$$Q = \dot{m}_f \cdot C_{p_f} \cdot (T_{sf} - T_{ef}) \quad \text{e} \quad (17)$$

$$T_{sq} = T_{eq} - Q / (\dot{m}_q \cdot C_{p_q}) \quad (18)$$

Caso 2: A temperatura de saída do fluido quente é maior do que T_{sq_m} e a temperatura de saída do fluido frio é menor do que T_{sf_m} , neste caso calcula-se Q e T_{sf} por:

$$Q = \dot{m}_q \cdot C_{p_q} \cdot (T_{eq} - T_{sq}) \quad \text{e} \quad (19)$$

$$T_{sf} = T_{ef} + Q / (\dot{m}_f \cdot C_{p_f}) \quad (20)$$

Caso 3: As temperaturas de saída das correntes quente e fria de interseção são respectivamente maior e menor do que as temperaturas de saída das correntes. Logo, as temperaturas do trocador assumem as temperaturas de interseção, o mesmo acontecendo para a carga térmica.

Procedimento de Ponton & Donaldson. Quando a diferença entre as temperaturas de saída (metas) da corrente quente e da corrente fria for maior do que a ΔT_m , a temperatura de saída quente deve ser alterada pela expressão:

$$T_{sq} = T_{sf} + \Delta T_m \quad (21)$$

Em seguida determina-se a carga térmica do equipamento:

$$Q = \dot{m}_q \cdot C_{p_q} \cdot (T_{eq} - T_{sq}) \quad (22)$$

e T_{sf} sai do balanço térmico. Caso esta última temperatura seja superior a temperatura meta da corrente fria, redefine-se a carga térmica do equipamento, agora com a certeza de não haver violação do ΔT_{in} :

$$Q = \dot{m}_f \cdot C_{p_f} \cdot (T_{sf} - T_{ef}) \quad (23)$$

sendo também necessário um novo cálculo para a temperatura de saída do fluido quente, feito através do balanço térmico.

ESTUDO DE CASO

Para demonstrar os resultados dos procedimentos propostos anteriormente, foi utilizado um exemplo muito estudado na literatura, 10SP1, que possui 10 correntes de processo, uma utilidade quente e uma utilidade fria. As utilidades usadas foram vapor d'água saturado e água de resfriamento.

A tabela 1 mostra as temperaturas de entrada e saída (metas) das correntes de processo e das utilidades, vazões e calores específicos, que definem o chamado problema 10SP1.

Tabela 1 - Dados Originais do Problema 10SP1

Fluido	Te (°C)	Ts (°C)	m ^{**} (Kg/s)	Cp (J/Kg.K) λ* (J/Kg)
F1	60	160	3,25	2250
F2	115,16	221,7	2,36	2471
F3	37,8	221	3,47	2337
F4	82,2	176,7	7,10	2337
F5	93,3	204,4	5,50	2427
H1	160	93,3	3,61	2337
H2	249	138	4,10	2471
H3	227	65,6	5,84	2427
H4	271	149	4,88	2471
H5	199	65,6	7,15	2381
UQ1	252,2	252,2	---	1730000*
UF1	30	45	---	4186

** estimada a partir do mCp original, com Cp arbitrado

Para aplicar os procedimentos que foram apresentados anteriormente, se faz necessário o conhecimento das seguintes propriedades termo-físicas: densidade, condutividade térmica e viscosidade, além da resistência de depósito dos fluidos envolvidos na rede de trocadores de calor. Os valores utilizados são listados por Oliveira (1995), tendo sido estimadas supondo-se que as correntes de processo fossem óleo de motor.

A análise de custos foi efetuada com base em custos anualizados, considerando-se: 5,9 US\$/ton de vapor; 0,01 US\$/ton de água de resfriamento e taxa de retorno de 15% em um período de 13 anos. A equação para o custo dos equipamentos (CF, em US\$) tem a forma tradicional (ver detalhes em Oliveira (1995):

$$CF = 952,22 \cdot A^{0,65} \quad , \text{ com } [A] = m^2 \quad (24)$$

Com objetivo de não incluir mais uma variável para análise, todos os resultados apresentados a seguir foram obtidos arbitrando-se ΔT_{min} igual a 10°C.

Resultados do procedimento com projeto dos equipamentos.

Nas tabelas 2 e 3 são apresentados os resultados mais relevantes da síntese com projeto das unidades, utilizando-se as heurísticas de Rudd et al. e de Ponton & Donaldson, respectivamente. Cabe aqui citar, que quando há a indicação de mais de um casco para uma determinada troca, estes cascos são tratados como trocadores independentes e o procedimento de determinação do seu número tem como critério a obtenção de áreas iguais (Oliveira, 1995).

Tabela 2 - Síntese com projeto - Regra de Rudd et al.

troca	par de fluidos	cascos	n _{pt}	N	A (m ²)	l (m)
1	F2-Q4	1	8	216	57,35	4,42
2	F5-Q2	2	8	198	61,08	5,16
3	F5-Q3	2	6	163	40,55	4,16
4	F4-Q4	1	8	232	69,22	5,00
5	F4-Q3	3	8	263	69,69	4,42
6	F1-Q5	1	8	343	98,29	4,79
7	F3-Q1	2	8	152	33,19	3,65
8	F3-Q5	2	6	208	54,07	4,35
9	UF1-Q3	1	8	263	69,46	4,41
10	UF1-Q5	1	6	240	81,25	5,65
11	UQ1-F3	1	8	156	38,16	4,09

Tabela 3 - Síntese com projeto - Regra de Ponton & Donaldson

troca	par de fluidos	cascos	n _{pt}	N	A (m ²)	l (m)
1	F2-Q4	1	8	216	57,35	4,43
2	F3-Q2	3	10	258	68,36	4,43
3	F5-Q3	4	8	310	109,72	5,92
4	F4-Q4	2	8	255	90,31	5,93
5	F1-Q5	1	8	343	98,29	4,79
6	F4-Q1	2	10	268	86,90	5,42
7	F4-Q5	1	6	159	25,38	2,67
8	F3-Q5	1	6	165	28,27	2,86
9	UF1-Q3	1	6	178	52,33	4,91
10	UF1-Q5	1	6	221	64,36	4,86
11	UF1-Q1	1	6	63	6,30	1,67

A rede gerada através da heurística de Rudd et al. leva a um custo total anualizado de US\$152875,78, com um custo anualizado de utilidades de US\$77368,00. A área total de troca térmica é de 1001,71m², envolvendo 17 unidades. Por outro lado, a regra de Ponton & Donaldson leva a uma rede com o número de unidades igual a 18 e área total de 1335,37m². Seu custo total anualizado é de US\$99814,23, com um custo anualizado de utilidades de US\$8553,00. Cabe aqui ressaltar que a grande diferença de custo total ocorre principalmente em função da não necessidade de consumo de utilidade quente (mais cara) na heurística de Ponton & Donaldson. Note que se a comparação fosse efetuada com base na área total de troca térmica, o pior resultado seria de Ponton & Donaldson. Este fato mostra a importância de se utilizar como critério de avaliação o custo total.

Resultados com procedimento de interseção de temperaturas.

Neste item são apresentados resultados obtidos pelo procedimento proposto de adição da restrição de interseção de temperatura às regras heurísticas tradicionais.

Nas tabelas 4 e 5 são mostrados os resultados mantendo o ΔT_{in} livre, ou seja, a síntese tradicional. Uma análise das

interseções nos diversos equipamento propostos nestas redes mostra que na tabela 4, onde se utilizou a regra de Rudd et al., o seu valor máximo é de 40°C, enquanto que na tabela 5, síntese com a regra de Ponton & Donaldson, este valor é de 83°C.

Na tabela 4 a área total dos equipamentos é de 912,21m² (total de 11 unidades) e o custo anualizado com utilidades representa US\$77367,57, implicando em um custo total anualizado de US\$137607,40. Para a rede da tabela 5, a área total dos 11 equipamentos é de 1055,42m², o custo total anualizado é de US\$70839,91, com as utilidades representadas por uma parcela de US\$8553,00.

Comparando o desempenho das duas regras heurísticas, com e sem a realização do projeto simultâneo, elas mostram a mesma tendência de maiores valores totais para o custo e a área de troca térmica. Este fato é explicado pelo aparecimento de múltiplas passagens nos tubos e no casco, que contribuem para a diminuição do diferencial efetivo de troca térmica. Os valores do procedimento que realiza simultaneamente a síntese são bem mais realistas, pois estão baseados em unidades viáveis de serem construídas.

Cabe aqui ressaltar que a proximidade obtida entre os resultados dos dois procedimentos pode não ser uma norma geral, pois aqui, os coeficientes globais de transferência de calor utilizados na síntese sem projeto foram determinados com base em resultados médios para os coeficientes obtidos no projeto.

Tabela 4 - Síntese tradicional - Regra de Rudd et al

trocador	par de fluidos	área (m ²)	custo (US\$/ano)
1	F2-Q4	46,41	3844,95
2	F5-Q2	104,49	6516,00
3	F5-Q3	85,15	5704,17
4	F4-Q4	61,57	4620,31
5	F4-Q3	195,86	9802,56
6	F1-Q5	92,22	6007,71
7	F3-Q1	61,97	4639,81
8	F3-Q5	102,20	6422,69
9	UF1-Q3	60,45	10236,06
10	UF1-Q5	63,01	10412,81
11	UQ1-F3	38,86	69400,34

Tabela 5 - Síntese tradicional - Regra de Ponton & Donaldson

trocador	par de fluidos	área (m ²)	custo (US\$/ano)
1	F2-Q4	46,41	3844,95
2	F3-Q2	163,22	8707,05
3	F5-Q3	320,40	13498,03
4	F4-Q4	144,63	8048,96
5	F1-Q5	92,22	6007,71
6	F4-Q1	120,48	7147,85
7	F4-Q5	29,12	2839,90
8	F3-Q5	31,78	3005,87
9	UF1-Q3	48,12	7695,92
10	UF1-Q5	52,33	8299,47
11	UF1-Q1	6,71	1744,19

As tabelas 6 e 7 mostram os resultados com a nova restrição, utilizando-se como ΔT_m o valor de 10°C. Na tabela 6 a soma total das áreas dos trocadores é de 909,73m² (17 unidades), o custo total anualizado associado é de US\$148991,50, enquanto o custo anualizado com utilidades é de US\$82153,18. Na tabela 7 a área total é de 999,95m² (17 trocadores), o custo total anualizado da

rede é de US\$81301,69 e o custo anualizado com utilidade de US\$8553,00.

Uma comparação com as respectivas tabelas 4 e 5, resultantes da síntese tradicional, mostra as modificações geradas. Apesar de haver uma área menor, são mais unidades, pois a restrição não permite a complementação de algumas trocas propostas na síntese tradicional, implicando porém em diferenças efetivas de temperaturas maiores nas diversas unidades. Em termos do custo total, estas novas redes apresentam valores intermediários entre os da síntese tradicional e os da síntese com projeto.

Tabela 6 - Resultados da síntese com interseção de temperatura máxima de 10°C - Regra de Rudd et al

trocador	par de fluidos	área (m ²)	custo (US\$/ano)
1	F2-Q4	46,41	3844,95
2	F5-Q2	70,00	5022,11
3	F5-Q3	105,64	6562,31
4	F5-Q4	11,22	1527,53
5	F4-Q4	59,50	4518,81
6	F4-Q5	127,57	7418,23
7	F4-Q3	38,24	3389,86
8	F1-Q3	96,83	6201,05
9	F1-Q5	9,46	1367,76
10	F3-Q5	81,96	5564,27
11	F3-Q1	92,99	6040,31
12	UF1-Q2	4,63	1655,12
13	UF1-Q1	15,35	3679,16
14	UF1-Q3	55,71	9197,82
15	UF1-Q5	52,17	8268,96
16	UQ1-F1	4,14	8092,97
17	UQ1-F3	37,93	66640,32

Tabela 7 - Resultados da síntese com interseção de temperatura máxima de 10°C - Regra de Ponton & Donaldson

trocador	par de fluidos	área (m ²)	custo (US\$/ano)
1	F2-Q4	46,41	3844,95
2	F3-Q2	69,21	4985,17
3	F5-Q3	108,73	6686,64
4	F4-Q4	99,56	6314,43
5	F5-Q2	79,30	5446,17
6	F3-Q5	85,49	5718,84
7	F1-Q3	97,49	6228,70
8	F5-Q4	32,18	3030,62
9	F4-Q5	131,26	7557,29
10	F5-Q1	40,69	3529,85
11	F4-Q2	22,80	2422,51
12	F3-Q3	47,96	3927,66
13	F1-Q5	14,00	1763,96
14	F4-Q1	17,76	2059,26
15	UF1-Q5	54,98	8795,41
16	UF1-Q3	44,26	6996,69
17	UF1-Q1	7,86	1993,53

As tabelas 8 e 9 mostram os resultados com ΔT_m arbitrado igual a 50°C. Conforme esperado, em função da interseção máxima na síntese tradicional ter sido menor do que o valor agora arbitrado, os valores na tabela 8 são idênticos aos da tabela 4. O mesmo não ocorre para o método de Ponton & Donaldson, onde, para a rede da tabela 9, a soma total das áreas dos trocadores é de 1069,02m² (13 unidades), o custo total

anualizado associado é de US\$77065,46, enquanto o custo anualizado com utilidades é de US\$8553,00.

Tabela 8 - Resultados da síntese com interseção máxima de temperaturas igual a 50°C - Regra de Rudd et al.

trocador	par de fluidos	área (m ²)	custo (US\$/ano)
1	F2-Q4	46,41	3844,95
2	F5-Q2	104,49	6516,00
3	F5-Q3	85,15	5704,17
4	F4-Q4	61,57	4620,31
5	F4-Q3	195,86	9802,56
6	F1-Q5	92,22	6007,71
7	F3-Q1	61,97	4639,81
8	F3-Q5	102,20	6422,69
9	UF1-Q3	60,45	10236,06
10	UF1-Q5	63,01	10412,81
11	UQ1-F3	38,86	69400,34

Tabela 9 - Resultados da síntese com interseção máxima de temperaturas igual a 50°C - Regra de Ponton & Donaldson

trocador	par de fluidos	área (m ²)	custo (US\$/ano)
1	F2-Q4	46,41	3844,95
2	F3-Q2	125,24	7330,15
3	F5-Q3	230,59	10889,70
4	F4-Q4	144,63	8048,96
5	F1-Q5	92,22	6007,71
6	F5-Q2	44,77	3755,81
7	F4-Q1	120,48	7147,85
8	F3-Q5	79,91	5473,38
9	F4-Q3	31,81	3007,78
10	UF1-Q3	53,44	8729,94
11	F5-Q5	46,58	3853,86
12	UF1-Q1	6,71	1744,19
13	UF1-Q5	46,23	7221,17

CONCLUSÕES

Uma comparação entre os resultados gerados por uma determinada regra heurística básica mostram uma característica uniforme: o procedimento tradicional prevê custos totais menores, enquanto os cálculos com o projeto simultâneo das unidades apresentam os maiores custos. Note que esta observação é válida para situações onde a síntese sem projeto é efetuada com valores realísticos para os coeficientes de transferência de calor, como foi o caso do presente trabalho. Caso contrário, seus resultados são ainda menos confiáveis e desvinculados da realidade, principalmente em redes onde os custos fixos são parcela predominante do custo total.

A proposta de se adicionar uma nova restrição às regras heurísticas gera resultados intermediários, desde que o valor máximo arbitrado para a interseção seja menor do que a maior interseção existente nas unidades propostas no procedimento original, mantidos os cuidados relativos aos valores utilizados para os coeficientes de transferência de calor.

Uma comparação entre os pares indicados para troca mostra que há coincidência nos resultados para a síntese tradicional, com e sem projeto simultâneo, fato que não ocorre em relação às propostas geradas com a restrição da interseção de temperaturas. Isto ocorre em função do critério adotado no procedimento com projeto de resolver os problemas causados pela interseção através

da utilização de cascos em série. Tal procedimento tem limites, pois, conforme pode ser visto na tabela 3, uma proposta de 4 cascos para uma determinada troca pode não ser a mais adequada. Caso se adotasse uma restrição em relação ao número de cascos, haveria uma proximidade maior entre as redes propostas pela síntese com projeto e a síntese com a nova regra.

Com relação ao procedimento a ser utilizado, sempre que possível deve-se realizar a síntese acoplada ao projeto das unidades. Caso haja limitações quanto ao tempo ou procedimentos de projeto, a incorporação da nova restrição relativa à interseção de temperatura mostra resultados mais próximos aos da síntese com projeto, desde que seja escolhido de forma conveniente o valor da interseção máxima.

No que diz respeito a uma definição quanto a melhor regra heurística, o desempenho superior da regra de Ponton & Donaldson, mostrado no problema utilizado como exemplo no presente trabalho, não pode ser generalizado. A experiência acumulada indica que o desempenho da regra é função do problema em análise, ou seja, é prudente realizar a síntese com os dois métodos e escolher o melhor com base nos resultados obtidos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Incropera, F.P. & DeWitt, D.P. (1990), *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Jegade, F.O. & Polley, G.T., 1992, "Capital Cost Targets for Networks with Non-Uniform Heat Exchanger Specifications", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 16, n. 5, pp. 477-495.
- Kern, D.Q. (1950), *Process Heat Transfer*, Mc Graw Hill Book, New York.
- Mendonça, E. S., Pessoa, F. L. P. and Mach, E., 1994, "Análise Energética de Processos", *Anais XVI Jornada de Iniciação Científica UFRJ*, outubro, pp. 598.
- Oliveira, S.G., 1975, "A Influência do Projeto na Síntese de Rede de Trocadores de Calor", Tese de Mestrado, EQ/UFRJ, RJ.
- Pho, T.K. & Lapidus, L. (1973), *Topics in Computer Aided Design: II. Synthesis of Optimal Heat Exchanger Networks by Tree Searching Algorithms*, *AIChE J.*, vol. 19, No. 6, pp. 1182-1189.
- Ponton, J.W. & Donaldson, R.A.B., 1974, "A Fast Method for the Synthesis of Optimal Heat Exchanger Network", *Chemical Engineering Science*, vol. 29, pp. 2375-2377.
- Ravagnani, M.A.S.S., 1994, "Projeto e Otimização de Redes de Trocadores de Calor", Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, SP.
- Robert, K.I.M., 1993, "Síntese de Redes Incorporando o Projeto Preliminar de Trocadores de Calor", Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, RJ.
- Rudd D.F., Powers G.J. and Sirola J.J., 1973, "Process Synthesis", Prentice-Hall Inc., New Jersey.

ABSTRACT

This work shows a comparative study between the utilization of two Heuristics Methods to synthesize Heat Exchangers Networks: Rudd et al (1973) and Ponton & Donaldson (1974). This study uses results obtained from a developed computational algorithm, which can perform the synthesis and equipment design simultaneously or not (the so-called traditional synthesis). Also, a modification in the traditional synthesis procedure is tested, which proposes a crossing temperature control in the equipments. One problem involving ten process streams is used to perform this comparison.



MINIMUM UTILITY USAGE IN HEAT EXCHANGER NETWORK SYNTHESIS USING GENERALIZED GRAPH MODEL



V. F. Assunção and P. B. Correia
 Departamento de Energia - FEM
 UNICAMP
 13083-970 - Campinas, SP, Brasil

SUMMARY

An optimization model for synthesis of nonconservative heat exchanger networks with minimum utility usage is developed. A generalized transportation problem is formulated to evaluate heat transfer at all temperature intervals of the process streams. An example, solved step by step, is utilized to discuss the model.

INTRODUCTION

An important industrial design problem has been the energy recovery in heat exchanger networks. For industrial processes with streams to be cooled and streams to be heated, the objective is to attain specified temperatures at the minimum cost. They could be obtained by heat transfer from hot to cold streams. However, the available thermal energy in the process streams is usually insufficient to supply the heat and cold needs, or the heat transfer may be thermodynamically impossible. Then, external energy sources, as heaters or coolers, must be used; they are usually called *utilities*.

The usage of utilities adds cost, and several researchers have studied their minimization for conservative processes. The contributions of Hohmann (1971), Linnhoff and Hindmarsh (1983), and Cerda and Westerberg (1983) can be mentioned. They establish the thermodynamic limits for the minimum required utilities. However, these methods are not applicable if the formulation includes losses.

In practice, industrial processes are nonconservative. Thermal energy is transported between different points, and its dissipation can be significant enough to be considered. The energy losses are caused mainly by insufficient thermal insulation, pressure drop, and process fluid leakage.

This work presents an alternative solution to the problem of maximum energy recovery on nonconservative heat exchanger network. Its formulation considers the losses in the heat transfer. The problem is solved utilizing a generalized graph approach (Ahuja *et al.*, 1993). It extends the previous work of Cerda *et al.* (1983) that allows the determination of temperature intervals for partitioning the process streams into substreams.

GENERALIZED GRAPH FLOW PROBLEM FORMULATION

A graph consists of a set N of nodes connected by a set A of arcs, generally oriented. The optimization problem consists of the adequate distribution of the flows on arcs so that the global cost is a minimum. In *conservative graph* there is no variation of the flow through the arc (i, j) , from node i to node j . However, in a *generalized graph*, the flow sent from node i arrives to node j multiplied by the factor μ_{ij} (arc multiplier), as shown in the Figure 1.

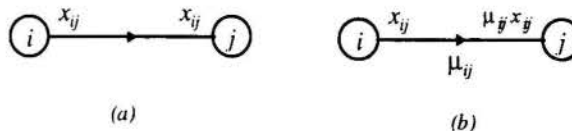


Figure 1 - Transport of flow on arc (i, j) :
 (a) conservative graph (b) generalized graph.

The generalized graph flow problem is formulated as follows:

$$\text{Minimize } \sum_{(i,j) \in A} c_{ij} x_{ij} \tag{1a}$$

Subject to:

$$\sum_{\{j:(i,j) \in A\}} x_{ij} - \sum_{\{j:(j,i) \in A\}} \mu_{ji} x_{ji} = p_i, \text{ for } i \in N \tag{1.b}$$

$$l_{ij} \leq x_{ij} \leq u_{ij}, \text{ for } (i, j) \in A \tag{1c}$$

$$\mu_{ij} > 0, \text{ for } (i, j) \in A \tag{1d}$$

where: c_{ij} is the unit cost; p_i is the demand or supply on node i ; l_{ij} and u_{ij} are the flow limits; μ_{ij} is the *arc multiplier*, a gain if $\mu_{ij} > 1$ or a lost if $\mu_{ij} < 1$.

GENERALIZED GRAPH MODEL FOR HEAT EXCHANGER NETWORKS

The generalized graph model formulation requires a reorganizing of some variables and the introduction of new indices, since each process stream is divided into substreams conform the temperature range. And a minimum temperature

The arc multipliers represent *thermal efficiency factors* corresponding to the ratio between actual heat transferred and its maximum if there are no heat dissipation to the environment.

Process Characterization. An industrial process with four process streams (2 cold and 2 hot) is considered. Temperatures must attain the levels shown in Table 1, using heat transfer among process streams or utilities. However, the utilities (heater/cooler) must be used at the minimum level.

The temperatures are divided in intervals attributing a minimum temperature difference between hot and cold streams (substreams) to assure the heat transfer. In this example, $\Delta T_{min} = 15^\circ\text{C}$ is the minimum temperature difference.

Table 1 - Thermal data of process

Streams	Range of Temperature [°C]	Cp middle [kJ/kg°C]	m [kg/s]
cold stream 1 c ₁	80 → 140	2.0	10.0
	140 → 280	2.5	10.0
cold stream 2 c ₂	50 → 130	1.3	3.0
hot stream 1 h ₁	200 → 130	1.2	8.0
	130 → 40	1.0	8.0
hot stream 2 h ₂	300 → 150	1.8	5.0

Temperature Intervals. To establish the temperature intervals, the procedure proposed by Linnhoff and Flower (1978) and modified by Cerda *et al.* (1983) is used, and the corner points of the temperature intervals are identified.

In the cold streams, *j* is a corner point candidate if

$$\sum_{i \in I_{C,j}^+} (mCp)_i > \sum_{i \in I_{C,j}^-} (mCp)_i \quad (2)$$

In the hot streams, *j* is a corner point candidate if

$$\sum_{i \in I_{H,j}^+} (mCp)_i < \sum_{i \in I_{H,j}^-} (mCp)_i \quad (3)$$

where sets $I_{C,j}^+$ and $I_{C,j}^-$ are the cold streams contributing to the merged heating curve just above and below corner point *j*, respectively. The sets $I_{H,j}^+$ and $I_{H,j}^-$ are similarly defined for the merged cooling curve (hot streams) at corner point *j*.

Table 2 presents the results of this procedure.

Table 2 - Corner point candidates

Streams	T [°C]	$\sum(mCp)^+$ [kW/°C]	$\sum(mCp)^-$ [kW/°C]	Position
Hot	300	0.0	9.0	OK
	200	9.0	18.6	OK
	150	18.6	9.6	reject
	130	9.6	8.0	reject
	40	8.0	0.0	reject
Cold	50	3.9	0.0	OK
	80	23.9	3.9	OK
	130	20.0	23.9	reject
	140	25.0	20.0	OK
	280	0.0	25.0	reject

Now, the problem can be partitioned into temperature intervals. The hot corner points (Table 2) are first projected onto the cold streams and then the cold onto the hot streams. To maintain the ΔT_{min} on the projection, the hot corner project down ΔT_{min} onto the cold stream and the cold corner project up ΔT_{min} onto the hot stream, excluding the repeated temperature intervals.

Figure 2 shows the disposition of the process streams of the example, in relationship the temperature range, as well as the projection of the corner points (Table 2) on the respective process streams. For example, the projection of the hot corner point *j*=300°C on the cold stream (for $\Delta T_{min}=15^\circ\text{C}$) results in *j*=285°C. Table 3 lists the intervals created by this partitioning.

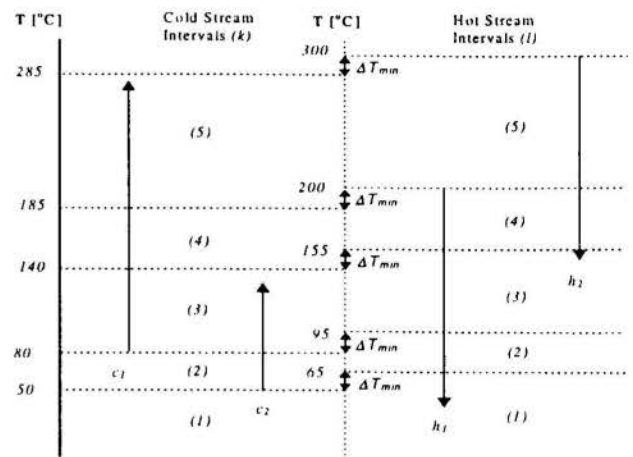


Figure 2 - Temperature range of process streams

As heat will always be transferred from a greater to a lower temperature level, a temperature interval (*l*) of hot streams can transfer heat to a temperature interval (*k*) of cold streams if $k \leq l$.

Table-3 - Temperature intervals for partitioning the process streams ($\Delta T_{min}=15^\circ\text{C}$)

Intervals	(<i>k</i>) - Cold stream intervals [°C]	(<i>l</i>) - Hot stream intervals [°C]
1	∞ → 50	∞ → 65
2	50 → 80	65 → 95
3	80 → 140	95 → 155
4	140 → 185	155 → 200
5	185 → 285	200 → 300

To facilitate the quantification of the thermal transfer capacity, the process stream parcel for each temperature intervals will be called a *substream*. Each substream is represented by two indices: the lower identify the original stream and the upper for the temperature interval analyzed. Therefore, a_i^k denotes the flow necessary to the heating of cold stream *i* in temperature interval *k* (that is: cold process stream *i* at temperature level *k*, substream c_i^k ; or cold utility stream *i* at temperature level *k*, substream C_i^k). If no phase change of the process fluid occurs, then

$$a_i^k = (mC_p \Delta T)_i^k \quad (4)$$

Similarly, b_i^l is the thermal energy flow available in hot stream i in temperature interval l (that is: hot process stream i at temperature level l , substream h_i^l ; or hot utility stream i at temperature level l , substream H_i^l) and can be obtained by

$$b_i^l = \left(\dot{m} C_p \Delta T \right)_i^l \quad (5)$$

Thermal Efficiency Factor. In heat exchanger networks the energy losses are mainly caused by inadequate thermal insulation on the tubing and heat exchangers, pressure drop in the tubing and heat exchangers, and process fluid leakage. Nevertheless, for convenience, in this work only the losses in heat exchangers are considered. They represent the ratio between amount of heat transferred to cold stream (Q_c) and amount of heat from hot stream (Q_h), $\mu_{ij} = Q_c/Q_h$. In a heat exchanger where there is no phase change of process fluid (Figure 3), $Q_c = m_i C_p (T_{c2} - T_{c1})$ for cold stream and $Q_h = m_j C_p (T_{h1} - T_{h2})$ for hot stream.

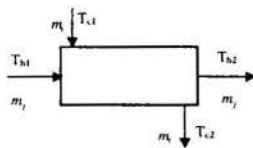


Figure 3 - Heat exchanger representation

Optimization Problem Formulation. The substreams are represented by the following node sets:

- cold process substreams set, S_c ;
- hot process substreams set, S_h ;
- cold utility substreams set, U_c ;
- hot utility substreams set, U_h .

The heat transfer between two substreams are represented by the arc $r = (s, t)$, $s \in S_h \cup U_h$ and $t \in S_c \cup U_c$. The following arc sets are considered:

- heat transfers from the hot process streams to the cold utility streams, coolers C ;
- heat transfers from the hot process streams to the cold process streams, exchangers E ;
- heat transfers from the hot utility streams to the cold process streams, heaters H ;

All the network arcs belong to the set $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{E} \cup \mathcal{H}$. The thermal energy flow demand of the cold substream t is represented by a_t , and the thermal energy flow supply of the hot substream s is represented by b_s .

The minimization of utility usage problem is formulated as follows:

Minimize

$$\sum_{r \in \mathcal{C}} \mu_r \cdot q_r + \sum_{r \in \mathcal{H}} q_r \quad (6)$$

Subject to:

$$\sum_{r \in \mathcal{H} \cup \mathcal{E}} \mu_r \cdot q_r = a_t, \text{ for } t \in S_c \quad (7a)$$

$$\sum_{r \in \mathcal{C} \cup \mathcal{E}} q_r = b_s, \text{ for } s \in S_h \quad (7b)$$

$$q_r \geq 0, \text{ for } r \in \mathcal{A} \subseteq \mathcal{E} \cup \mathcal{H} \quad (7c)$$

$$0 < \mu_r \leq 1, \text{ for } r \in \mathcal{A} \subseteq \mathcal{E} \cup \mathcal{H} \quad (7d)$$

The objective function (6) charges the utilities usage. The constraint (7a) assures the needs of the cold process streams, supplied from hot process streams and utilities. The constraint (7b) assures the needs of the hot process streams, supplied from cold process streams and utilities.

The example data, including the thermal efficiency factor μ_r , are shown in Table 4. The numbers in the parentheses are the thermal energy flow (kW) required by the cold stream i in interval k (a_i^k), and the thermal energy flow available (kW) from hot stream j in interval l (b_j^l). The numbers outside of Table 4 are the temperature intervals. The letter I represents the arc where heat transfer is thermodynamic impossible. To simplify the representation, the utilities are shown by sets of nodes U_c and U_h .

Table 4 - Thermal efficiency factors.

		300°	200°	155°	95°	65°	-∞		
Hot	h_2^5	h_1^4	h_2^4	h_1^3	h_2^3	h_1^2	h_1^1	U_h	
Cold	(900)	(432)	(405)	(520)	(45)	(240)	(200)		
285°	C_1^5 (2375)	0.94	1	1	1	1	1	0.94	
185°	C_1^4 (1125)	0.95	0.96	0.95	1	1	1	0.94	
140°	C_1^3 (1200)	0.96	0.97	0.95	0.96	0.97	1	0.95	
	C_2^3 (195)	0.97	0.98	0.96	0.97	0.98	1	0.96	
80°	C_2^2 (117)	0.97	0.98	0.98	0.98	0.99	0.98	1	0.98
50°	U_c	0.98	1.00	0.99	1.00	1.00	0.98	1.00	-

Figure 4 shows the example representation in generalized graph formulation. On the right hand side, the heat that must be removed from hot stream on the temperature intervals is shown and, on the left hand side, the heat that must be supplied to cold stream on the temperature intervals. In the center, the heat flow that can be carried on each arc along with its respective thermal efficiency factor is given.

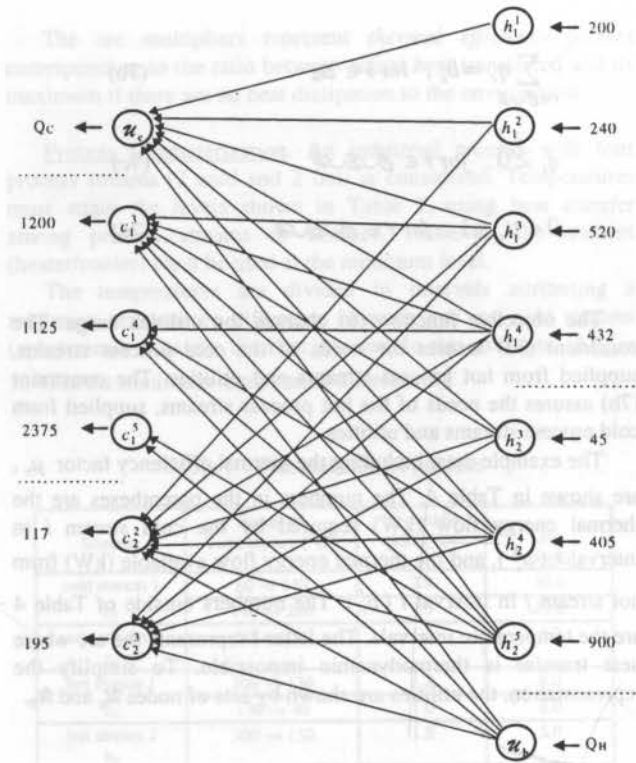


Figure 4 - The generalized graph problem representation.

Optimal Solution. The optimal solution of the generalized graph problem is obtained using a software developed by Correia (1989). The results are shown in Figure 5. The objective function minimum is 3176.4 kW, it is the sum of the thermal energy flow on the utility arcs. Such that, 318.2 kW is the minimum thermal energy flow to be removed by cold utilities and 2858.2 kW is the minimum thermal energy flow to be supplied by hot utilities.

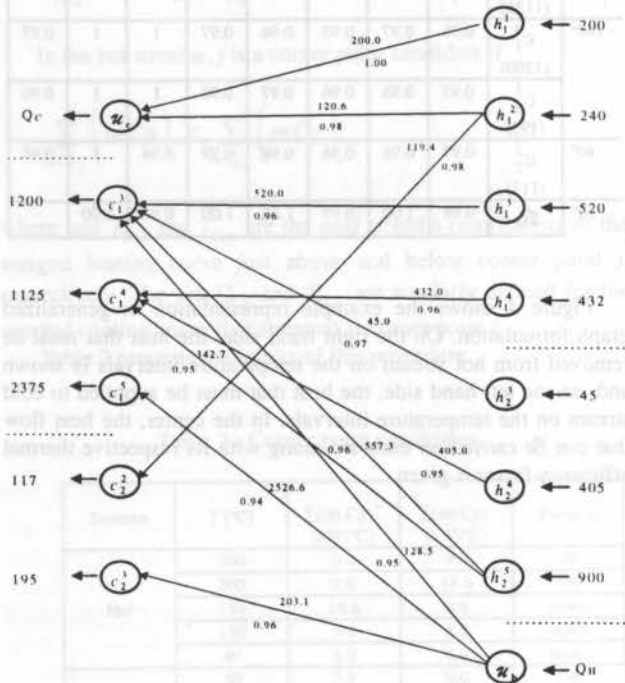


Figure 5 - The optimal solution.

DISCUSSION

The heat exchanger network optimization shown in this work is obtained considering the minimum thermal energy flow from utilities. The model considers a minimum temperature difference between process streams and the thermal efficiency factor for heat transfer. The optimal solution obtained shows that the minimum thermal energy flow to be removed by cold utilities is 318.2 kW, and the minimum thermal energy flow to be supplied by hot utilities is 2858.2 kW.

If the present example was solved by the transportation formulation applying the northwest corner rule (Cerdea *et al.*, 1983; Luemberger, 1984), the solution would demand a heating of 2593.0 kW (supplied by hot utilities) and cooling of 323.0 kW (removed by cold utilities), as shown Figure 6. This solution has a lower sum of utility usage (2916.0 kW), since losses is not considered, but it is impossible. Nevertheless, if the northwest corner rule is applied considering nonconservative arcs, then its solution generally is not optimal. In this example, the solution requires 2867.7 kW from hot utilities and 318.2 kW to cold utilities, as shown in Figure 7.

The industrial process representations in conservative graphs are utilized when the flow variation on arcs are not significant. Nevertheless, if the losses are significant, they may be considered in the calculations. Therefore, heat exchanger network optimizations considering heat losses in the formulations present solutions better approximating actual results than those not considering heat losses.

The method shown in the present work allows the user to include all constraints that are judged necessary (which may be physical or economic in character). The temperature intervals presented in this work may be modified to suit the application. Another noteworthy fact is that this optimization model for heat exchanger networks provides the better solution from the energy recovery point of view, although this one may not be the better solution from economic point of view. The cost of equipment used in heat transfer and operational costs are also factors in the choice of the best design.

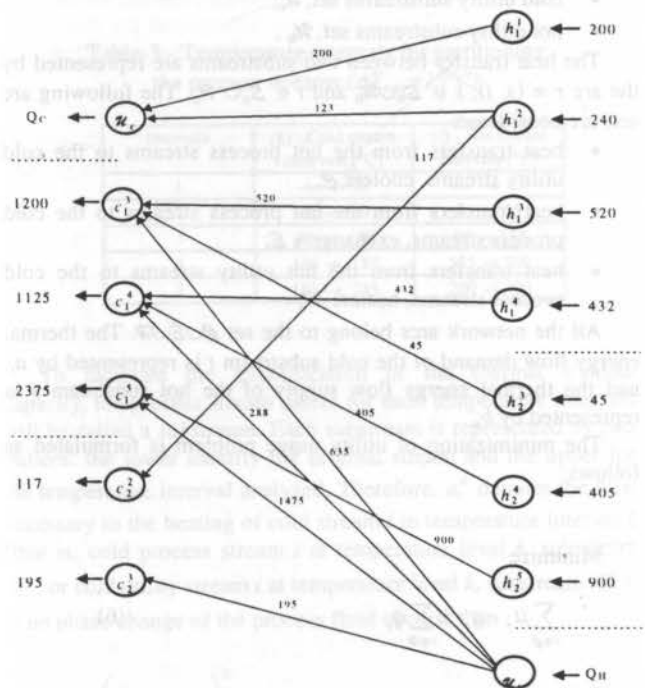


Figure 6 - The northwest corner rule conservative solution.

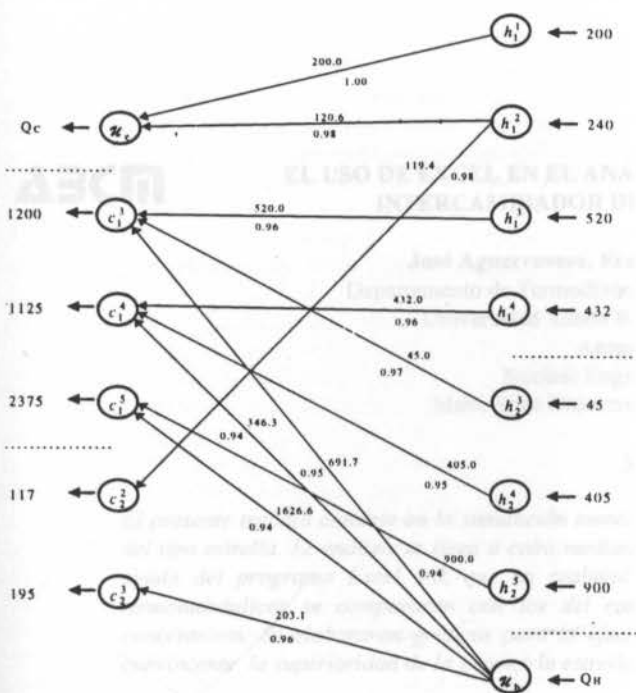


Figure 7 - The northwest corner rule nonconservative solution.

REFERENCES

Ahuja, K. R., Magnanti, T. L. and Orlin, J. B., 1993 "Network Flows: Theory, algorithms, and application", Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ - USA.

Cerda, J., Westerberg, A.W., Mason, D. and Linnhoff, B., 1983 "Minimum Utility Usage in Heat Exchanger Network Synthesis", *Chem. Engng. Sci.*, Vol. 38, N° 3, pp. 373 - 387.

Cerda, J., Westerberg, A.W., 1983 "Synthesizing Heat Exchanger Network Having Restricted Stream/Stream Matches Using Transportation Problem Formulation", *Chem. Engng. Sci.*, Vol. 38, N° 10, pp. 1723 - 1740.

Correia, P. B., 1989 "Multisetorial Model for Energy Supply Optimization: electrical, natural gas and biomass cogeneration". - Ph.D. Thesis, UNICAMP, Brazil (in Portuguese)

Hohmann E. C., 1971 "Optimum Networks for Heat Exchange". Ph.D. Thesis, University of California, Los Angeles - USA.

Linnhoff, B. and Flower, J. R., 1983 "Synthesis of Heat Exchanger Network Part I and II", *A.I.Ch.E.J.*, Vol. 24 N° 4, pp. 633 - 654.

Linnhoff, B. and Hindmarsh, E., 1983 "The Pinch Design Method of Heat Exchanger Network", *Chem. Engng. Sci.*, Vol. 38 N° 5, pp. 745 - 763.

Luenberger, D. G., 1984 "Introduction to Linear and Non-Linear Programming" 2nd Edition, Addison-Wesley, Reading, Mass - USA.

EL USO DE UN INTERCAMBIADOR DE CALOR EN EL ANÁLISIS TERMOHIDRÁULICO DE UN SISTEMA TIPO ESTRELLA.

José Aguirre, Roberto Uribe Larrea
 Facultad de Ingeniería y Arquitectura
 Universidad de Cuenca, Ecuador
 P.O. Box 1171, Cuenca, Ecuador
 Ecuador

Se realizó un estudio de un intercambiador de calor de concha y tubo en un sistema de refrigeración tipo estrella. Se utilizó un modelo matemático para determinar el flujo de calor y la temperatura de los fluidos en cada uno de los circuitos. Los resultados muestran que el intercambiador de calor mejora el rendimiento del sistema y reduce el consumo de energía.

En el presente artículo se estudia el uso de un intercambiador de calor en un sistema de refrigeración tipo estrella. Se realizó un estudio de un intercambiador de calor de concha y tubo en un sistema de refrigeración tipo estrella. Se utilizó un modelo matemático para determinar el flujo de calor y la temperatura de los fluidos en cada uno de los circuitos. Los resultados muestran que el intercambiador de calor mejora el rendimiento del sistema y reduce el consumo de energía.

UN PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

El problema de optimización de un sistema de refrigeración tipo estrella se puede formular como un problema de programación lineal. Se debe encontrar el flujo de calor y la temperatura de los fluidos en cada uno de los circuitos de manera que se minimice el consumo de energía. Este problema puede resolverse utilizando métodos de optimización lineal.



Figura 1. Intercambiador de calor en forma de estrella.

Este sistema de refrigeración tipo estrella se puede utilizar en una variedad de aplicaciones. Se debe tener en cuenta que el diseño de este sistema debe tener en cuenta las características de los fluidos y las condiciones de operación.

$$Q = \frac{U A \Delta T}{1 + \frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2}} \quad (1)$$



EL USO DE EXCEL EN EL ANÁLISIS TERMOHIDRÁULICO DE UN INTERCAMBIADOR DE CALOR TIPO ESTRELLA.

José Aguerrevere, Francisco Barea, Ulises Lacoa

Departamento de Termodinámica y Fenómenos de Transferencia
Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela.

Antonio Campo

Nuclear Engineering Department
Idaho State University, Pocatello, Idaho, USA.



SUMARIO

El presente trabajo consiste en la simulación numérica de un intercambiador de calor de concha y tubo del tipo estrella. El análisis se llevo a cabo mediante el método de volúmenes finitos de control con la ayuda del programa Excel 5.0, que en realidad es una hoja de cálculo eficiente. Los resultados termohidráulicos se compararon con los del caso standard, es decir el intercambiador de tubos concéntricos. Se elaboraron gráficos para la efectividad vs. NTU, los cuales demuestran de manera convincente la superioridad de la geometría estrellada sobre la concéntrica.

INTRODUCCION

El diseño y construcción de intercambiadores de calor de tipo compacto representa una gran reto en el área de la transferencia de calor aplicada. la gran mayoría de los trabajos que existen sobre este tema se encuentra referenciado en la literatura especializada (Shah y London, 1978; Kakac et al., 1987).

Este trabajo tiene como objetivo el estudio de un tipo especial de intercambiador de calor en forma de estrella. La estrella esta constituida por varios conductos en forma de sector circular que transportan en forma alternada una corriente caliente y otra corriente fría. Los autores no tienen conocimiento acerca de investigaciones previas vinculadas a esta configuración dentro del ámbito de intercambiadores de calor. Sin embargo, existen artículos aislados en donde se ventilan los problemas de convección forzada en canales en forma de sector circular cuyas superficies están expuestas a una temperatura uniforme o a un flujo de calor uniforme. Las publicaciones representativas son las de Manglik y Bergles, 1988; Lei y Trupp, 1990; Chung y Hsia, 1994.

La simulación por computadora juega un papel muy importante en la resolución de los problemas de transferencia de calor; puesto que permite, a través de la discretización de las ecuaciones diferenciales involucradas, obtener soluciones numéricas confiables de problemas cuya solución analítica no existe o, en caso contrario, es excesivamente compleja.

Dicha simulación implica el manejo de programas computacionales, bien sean versiones comerciales, en las que generalmente se establece una relación de tipo "caja negra" con el usuario pues éste desconoce el método de resolución que emplea el programa, o simulaciones desarrolladas por el mismo usuario, que exige un conocimiento bastante amplio en el área de computación y la consecuente inversión de muchas horas de trabajo en la puesta a punto del programa.

Por otro lado, existe evidencia acerca del potencial de emplear hojas de cálculo a través de los programas de estudio en ingeniería (Rosen, 1987; Rosen, 1990). Este es el caso de Excel 5.0, el cual es una hoja de cálculo que se adapta muy bien como herramienta para la resolución de problemas físicos mediante la técnica de los volúmenes finitos de control, pues dadas sus características permite establecer con facilidad la implementación de la malla y la presentación de resultados

Por tal razón, se escogió a Excel 5.0 como herramienta para realizar la simulación de un intercambiador de calor en forma de estrella.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA

El intercambiador de calor en forma de estrella es mostrado en la Figura 1, La Carcaza, de diámetro, D, está dividida por igual, en ocho sectores circulares. En cada uno de ellos circula de forma intercalada, un fluido frío (F) y otro caliente (C), ambos en completo desarrollo hidrodinámico y en cocorriente. Las propiedades de los dos fluidos se suponen constantes. La superficie externa del intercambiador está perfectamente aislada y el espesor de las paredes que dividen los sectores contiguos se considera despreciable.

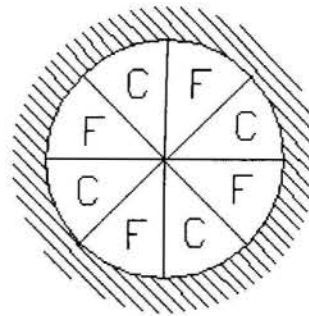


Figura 1. Intercambiador de calor en forma de estrella.

ANALISIS

La ecuación de la energía, en coordenadas cilíndricas viene dada por

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(k \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) = \rho c W \frac{\partial T}{\partial z} \quad (1)$$

en donde se ha despreciado el efecto de la conducción axial y la disipación viscosa.

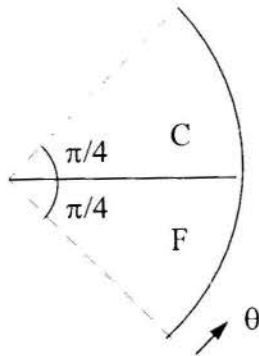


Figura 2a. Dominio Computacional

Con referencia a la Figura 2a, las condiciones de borde térmicas son:

$$\frac{\partial T_{r,c}}{\partial r} = 0 \quad \text{en } r = 0 \text{ y } r = R \quad (2a)$$

$$\frac{\partial T_f}{\partial \theta} = 0 \quad \text{en } \theta = 0 \quad (2b)$$

$$\frac{\partial T_c}{\partial \theta} = 0 \quad \text{en } \theta = \pi / 2 \quad (2c)$$

La ecuación de Navier-Stokes en la región de completo desarrollo corresponde a:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial W}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dz} \quad (3)$$

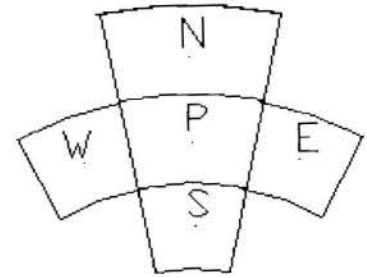
con las siguientes condiciones de borde:

$$W = 0 \quad \text{en } r = 0 \text{ y } r = R \quad (4a)$$

$$W = 0 \quad \text{en } \theta = \frac{\pi}{4} \quad (4b)$$

$$\frac{\partial W}{\partial \theta} = 0 \quad \text{en } \theta = 0 \text{ y } \theta = \pi \quad (4c)$$

El conjunto de ecs. (1)-(2) y (3)-(4) se resolvió mediante el método de los volúmenes finitos de control (Patankar,1980). Para ello se utilizó la célula computacional mostrada en la Figura 2b. Empleando una variable genérica V, las ecuaciones. (1) y (2) se discretizaron dando lugar a la siguiente ecuación canónica



Figuras 2b. Célula computacional en coordenadas cilíndricas.

$$a_p V_p + a_n V_n + a_s V_s + a_e V_e + a_w V_w + a_i V_i = B \quad (5)$$

donde

$$a_n = \frac{r_n \cdot \Delta \theta}{\Delta r}; a_s = \frac{r_s \cdot \Delta \theta}{\Delta r}; a_e = \frac{r_e \cdot \Delta \theta}{\Delta r}; a_w = \frac{r_w \cdot \Delta \theta}{\Delta r} \quad (6a)$$

$$a_p = -(a_n + a_s + a_e + a_w) \quad (6b)$$

$$a_i = \frac{\rho c}{k} V_p \Delta \theta (r_n^2 - r_s^2) \quad (6c)$$

$$B = \frac{dp}{dz} \Delta \theta [r_n^2 - r_s^2] \quad (6d)$$

En la parte hidrodinámica las ecuaciones anteriores corresponden, $V=W$ y $a_i = 0$. Entretanto, la parte térmica necesita que $V=T$ y $B=0$.

Conviene destacar que el término convectivo en la ec. (1) fue discretizado a través del método implícito (Patankar,1980).

METODOLOGIA DE SOLUCION

Para simular y analizar el intercambiador de calor en forma de estrella se diseñó y realizó un programa en Microsoft Excel 5.0 que resuelve las ecuaciones discretizadas. Estas fueron obtenidas a partir de la técnica de los volúmenes finitos de control, para una malla que consta de 10x10 celdas en la sección transversal y cuatro celdas en la dirección axial.

En relación a la selección del programa base para el diseño y la realización del simulador del intercambiador en forma de estrella, es importante señalar que se escogió Microsoft Excel 5.0 debido a las múltiples ventajas que presenta para tal fin. Actualmente, Excel es mucho más que una hoja de cálculo, pues además de realizar las operaciones básicas de un programa de este tipo presenta una gran cantidad de funciones complementarias que lo convierten en una herramienta muy útil para la resolución de problemas mediante la técnica de volúmenes finitos de control.

Así se tiene que dentro de las opciones que presenta el programa se encuentra la función iteración (en el menú **herramientas**, dentro de la subcategoría **opciones** (véase la

figura 3), la cual le otorga a la matriz de Excel la versatilidad de actuar como una malla derivada de la técnica de volúmenes finitos de control. Una vez formuladas las ecuaciones correspondientes a cada celda (incluyendo las condiciones iniciales y de borde) el programa las resuelve mediante métodos iterativos asociados a dicha función.

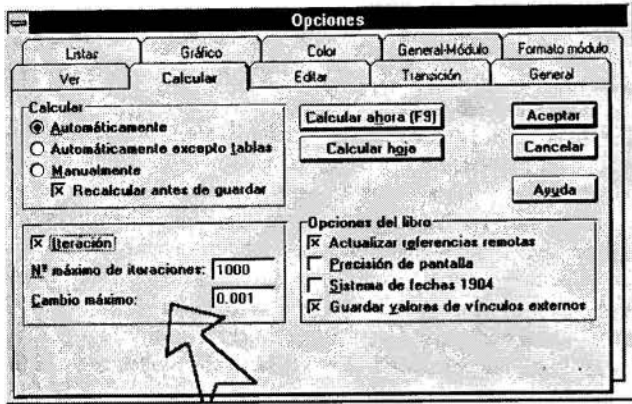


Figura 3. Vista del menú opciones y función iteración.

Estas características le dan a Excel una gran sencillez y facilidad de uso, ya que una vez discretizadas las ecuaciones sólo hay que determinar la malla a utilizar y transcribir en él las ecuaciones correspondientes a cada una de sus celdas. Además, esto hace que el programa pueda ser utilizado por gran cantidad de usuarios, al no ser necesario tener conocimientos profundos en programación.

De hecho, la experiencia confirma estas ventajas: durante el último año, en la Universidad Simón Bolívar se ha implementado exitosamente en los cursos de Transferencia de Calor el uso de Excel como herramienta de trabajo en la resolución numérica de los problemas planteados.

Por otra parte, pese a que al diseñar el esquema de resolución hay que definir un número determinado de celdas, el mallado conserva cierto grado de flexibilidad en el ajuste de la exactitud del programa gracias al uso de otros comandos de Excel. De esta forma mediante operaciones de copiado y pegado de celdas se puede afinar la malla del programa sin mayores contratiempos y mediante los parámetros de la función iteración (n° de iteraciones y tolerancia) se puede ajustar la exactitud de la corrida. Así por ejemplo se tiene que en este problema en particular se trabajó con un mallado de 10×10 para el área transversal seleccionada y cuatro pasos en la dirección axial. A partir de esta malla se elaboraron con facilidad otras versiones, llegando a tener incluso 12 posiciones axiales.

Además, otras ventajas que proporciona el trabajar en una hoja de cálculo vienen dadas por el uso de otras propiedades de Excel que hacen del programa una herramienta muy versátil y amigable en este campo de trabajo. Así se tiene que al definir los datos de entrada como variables de libro su inserción, manejo y cambio son de gran facilidad. Tocante a los resultados, el programa ofrece una gran cantidad de valores referentes a las características y a la operación del intercambiador, tanto numérica como gráficamente (tanto en dos como en tres dimensiones), lo que permite una mejor comprensión y análisis del problema.

El programa necesita como datos de entrada la longitud y el radio del intercambiador, las temperaturas de entrada de los fluidos, sus propiedades y la caída de presión por unidad de longitud del intercambiador. Y en cuanto a los resultados que se obtienen, el programa muestra las características hidrodinámicas

de los fluidos: velocidad en cada punto de la malla, representación gráfica tridimensional de la distribución de velocidades, diámetro hidráulico, número de Reynolds, caudales másico y volumétrico, factor de fricción. Además el programa proporciona los parámetros que determinan el comportamiento térmico del intercambiador, como lo son: la temperatura en cada punto de la malla y la gráfica tridimensional de la distribución de temperaturas para cada posición axial, los valores numéricos de la temperatura volumétrica media (T_b) para cada posición axial, la gráfica de la T_b vs. la longitud del intercambiador, el calor total transferido, el número de Peclet, la relación entre las capacidades caloríficas, y los valores de NTU y efectividad correspondientes al caso analizado.

Por otra parte, como las propiedades de ambos fluidos se consideran constantes a lo largo del intercambiador es importante, para poder obtener una buena aproximación de la realidad, evaluarlas a una temperatura representativa de las condiciones a las que se encuentra cada uno de ellos. Dado que la evolución de la T_b , a lo largo del intercambiador presenta un comportamiento de tipo exponencial, evaluar las propiedades de cada fluido a una temperatura igual a la media aritmética de sus temperaturas de entrada y salida no sería el modelo más adecuado, por lo que se propone evaluarlas a una temperatura cuyo valor represente un promedio ponderado de la T_b , el cual se define como una integral discreta de la variación axial de T_b .

Sin embargo, como se desconocen los valores que tendrá la T_b para cada posición axial en un problema dado, el programa ofrece entre los resultados de la simulación el valor de esta temperatura promedio ponderada, llamada temperatura de refinamiento de los datos, para cada fluido. Esto permite que se reintroduzcan en el programa las propiedades de los mismos a su correspondiente temperatura de refinamiento y se realice nuevamente la simulación del proceso, para así obtener resultados más confiables.

PRESENTACION DE RESULTADOS

Con la finalidad de analizar el comportamiento del intercambiador de calor en forma de estrella y la influencia que sobre él tienen los distintos parámetros de estudio, se realizaron diversas corridas manejando fluidos reales, tales como: aceite-agua, agua-agua y agua-aire.

Para ilustrar las bondades que ofrece el programa, la Tabla I muestra los resultados obtenidos para tres de las corridas realizadas, para las cuales se fijó una longitud y un radio del intercambiador de 60 m y 7,5 cm, respectivamente.

A partir de los resultados obtenidos para las distintas corridas que se realizaron en este trabajo se elaboraron las gráficas de la efectividad vs. NTU correspondientes. Posteriormente se calcularon valores representativos de la relación C_{\min}/C_{\max} , tal como se muestra en la Figura 4.

Tabla I- Resultados de las corridas experimentales.

Caso	Fluido	Corrida	T_c (K)	T_s (K)	T_f (K)	m (Kg/s)	NTU	e
1	Accite	C	420,00	337,13	369,29	0,0051	1,01	0,57
2	Agua	F	300,00	303,46	302,21	0,0404		
3	Accite	C	420,00	353,03	380,34	0,0068	0,74	0,46
4	Agua	F	300,00	309,52	305,92	0,0166		
5	Accite	C	420,00	363,72	387,41	0,0089	0,57	0,39
6	Agua	F	300,00	310,37	306,34	0,0175		
7	Agua	C	360,00	343,59	350,69	0,0273	0,31	0,23

Agua	F		300,00	311,14	306,69	0,0273		
Agua	C	2	360,00	348,43	353,46	0,0361	0,46	0,34
Agua	F		300,00	316,63	309,88	0,0175		
Agua	C	3	360,00	348,95	353,77	0,0392	0,42	0,32
Agua	F		300,00	315,76	309,43	0,0194		
Aire	C	1	550,00	376,36	437,97	0,0023	1,26	0,58
Agua	F		300,00	338,15	325,77	0,0016		
Aire	C	2	550,00	384,41	443,68	0,0024	1,18	0,54
Agua	F		300,00	351,29	329,83	0,0014		
Aire	C	3	550,00	381,04	441,02	0,0024	1,23	0,56
Agua	F		300,00	342,28	328,01	0,0015		

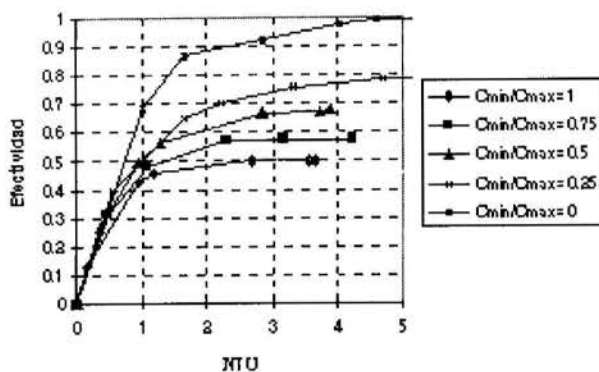


Figura 4- Efectividad vs. NTU en función de $Cr=C_{min}/C_{máx}$.

La familia de curvas exhibe un comportamiento de parábola generalizada. A medida que Cr disminuye las curvas descienden de forma sistemática. En particular, para $Cr=1$, la efectividad se estabiliza en 0.5 cuando el valor de NTU sobrepasa 2.5 unidades.

Además, utilizando los datos experimentales del trabajo de Ko (1994), se realizaron varias simulaciones para comparar el intercambiador de forma de estrella con uno de tubos concéntricos en ciertos casos representativos. Esto es igualdad de: la longitud, el flujo másico, el radio externo, el área de transferencia de calor y el número de Reynolds.

Los resultados experimentales reportados por Ko (1994) corresponden a un intercambiador de tubos concéntricos con un radio interno de 3,18 mm., un radio externo de 5,08 mm. y una longitud de 0,871m. Se realizaron dos corridas diferentes: en la Corrida I se simuló un intercambiador en forma de estrella con el mismo caudal másico, la misma longitud y un radio igual al radio interno de la carcasa; mientras que en la Corrida II se trabajó con un intercambiador en forma de estrella que presenta igual caudal másico, longitud y área de transferencia de calor.

Tabla 2. Comparación de las simulaciones numéricas con los resultados experimentales de Ko (1994).

Parámetro	Fluido	Experimental	Corrida I	Corrida II
Re	F	571	69,46	141,61
	C	1728	189,16	386,95
m (kg/s)	F	9,427E-4	9,427E-4	9,427E-4
	C	1,867E-3	1,867E-3	1,867E-3
T_e (K)	F	291,92	291,92	291,92
	C	312,32	312,32	312,32

T_s (K)	F	295,37	297,65	297,62
	C	306,48	308,15	308,13
e		0,2966	0,3420	0,3428

De la Tabla 1 se desprende que cuando el intercambiador en forma de estrella trabaja con aceite como fluido caliente y agua como fluido frío se observa un muy buen comportamiento como enfriador del fluido caliente, pues la temperatura del aceite desciende desde los 420K a la entrada a 363,72K a la salida, esto equivale a una efectividad del 39%.

Ahora bien, al emplear agua como fluido único de trabajo la variación de temperatura entre la entrada y la salida es muy similar para el agua fría y el agua caliente, debido a que sus calores específicos son muy similares en el rango de temperaturas en que se operó. Paralelamente, esta tendencia también se refleja en la distribución de temperatura que presentan dichos fluidos para cada posición axial, tal como se muestra en la Figura 5. Además, se observa que para este caso el intercambiador muestra también un buen comportamiento pues su efectividad es de 32%.

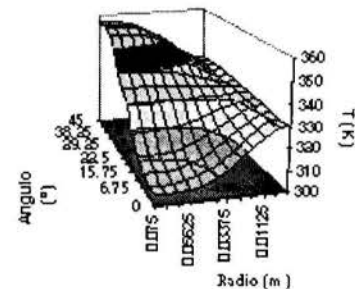


Figura 5. Distribución de temperaturas para la posición de 45m en el caso agua-agua.

Veamos a continuación la actuación del intercambiador de calor como calentador, utilizando aire como fluido caliente y agua como fluido frío. Para esta combinación la temperatura del agua subió en 42,28K y la efectividad del intercambiador fue del 56%, poniendo de manifiesto que el intercambiador cumplió exitosamente su objetivo como calentador.

Por otra parte, el proceso de refinamiento de los datos arrojó variaciones significativas en los parámetros representativos del comportamiento del intercambiador, como las temperaturas de salida de los fluidos, la relación entre sus capacidades caloríficas, el número de unidades de transferencia y la efectividad.

Como consecuencia del refinamiento de datos, se procede a examinar varias combinaciones de fluidos. Para la simulación del caso aceite-agua se afinaron sus respectivas temperaturas de salida en 26,6K y 6,9K; y la relación entre las capacidades caloríficas, el número de unidades de transferencia y la efectividad en 76,51%; 75,77% y 45,21% respectivamente, en relación a los valores obtenidos después del refinamiento de datos.

De igual forma en el caso agua-agua las temperaturas de salida variaron en 5,4K y 4,6K respectivamente para el agua caliente y el agua fría, y la relación entre las capacidades caloríficas se redujo en un 102,84%, mientras que el NTU y la efectividad aumentaron en un 27,14% y 27,88% respectivamente, en relación a los resultados obtenidos en la última corrida.

Tocante a la simulación del caso aire-agua sus variaciones correspondientes en las temperaturas de salida fueron de 4,7K y 4,1K; y en la relación de las capacidades caloríficas, el NTU y la

efectividad fueron de 9,39%; 2,04% y 1,52% respectivamente, con base en los valores finales obtenidos.

Es importante señalar que todos estos cambios se deben únicamente a la variación de la temperatura a la cual se evaluaron las propiedades de los fluidos.

Conviene subrayar que cada curva coincide con la solución analítica basada en el método de efectividad-NTU.

Por otra parte, las gráficas obtenidas con el programa para la evolución de la temperatura volumétrica media en función de la longitud del intercambiador son de tipo exponencial, tal como lo establece el criterio de la diferencia de temperatura logarítmica media (ver Figura 6).

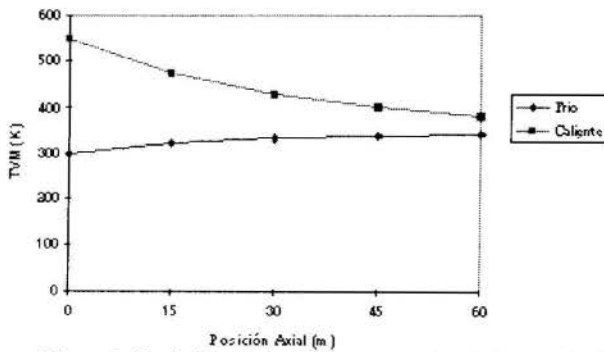


Figura 6. Variación de la temperatura volumétrica media de ambos fluidos para el caso aire-agua.

Además, según indica la literatura para un sector circular de 45° en cual el fluido se encuentre en la región de completo desarrollo hidrodinámico el valor del coeficiente de fricción $C_f Re$ es 13,68, mientras que el programa reporta un valor de 13,12; lo que representa una variación del 4,09% con respecto al valor tabulado (Shah y London, 1978). Y en relación al perfil de velocidades, éste presenta la forma característica del flujo laminar, es decir es simétrico y con su máximo en la mitad superior del sector circular, decreciendo gradualmente hasta hacerse cero en las paredes de la sección, tal como se muestra en la Figura 7.

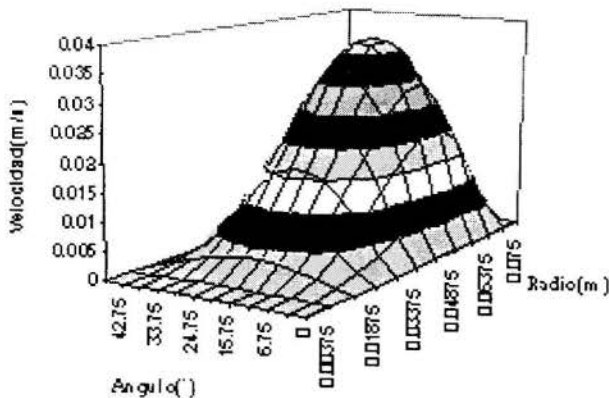


Figura 7. Perfil de velocidades en una sección circular del intercambiador para el caso agua-agua.

Finalmente, en relación a la comparación realizada entre los resultados experimentales obtenidos para un intercambiador de

tubos concéntricos por Ko (1994) y la simulación del intercambiador en forma de estrella hecha en el programa computacional se presentaron algunas diferencias en los parámetros representativos del comportamiento térmico de los mismos. En el caso de las temperaturas de salida se observa que éstas aumentaron en ambas corridas para los dos fluidos de trabajo, siendo la diferencias obtenidas en los dos casos de 2,3K para el fluido frío y de 1,7K para el fluido caliente. Sin embargo, el hecho de que para ambas corridas los parámetros térmicos hayan sido similares se debe aparentemente a que la longitud establecida en este análisis es tan pequeña que no es suficiente para que se alcancen diferencias notables entre las corridas. No obstante, ya para esta longitud se observa que en ambas corridas el intercambiador en forma de estrella presenta una mayor efectividad que el de tubos concéntricos, lo que se debe a las ventajas operacionales que le ofrece la geometría en forma de estrella.

CONCLUSIONES

Se ha desarrollado una herramienta para el análisis termohidráulico de un intercambiador de calor en forma de estrella empleando la hoja de cálculo Excel 5.0. De los resultados obtenidos se puede concluir que la malla propuesta, conformada por diez intervalos en la dirección radial y angular, y cuatro en la dirección axial, ofrece una gran exactitud en los resultados e independencia en cuanto al número de volúmenes finitos de control. Además, si bien emplear un mayor número de volúmenes ofrecería una solución más exacta, ello implicaría un aumento en el tiempo de cálculo del programa.

En cuanto a los valores que se introduzcan para las propiedades de los fluidos, es muy importante el criterio que se emplee para la evaluación de las mismas para poder obtener una mejor aproximación de la realidad. Por ello, las propiedades de los fluidos se pueden evaluar a una temperatura promedio ponderada que permite simular con buena exactitud el comportamiento real del intercambiador de calor.

Por otro lado, el programa le brinda al usuario la oportunidad de obtener una mejor aproximación del sistema físico, pues al realizar la refinación de los datos con la temperatura recomendada se evita la sobreestimación o la subestimación del comportamiento del intercambiador.

Estas características unidas a las virtudes, descritas en este trabajo, que ofrece el uso de Excel como herramienta básica en la programación de métodos numéricos de solución de problemas termohidráulicos mediante la técnica de los volúmenes finitos de control. Asimismo, el programa posee una gran versatilidad y confiabilidad para la simulación.

Por último, del análisis realizado se desprende que el intercambiador en forma de estrella presenta un mejor comportamiento térmico que el intercambiador de tubos concéntricos, debido a su mayor área de transferencia de calor, su compactación y su geometría.

REFERENCIAS

- Chung, B.T., y Hsia, R.P., 1994, "Laminar Flow Developing Heat Transfer in Circular Sector Ducts with H1 and H2 Boundary conditions", *Heat Transfer Engineering*, Vol. 15, No 4, pp. 56-65.
- Ko, C.L., 1994, "Finite Element Analysis of the Heat Transfer in Concentric-Tube Heat Exchangers", *J. Thermophysics Heat Transfer*, Vol. 8, No. 4, pp. 810-813.

Kakac, S., Shah, R.K., y Aung, W., 1987, "Handbook of Single-Phase Convective Heat Transfer", John Wiley, New York.

Lei, Q.M., and Trupp, A.C., 1990, "Forced Convection of Thermally Developing Laminar Flow in Circular Sector Ducts", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, No 8, pp. 1675-1683.

Manglik, R.M., and Bergles, A. E., 1988, "Laminar Flow Heat Transfer in a Semi-Circular Tube with Uniform Wall Temperature", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 31, No 3, pp. 625-636.

Patankar, S. V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere, Washington, D. C.

Rosen, E. M., 1987, "A Review of Spreadsheet Usage in Chemical Engineering Calculations", *Computers Chemical Engineering*, Vol 11, No. 6, pp. 723-726.

Rosen, E.M., 1990, "The Use of Lotus 1-2-3 Macros in Engineering Calculations", *Chemical Engineering Education* pp. 100-105.

Shah, R.K., y London, A.L., 1978, "Laminar Flow Forced Convection in Ducts", Academic Press, New York.

ABSTRACT

This work involved a numerical simulation of a star-type heat exchanger as shown in figure 1. The cylindrical tube, which is perfectly insulated to the surrounding is divided into eight circular sectors. The numerical simulation was carried out using a spreadsheet developed under Microsoft Excel 5.0 environment. The spreadsheet provides some appealing features for the analyst. because he/she does not need to use a "black box" program that may hide the solution method. The finite control volume approach was adopted to solve the momentum and energy equations, numerical examples are produced using a reduced number of control volumes. Numerical experiments were carried out with water-oil, water-air and water-water as working fluids. Curves of effectiveness vs. NTU are presented for different heat capacity ratios.

EFFECT OF TUBE-TO-TUBE CONDUCTION ON HEAT EXCHANGER PERFORMANCE

Ricardo Romero-Méndez, Mihir Sen, K.T. Yang, and Rodney L. McClain

Department of Aerospace and Mechanical Engineering
University of Notre Dame
Notre Dame, IN 46556, U.S.A.

SUMMARY

We study the effect of heat transfer between the tubes of a heat exchanger by conduction through the fins. Conduction in the fins not only enhances convective heat transfer to the over-tube fluid, but also increases tube-to-tube conduction. The former is desirable while the latter is not. In this work we develop a mathematical model to evaluate this conduction and to determine conditions under which it may or may not be neglected. The effect of parametric variation on the performance of a single-row plate-fin and tube heat exchanger is considered in some detail.

INTRODUCTION

A commonly used heat exchanger is the plate-fin and tube type in which the fins form a series of channels that create narrow passages for the external flow and act as extended surfaces to increase external heat transfer from the tubes. In this and other similar heat exchangers, thermal conduction through the tube wall and through the fins plays a crucial role in the overall heat transfer rate. The thermal resistance of the wall is usually negligible. Conduction in the fins, however, is a more complicated matter: on the one hand the fins are extended surfaces which enhance convective heat transfer to the over-tube fluid, and on the other they increase tube-to-tube conduction. The former is desirable while the latter, as we will show, is not.

In heat exchanger analysis it is usual to include the fins when calculating heat transfer enhancement to the over-tube fluid, but to neglect the tube-to-tube heat conduction that they also cause. This simplification leads to the problem of heat conduction in a rectangular fin with adiabatic conditions at its tip which can be easily resolved. The assumption can be justified for small temperature differences between adjacent tubes. At present it is not clear just how much error is incurred by this approximation. Several authors have recognized the possibility of longitudinal fin conduction and its effects on heat exchanger performance. Kroeger (1967), Mondt (1980), Chiou (1978; 1980), and Heun and Crawford (1994) reported on the effects of longitudinal fin conduction for different types of heat exchangers. None of them, however, studied the effect of tube-to-tube conduction for single-row plate-fin and tube heat exchangers that we do here.

In this work we consider the problem of tube-to-tube

heat transfer through the fins. We develop a mathematical model to evaluate the effect of heat conduction between adjacent tubes, and determine conditions under which it may or may not be neglected.

GOVERNING EQUATIONS

We consider the specific geometry of a single-row heat exchanger, shown in Fig. 1, formed by a number of straight sections and corresponding U-shaped return tubes that are insulated. If the fin density is high enough we can take the effect of the fins to be continuously and uniformly distributed along the length of each tube. With this continuum approach we will develop a system of ordinary differential equations for the steady-state in-tube fluid and tube-wall temperatures.

There are N sections of straight tube in the heat exchanger, each of length L . The tubes are numbered from top to bottom, starting from the top tube connected to the inlet and ending with the bottom tube leading to the outlet. The spatial coordinate in each tube is the distance x measured from the left end, as indicated in Fig. 1.

For tube j , where $1 \leq j \leq N$, we consider the heat balance on an element of length dx . For heat transferred from the fluid to the tube wall, we have

$$\dot{m}C dT_j = (-1)^j \pi d_i h_i (T_j - T_j^w) dx \quad (1)$$

where \dot{m} is the mass flow rate of the in-tube fluid, C is the specific heat of that fluid, $T_j(x)$ is its temperature, $T_j^w(x)$ is the tube-wall temperature, d_i is the inner diameter of the tube, and h_i is the inner heat transfer coefficient. The coefficient $(-1)^j$ takes into account the fact that the in-tube flow is in the positive x -direction

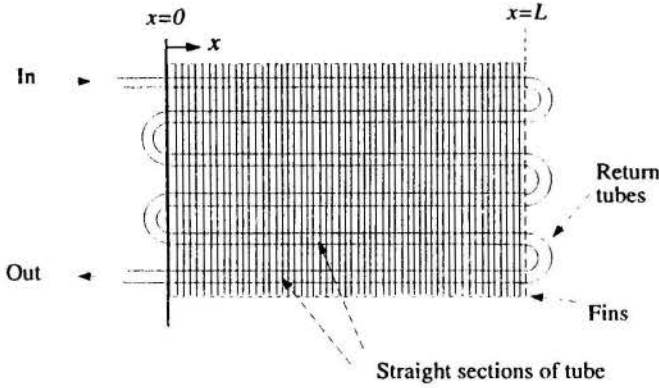


Figure 1: Single-row, plate-fin and tube heat exchanger.

for the odd numbered tubes, and in the negative x -direction for the even ones.

In the steady state all the heat acquired by the tube wall is transferred to the surrounding fluid, to the neighboring tubes, or is conducted along the tube. The corresponding heat balance for an element of length dx can be expressed as

$$\begin{aligned} \pi d_i h_i (T_j - T_j^w) dx = \\ (1 - n\delta_f) \pi d_o h_o (T_j^w - T_\infty) dx \\ + n(Q_j^- + Q_j^+) dx - k_w \frac{\pi}{4} (d_o^2 - d_i^2) \frac{d^2 T_j^w}{dx^2} dx \end{aligned} \quad (2)$$

where n is the number of fins per unit length, δ_f is the thickness of a fin assumed the same for all fins, d_o is the outer diameter of the tube, h_o is the outer heat transfer coefficient, T_∞ is the over-tube fluid temperature, and k_w is the thermal conductivity of the tube material. Q_j^- and Q_j^+ are the rates of heat transport through the fins in the direction of the neighboring tubes, $j-1$ and $j+1$ respectively. Part of this heat is ceded to the over-tube fluid, and part to the neighboring tubes.

Heat transfer through fins can be modeled by means of a one-dimensional analysis in which fin tip temperatures are the corresponding tube wall temperatures. For $2 \leq j \leq N-1$, we get

$$Q_j^- = \frac{\sqrt{2h_o k_f L_f^2 \delta_f}}{\sinh \beta} \left[(T_j^w - T_\infty) \cosh \beta - T_{j-1}^w - T_\infty \right] \quad (3)$$

and

$$Q_j^+ = \frac{\sqrt{2h_o k_f L_f^2 \delta_f}}{\sinh \beta} \left[(T_j^w - T_\infty) \cosh \beta - T_{j+1}^w - T_\infty \right] \quad (4)$$

where

$$\beta = P \sqrt{\frac{2h_o}{k_f \delta_f}}$$

L_f is the fin width (perpendicular to the paper in Fig. 1), k_f is the thermal conductivity of the fin material, and P is the distance between the centers of adjacent tubes. The first and last tubes are special cases, however, for which we use adiabatic tip conditions to get

$$Q_1^- = \sqrt{2h_o k_f L_f^2 \delta_f} (T_1^w - T_\infty) \tanh \frac{\beta}{2}$$

and

$$Q_N^+ = \sqrt{2h_o k_f L_f^2 \delta_f} (T_N^w - T_\infty) \tanh \frac{\beta}{2}$$

Nondimensionalization. The governing equations are nondimensionalized using

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{x}{L} \\ \psi_j(\xi) &= \frac{T_j - T_\infty}{T_{in} - T_\infty} \\ \theta_j(\xi) &= \frac{T_j^w - T_\infty}{T_{in} - T_\infty} \end{aligned}$$

where T_{in} is the in-tube fluid entrance temperature. Equations (1) and (2) become

$$\frac{d\psi_j}{d\xi} = (-1)^j \sigma (\psi_j - \theta_j) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \left[\alpha + \gamma (\coth \beta + \tanh \frac{\beta}{2}) + 1 \right] \theta_1 \\ &\quad - \frac{\gamma}{\sinh \beta} \theta_2 + \delta \frac{d^2 \theta_1}{d\xi^2} \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \psi_j &= -\frac{\gamma}{\sinh \beta} \theta_{j+1} + (\alpha + 2\gamma \coth \beta + 1) \theta_j \\ &\quad - \frac{\gamma}{\sinh \beta} \theta_{j-1} + \delta \frac{d^2 \theta_j}{d\xi^2} \\ &\quad \text{for } 2 \leq j \leq N-1 \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \psi_N &= \left[\alpha + \gamma (\coth \beta + \tanh \frac{\beta}{2}) + 1 \right] \theta_N \\ &\quad - \frac{\gamma}{\sinh \beta} \theta_{N-1} + \delta \frac{d^2 \theta_N}{d\xi^2} \end{aligned} \quad (8)$$

where

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\pi d_i h_i L}{\dot{m} C} \\ \alpha &= \frac{(1 - n\delta_f) d_o h_o}{d_i h_i} \\ \gamma &= \frac{n \sqrt{2h_o k_f L_f^2 \delta_f}}{\pi h_i d_i} \\ \delta &= \frac{k_w (d_o^2 - d_i^2)}{4L^2 h_i d_i} \end{aligned}$$

For typical heat exchangers δ is very small compared to the other parameters, meaning that axial conduction

along the tube wall is negligible. Neglecting the terms with δ , equations (6)–(8) can be rewritten as

$$\psi_1 = \kappa' \theta_1 - \epsilon \theta_2 \quad (9)$$

$$\psi_j = -\epsilon \theta_{j-1} + \kappa \theta_j - \epsilon \theta_{j+1} \quad (10)$$

for $2 \leq j \leq N-1$

$$\psi_N = -\epsilon \theta_{N-1} + \kappa' \theta_N \quad (11)$$

where

$$\epsilon = \frac{\gamma}{\sinh \beta}$$

$$\kappa' = \alpha + \gamma(\coth \beta + \tanh \frac{\beta}{2}) + 1$$

$$\kappa = \alpha + 2\gamma \coth \beta + 1$$

We now have a coupled set of N differential equations (5) and N algebraic equations (9)–(11) in the $2N$ unknowns: ψ_j and θ_j ($j = 1, \dots, N$), which represent the in-tube fluid temperatures respectively.

A set of boundary conditions is required for the differential equations. The only known temperature is that of the in-tube fluid at the entrance, so that

$$\psi_1(0) = 1 \quad (12)$$

Additionally, because the return U-tubes are considered insulated, we have a series of conditions

$$\psi_j(1) = \psi_{j+1}(1) \quad \text{if } j \text{ is odd} \quad (13)$$

$$\psi_j(0) = \psi_{j+1}(0) \quad \text{if } j \text{ is even} \quad (14)$$

which link the in-tube fluid and tube-wall temperatures of adjacent tubes. Conditions on θ_j can be derived from these using the algebraic equations (9)–(11).

ANALYTICAL SOLUTION

The dependent variables can be expressed in matrix form as

$$\Psi(\xi) = \begin{bmatrix} \psi_1(\xi) \\ \psi_2(\xi) \\ \vdots \\ \psi_{N-1}(\xi) \\ \psi_N(\xi) \end{bmatrix}$$

$$\Theta(\xi) = \begin{bmatrix} \theta_1(\xi) \\ \theta_2(\xi) \\ \vdots \\ \theta_{N-1}(\xi) \\ \theta_N(\xi) \end{bmatrix}$$

In terms of these variables, equations (5) and (9)–(11) become

$$\Psi' = \sigma S(\Psi - \Theta) \quad (15)$$

$$\Psi = A\Theta \quad (16)$$

where

$$S = \{(-1)^i \delta_{ij}\}$$

and

$$A = \begin{bmatrix} \kappa' & -\epsilon & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -\epsilon & \kappa & -\epsilon & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\epsilon & \kappa & -\epsilon & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\epsilon & \kappa & -\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & -\epsilon & \kappa & -\epsilon \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -\epsilon & \kappa' \end{bmatrix}$$

Eliminating Θ between equations (15) and (16), we get

$$\Psi' = \sigma S(I - A^{-1})\Psi \quad (17)$$

the solution to which is

$$\Psi(\xi) = \exp[\sigma S(I - A^{-1})\xi] \Psi(0) \quad (18)$$

All of the elements in $\Psi(0)$ are unknown except for $\psi_1(0)$. To find the remaining elements, we must use the linking conditions (13)–(14). First we evaluate equation (18) at $\xi = 1$ to give

$$\Psi(1) = C\Psi(0) \quad (19)$$

where

$$C = \exp[\sigma S(I - A^{-1})]$$

To complete the solution, the unknown elements in $\Psi(0)$ must be obtained using conditions (13)–(14). The procedure will be slightly different depending on whether the number of tubes N is even or odd and is described below.

Once $\Psi(0)$ is known the temperature at any location in any tube is given by equation (18). The tube-wall temperatures $\Theta(\xi)$ can be found from equations (9)–(11).

Even number of tubes. We use the following steps:

- Using condition (13), we simplify equation (19). Since $\psi_1(1) = \psi_2(1)$, we can take the difference of the first two rows of equation (19) to cancel both $\psi_1(1)$ and $\psi_2(1)$ to leave zero in the left side. Similarly, we take the difference between the third and fourth rows, and so on. Thus we get

$$\sum_{j=1}^N D_{i,j} \psi_j(0) = 0 \quad (20)$$

where

$$D_{i,j} = C_{2i-1,j} - C_{2i,j}$$

for $i = 1, \dots, \frac{N}{2}$.

- Next we introduce condition (14). Since $\psi_2(0) = \psi_3(0)$, we can add the second and third columns of \mathbf{D} in equation (20) to eliminate the unknown $\psi_3(0)$. Similarly, the fourth and fifth columns can be added, and so on. At the end of this process, equation (20) becomes

$$\sum_{j=2}^{N/2} (D_{i,2j-2} + D_{i,2j-1}) \psi_{2j-2}(0) + D_{i,N} \psi_N(0) = -D_{i,1} \psi_1(0) \quad (21)$$

for $i = 1, \dots, \frac{N}{2}$.

- Finally, since from condition (12) we know the right side of equation (21), we can solve it to give $\psi_{2j}(0)$, $j = 1, \dots, \frac{N}{2}$. Using condition (14) we get the rest of the elements in $\Psi(0)$.

Odd number of tubes. The procedure now is the following:

- We rewrite equation (19) in the alternative form

$$\Psi(0) = \mathbf{C}^{-1} \Psi(1) \quad (22)$$

- By introducing condition (14), we can simplify equation (22). For example, $\psi_2(0) = \psi_3(0)$, so that the difference between the second and third rows will give zero in the left side. Similarly, we take the difference between the fourth and fifth rows, and so on. In the end all elements in the left side will be zero, except for the first. We will have

$$F_i = \sum_{j=1}^N E_{i,j} \psi_j(1) \quad (23)$$

where

$$F_i = \begin{cases} \psi_1(0) & \text{for } i = 1 \\ 0 & \text{for } i = 2, 3, \dots, \frac{N+1}{2} \end{cases}$$

$$E_{i,j} = \begin{cases} C_{1,j}^{-1} \\ C_{2i-2,j}^{-1} - C_{2i-1,j}^{-1} & \text{for } i = 2, 3, \dots, \frac{N+1}{2} \end{cases}$$

$\psi_1(0)$ is known from condition (12).

- Now we introduce the condition (13) to simplify equation (23). Since $\psi_1(1) = \psi_2(1)$, the first two columns of \mathbf{E} can be added to eliminate $\psi_2(1)$. Similarly, the third and fourth columns can be added and $\psi_4(1)$ removed, and so on. The last column will be left intact. At the end of this process, we will have

$$\sum_{j=1}^{(N-1)/2} (E_{i,2j-1} + E_{i,2j}) \psi_{2j-1}(1) + E_{i,N} \psi_N(1) = F_i \quad (24)$$

where $i = 1, \dots, \frac{N+1}{2}$.

- Equation (24) can be solved to get $\psi_{2j-1}(1)$, $j = 1, \dots, \frac{N+1}{2}$. Using condition (13), all elements of $\Psi(1)$ can be determined; equation (22) then gives $\Psi(0)$.

HEAT TRANSFER RATES

Of interest to us are the heat rates with and without tube-to-tube conduction and their ratio R .

For the case of no tube-to-tube conduction an adiabatic condition in the line of symmetry between adjacent tubes is enforced. The in-tube fluid temperature for each tube becomes independent of those in adjacent tubes. The fluid exit temperature is that in a single straight tube of length NL . This temperature can be written as

$$\hat{\psi}_{out} = \exp \left[-\sigma \left(1 - \frac{1}{\kappa_e} \right) N \right]$$

where

$$\kappa_e = \alpha + 2\gamma \tanh \frac{\beta}{2} + 1$$

On the other hand, if we have tube-to-tube conduction, the exit temperature is

$$\psi_{out} = \begin{cases} \psi_N(0) & \text{for } N \text{ even} \\ \psi_N(1) & \text{for } N \text{ odd} \end{cases}$$

This can be found from the temperatures calculated in the previous section.

The ratio of the two heat transfer rates, R , can be expressed as

$$R = \frac{1 - \psi_{out}}{1 - \hat{\psi}_{out}} \quad (25)$$

RESULTS AND DISCUSSION

To obtain numerical results from the analytical solution, some matrix manipulation is required. The symbolic mathematics package Maple was used for this purpose. The effect of tube-to-tube conduction R was determined as a function of each one of the dimensionless parameters σ , α , β , γ and N in turn, while keeping the others constant. For all cases parameter R was less than unity indicating that tube-to-tube conduction always decreases the heat transfer from in-tube to over-tube fluid in the heat exchanger.

Fig. 2 shows the dependence of R on σ which controls the heat transfer between the in-tube fluid and the tube wall. For small σ , the temperature difference between adjacent tubes is small and tube-to-tube conduction is also small. As σ grows, the temperature difference between adjacent tubes increases, and with it the tube-to-tube conduction effect. There is a turning point at which this trend changes. For very large values of σ the solutions for even and odd number of tube rows become

different. When parameter σ becomes large, the fluid reduces considerably its temperature before leaving the first tube, and conduction along the fins is important only for fins near the entrance and negligible anywhere else. Since the fluid is heated or cooled easily it approaches the temperature of the fins which is almost that of the surrounding air at $\xi = 1$ and considerably different along location $\xi = 0$. As a consequence the temperature variation becomes periodic and the exit temperature depends on whether the number of tubes is even or odd. For odd number of tubes the fluid temperature at the exit of the heat exchanger approaches that of the surrounding over-tube fluid and tube-to-tube conduction effect is small. If the number of tubes is even the effect of tube-to-tube conduction is important.

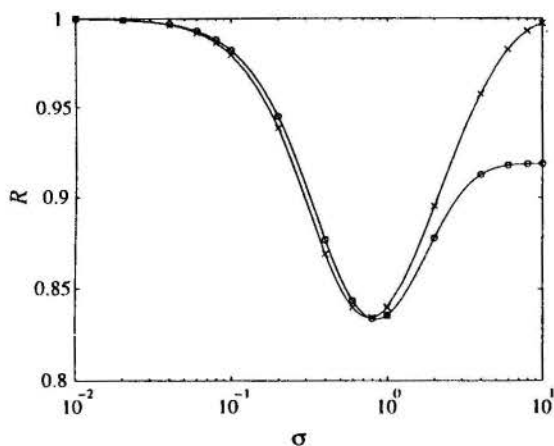


Figure 2: R vs. σ , with $\alpha = 0.02654$, $\beta = 0.007$, $\gamma = 40.0$. $\circ = 12$ tubes, $\times = 13$ tubes.

Fig. 3 illustrates the dependence of R on α which is related to the part of the heat that is transferred directly from the unfinned portions of the tubes to the surrounding over-tube fluid. A very small α means that the amount of heat transferred directly is negligible; all the heat from the in-tube fluid goes through the fins. Thus R tends to a constant as α becomes small. A very large α , on the other hand, is equivalent to considering the heat exchanger almost without fins; tube-to-tube conduction is small and R tends to unity.

Fig. 4 shows how R depends on β which is derived from the fin characteristics. For small β , the tubes can be considered to be close together. The heat transfer to the over-tube fluid is small; the temperature difference between adjacent tubes is also small, as is the tube-to-tube conduction. For large values of β the fins are sufficiently long so that their temperature approaches that of the surrounding over-tube fluid at some small distance away from the tubes. Thus tube-to-tube conduction is small and R tends to unity as β becomes large.

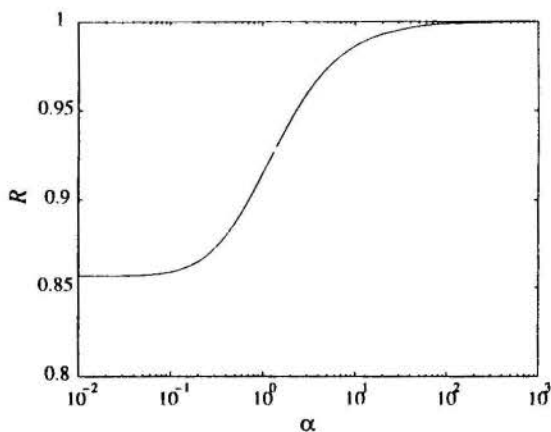


Figure 3: R vs. α , with $\sigma = 0.5$, $\beta = 0.007$, $\gamma = 40.0$, $N = 12$ tubes.

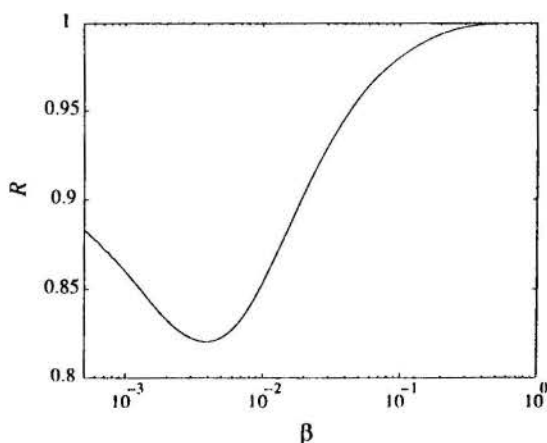


Figure 4: R vs. β , with $\sigma = 0.84$, $\alpha = 0.02654$, $\gamma = 40.0$, $N = 12$ tubes.

Fig. 5 shows the change of R for varying values of γ which is proportional to the thermal resistance of the fins. For very small values of γ tube-to-tube conduction through the fins is negligible. As γ grows tube-to-tube conduction becomes increasingly important because more heat is being conducted through the fins. When γ is very large the over-tube side resistance becomes negligible; the in-tube fluid approaches the ambient temperature before leaving the heat exchanger and tube-to-tube conduction is again not important.

Another factor affecting tube-to-tube conduction is the number of tubes. Fig. 6 shows the variation of R with N . We observe that tube-to-tube conduction tends to be unimportant as the number of tubes is increased. As N is increased so does the heat transfer area; the temperature at which the in-tube fluid leaves the heat exchanger approaches the temperature of the surrounding over-tube fluid. For a very small number of tubes also the importance of tube-to-tube conduc-

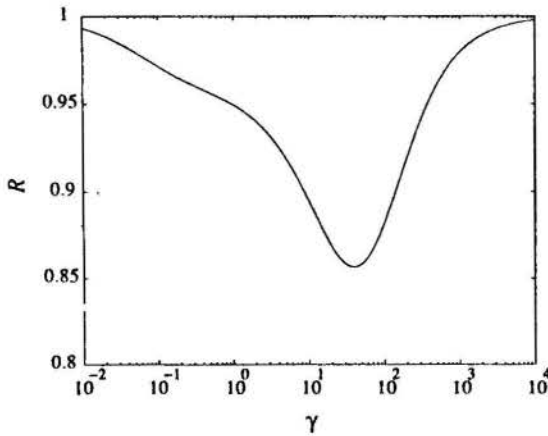


Figure 5: R vs. γ , with $\alpha = 0.02654$, $\sigma = 0.5$, $\beta = 0.007$, $N = 12$ tubes.

tion is sharply reduced. The heat exchanger more and more resembles a single tube with fins for which there is no tube-to-tube conduction.

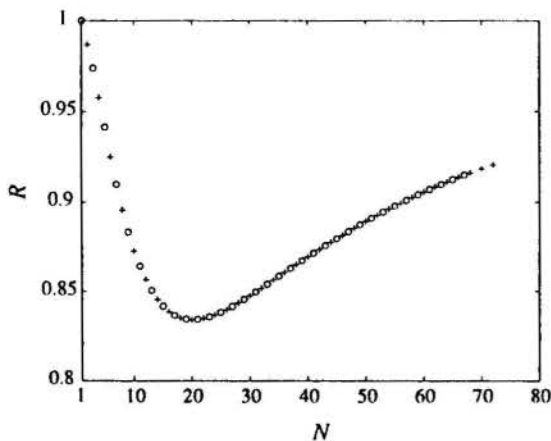


Figure 6: R vs. N , with $\alpha = 0.02654$, $\beta = 0.007$, $\gamma = 40.0$, $\sigma = 0.5$. + for even number of tubes, o for odd number of tubes.

CONCLUSIONS

The effect of tube-to-tube conduction in a heat exchanger is modeled here using a distributed effect of the fins. It is found that there may be a significant decrease in the heat transferred to the over-tube fluid compared to the case in which there is no tube-to-tube conduction. The graphical results shown here have up to a 15% decrease; we have found decreases of 20% for other parametric values.

As an example we apply the analysis to a specific heat exchanger. For a device with copper tubes and fins, with water inside the tubes and air outside, the following are reasonable quantities: $\dot{m} = 0.04$ kg/s,

$L = 0.6$ m, $P = 3$ cm, $L_f = 5$ cm, $n = 360$ m⁻¹, $\delta_f = 0.3$ mm, $d_o = 1.2$ cm, $d_i = 1.1$ cm, $h_o = 10$ W/m²K, $h_i = 3500$ W/m²K, $N = 24$. With these values we get $\alpha = 0.00278$, $\beta = 0.387$, $\gamma = 0.230$, $\delta = 1.66 \times 10^{-4}$, $\epsilon = 0.5806$, $\kappa = 2.252$, $\kappa' = 1.672$, and $\sigma = 0.4341$. We see that δ is small compared to κ , κ' and ϵ , confirming that terms corresponding to axial heat conduction along the tube in equations (6)–(8) are indeed negligible. Calculations show that $R = 0.995$, indicating that the effect of tube-to-tube conduction reduces the heat transfer rate less than 1%. However, if in this example we take $L = 3.6$ m and $N = 4$, we find that $R = 0.916$. Though the heat transfer area is the same, there is one-sixth the number of tubes and each one of them is six times as long. The difference in temperature between adjacent tubes is larger and tube-to-tube conduction becomes significant. In fact, the rate of heat transfer to the air is reduced by more than 8% due to this effect.

The present analysis shows that tube-to-tube heat conduction can reduce the heat transferred from the in-tube to the over-tube fluid. Thus the proper design of heat exchangers must not only include determination of heat transfer areas, but also the manner in which it is distributed.

ACKNOWLEDGMENTS

R.R.-M. is the recipient of a Mexican CONACyT-Fulbright Fellowship for which we are grateful. We also acknowledge the support of Mr. D.K. Dorini of BRGD-TNDR for this research.

REFERENCES

- Chiou, J. P., 1978, "The Effect of Longitudinal Heat Conduction on Crossflow Heat Exchangers," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 100, pp 346–351.
- Chiou, J. P., 1980, "The Advancement of Compact Heat Exchanger Theory Considering the Effects of Longitudinal Heat Conduction and Flow Nonuniformity," *ASME Heat Transfer Division*, Vol. 10, R. K. Shah, C.F. McDonald, and C. P. Howard, eds., pp 101–121.
- Heun, M. K., and Crawford, R. R., 1994, "Longitudinal Fin Conduction in Multipass Cross-Counterflow Finned-Tube Heat Exchangers," *ASHRAE Transactions*, Vol. 100, Number 1, pp 382–389.
- Kroeger, P. G., 1967, "Performance Deterioration in High Effectiveness Heat Exchangers Due to Axial Conduction," *Advances in Cryogenic Engineering*, Vol. 12, pp 363–372.
- Mondt, J. R., 1980, "Correlating the Effects of Longitudinal Heat Conduction on Exchanger Performance," *ASME Heat Transfer Division*, Vol. 10, R. K. Shah, C.F. McDonald, and C. P. Howard, eds., pp 123–134.



EFFECTO DE LA VARIACIÓN DE LAS PROPIEDADES TERMO FÍSICAS DE LOS FLUIDOS SOBRE LOS COEFICIENTES CONVECTIVOS EN INTERCAMBIADORES DE CALOR DE CARCASA Y TUBOS



Francisco García * y Julio Segura ***

Escuela de Ingeniería Mecánica, Facultad de Ingeniería,
 * Universidad Central de Venezuela, Caracas 1051, Venezuela
 ** Universidad Metropolitana, Caracas 1070, Venezuela

SUMARIO

En este trabajo se determinó el efecto que se produce al considerar el valor local de las propiedades termo físicas de los fluidos, sobre los coeficientes convectivos en intercambiadores de calor del tipo carcasa y haz de tubos. Para obtener la distribución de temperatura, se discretizó en elementos el intercambiador, lo que permitió calcular las propiedades termo físicas y los coeficientes convectivos locales, tanto del lado de la carcasa como del lado de los tubos. Con estos resultados se evaluó coeficiente convectivo promedio y se comparó con el obtenido por el método de diferencia de temperatura media logarítmica, obteniéndose una diferencia menor del dos por ciento lo cual no afecta el resultado final del intercambiador.

INTRODUCCIÓN

En el diseño térmico de equipos de intercambio de calor, las propiedades termo físicas de los fluidos que forman parte del proceso, son calculadas a la temperatura promedio, entre la entrada y la salida, sin tomar en cuenta la distribución de temperatura de las corrientes de los fluidos.

Por esta razón los autores del presente trabajo se plantearon el propósito de estudiar el efecto de la variación de las propiedades termo físicas de los fluidos sobre los coeficientes convectivos en intercambiadores de calor de carcasa y haz de tubos, considerando el promedio de las propiedades evaluadas a temperaturas locales y la incidencia de este efecto sobre el diseño definitivo de equipo.

DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURA

La distribución de temperatura de los fluidos se obtuvo mediante un programa de computación, que utiliza el método de elementos finitos aplicado a intercambiadores de calor de carcasa y haz de tubos, con la condición de que no ocurra cambio de fase en ninguno de los fluidos (Segura and Sánchez, 1992).

El volumen de control elemental se presenta en la figura 1 y en la figura 2.

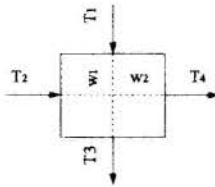


Figura 1 - Volumen de control elemental

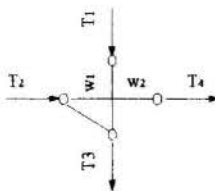


Figura 2 - Elementos finitos elementales

Haciendo un balance térmico en estado permanente en el volumen de control, tenemos:

$$Q = w_1 c_{p1} (T_3 - T_1) \tag{1}$$

$$Q = w_2 c_{p2} (T_4 - T_2) \tag{2}$$

$$Q = U_o A (T_4 - T_3) \tag{3}$$

donde:

- Q: Tasa de flujo de calor transferida.
- w₁: Tasa de flujo másico de la corriente de fluido 1.
- w₂: Tasa de flujo másico de la corriente de fluido 2.
- c_{p1}: Calor específico a presión constante de la corriente 1.
- c_{p2}: Calor específico a presión constante de la corriente 2.
- T₁: Temperatura de entrada de la corriente de fluido 1.
- T₃: Temperatura de salida de la corriente de fluido 1.
- T₂: Temperatura de entrada de la corriente de fluido 2.
- T₄: Temperatura de salida de la corriente de fluido 2.

Suponiendo la tasa de flujo de calor entregada por la corriente de fluido 1 igual a la recibida por la corriente de fluido 2, es decir, se establece el siguiente balance térmico.

$$Q = w_1 c_{p1} (T_3 - T_1) = w_2 c_{p2} (T_4 - T_2) = U_o A (T_4 - T_3) \tag{4}$$

COEFICIENTE CONVECTIVO O DE PELÍCULA

La formulación empleadas para calcular los coeficientes convectivos o de película, forman parte de un procedimiento de cálculo para diseño térmico y/o evaluación térmica de intercambiadores de calor del tipo carcasa y haz de tubos (García, 1992), el cual fue implementado a través de un programa de computación denominado "I_CALOR" por Segura y García (1994).

El coeficiente convectivo o de película interno basado en el área de la superficie externa de los tubos, se define como:

Si $Re \geq 10000$

$$h_{io} = \frac{22k}{do} Re^{0.8} Pr^{0.4} \left(\frac{\mu_m}{\mu_w} \right)^{0.167} \tag{5}$$

Si $Re \leq 2000$

$$h_{io} = \frac{10^3 k}{d_o} \left[2.5 + 4.5(Re + \gamma)\lambda \right]^{0.37} Pr^{0.17} \left(\frac{\mu_m}{\mu_w} \right)^{0.14} \sigma \quad (6)$$

(6)

Si $2000 \leq Re \leq 10000$

$$h_{io} = \eta h_{io(Re \leq 2000)} + (1 - \eta) h_{io(Re \geq 10000)} \quad (7)$$

El coeficiente convectivo o de película externo, se define como:

$$h_o = 7.5 c_p GXH (ji)_n \left(\frac{k}{c_p \mu_m} \right)^{2/3} \left(\frac{\mu_m}{\mu_w} \right)^{0.147} \beta \quad (8)$$

donde:

h_{io} : Coeficiente de película interno basado en el área de la superficie externa de los tubos.

h_o : Coeficiente convectivo o de película externo.

Re : Número de Reynolds.

Pr : Número de Prandtl.

μ_m : Viscosidad a temperatura media.

μ_w : Viscosidad a temperatura de pared.

k : Conductividad térmica del material.

c_p : Calor específico a presión constante.

d_o : Diámetro interno de los tubos.

GXH : Velocidad efectiva del flujo másico para la transferencia de calor.

$(ji)_n$: Número de Stanton corregido.

β : Factor de corrección de transferencia de calor en el corte de los deflectores.

γ : Factor de corrección de transferencia de calor por la fila de tubos.

λ : Factor geométrico de la longitud de los tubos.

σ : Factor de corrección para fluidos de baja viscosidad.

PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

El procedimiento de cálculo para determinar el efecto de la variación de las propiedades termo físicas de los fluidos sobre los coeficientes convectivos en intercambiadores de calor de carcasa y haz de tubos, es el siguiente:

- Realizar el diseño térmico del equipo, según procedimiento de cálculo implementado mediante el programa de computación I_CALOR (Segura y García, 1994), según los requerimientos del proceso.
- Obtener la distribución de temperatura de los fluidos que intervienen en el proceso, mediante la utilización de un programa de computación, que utiliza el método de elementos finitos aplicados a intercambiadores de calor de carcasa y haz de tubos (Segura and Sánchez, 1992).
- Discretizar en elementos el intercambiador, con la distribución de temperatura.
- Calcular las propiedades termo físicas locales de los fluidos, en los distintos elementos.
- Calcular el coeficiente convectivo local, tanto del lado de la carcasa como del lado de los tubos, a partir de las propiedades locales.
- Calcular el promedio de los coeficientes convectivos locales, tanto del lado de la carcasa como del lado de los tubos.

- Comparar el coeficiente convectivo calculado en el punto anterior, con el coeficiente convectivo calculado a partir del procedimiento de cálculo para diseño térmico de intercambiadores de calor de carcasa y haz de tubos (I_CALOR) y determinar el porcentaje de variación.

RESULTADOS

A continuación se presenta el efecto de la variación de las propiedades termo físicas de los fluidos sobre los coeficientes convectivos en dos intercambiadores de calor de carcasa y haz de tubos de dimensiones 30-94 tipo AES y 31-192 tipo AES respectivamente. Los resultados obtenidos, son representativos de este tipo de intercambiadores, ya que el efecto en la variación, fue de igual magnitud en el resto de las experiencias realizadas.

Intercambiador N° 1: En la Tabla 1, se presentan los parámetros mas relevantes del diseño térmico del intercambiador de dimensiones 30-94 tipo AES.

Tabla 1- Datos del Intercambiador Número Uno (30-94 tipo AES)

	Carcasa	Tubos
Fluido	Agua	Agua
Temperatura de entrada [°C]:	70,00	20,00
Temperatura de salida [°C]:	50,00	40,00
Velocidad fluido en tubos [m/s]:		0,44
Calor intercambiado [KW]:		1253,70
Área superficial total [m ²]:		69,20
Coefficiente global de calor, U [W/m ² °C]		671,00
Diámetro externo de los tubos [mm]		25,40
Espesor de los tubos [mm]		2,11
Longitud de los tubos [m]		2,40
Distancia entre centros (Pt) [mm]		31,75
Disposición de los tubos		30°
Número de tubos		392
Numero de pasos por tubo		4
Diámetro interno de la carcasa [mm]		751,00
Numero de deflectores		4

En la figura 3 se muestra la malla de elementos finitos y la distribución de temperatura en el intercambiador número uno.

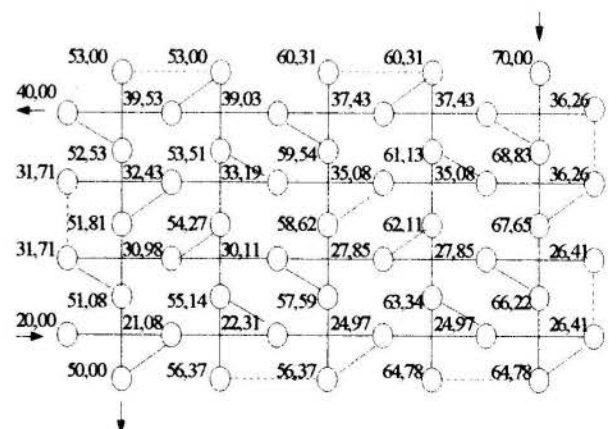


Figura 3 - Malla de elementos finitos y distribución de temperatura en el intercambiador

De la figura 4 a la 6, se presentan las variaciones de las propiedades termo físicas del fluido del lado de los tubos con la temperatura.

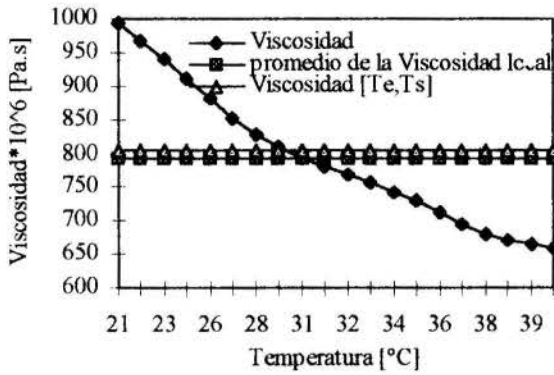


Figura 4 - Variación de la viscosidad con la temperatura

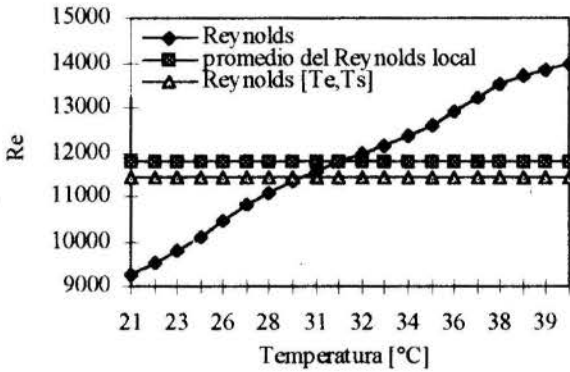


Figura 5 - Variación del número de Reynolds con la temperatura

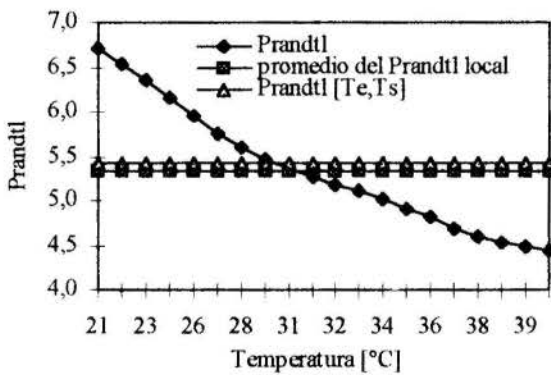


Figura 6 - Variación del número de Prandtl con la temperatura

En la figura 7, se muestra la variación del coeficiente convectivo del lado de los tubos con la temperatura.

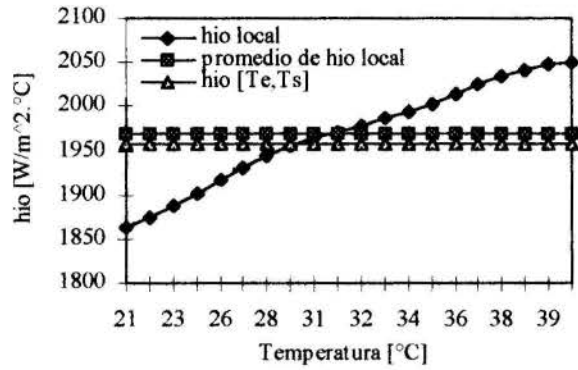


Figura 7 - Variación del coeficiente convectivo del lado de los tubos con la distribución de temperatura

En la figura 8 y 9, se presentan las variaciones de las propiedades termo físicas del fluido del lado de la carcasa con la temperatura.

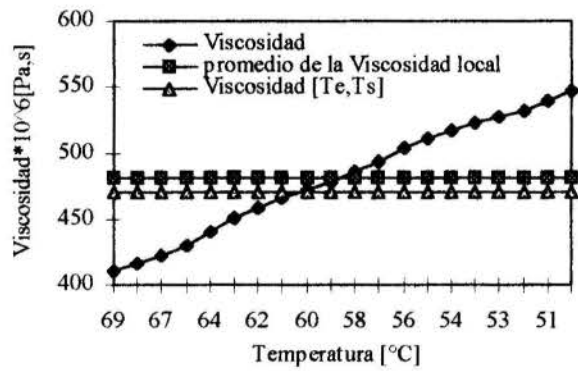


Figura 8 - Variación de la viscosidad con la temperatura

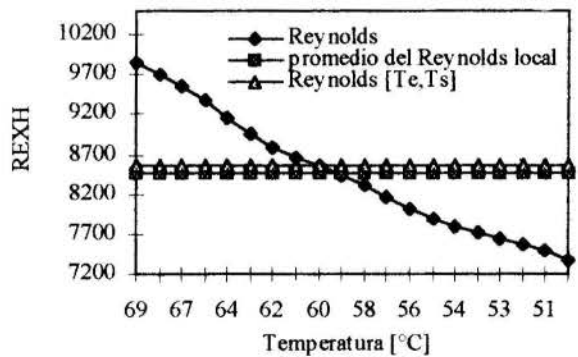


Figura 9 - Variación del número de Reynolds con la temperatura

En la figura 10, se muestra la variación del coeficiente convectivo del lado de la carcasa con la temperatura.

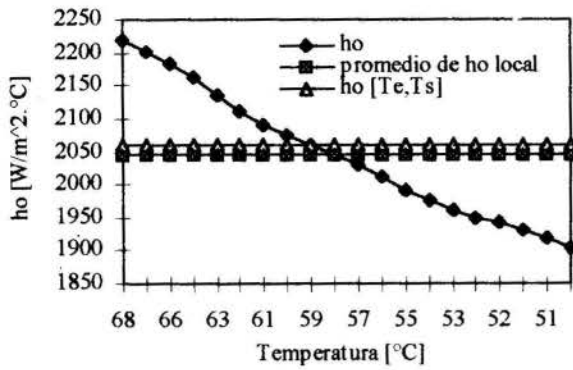


Figura 10 - Variación del coeficiente convectivo del lado de la carcasa con la temperatura

Intercambiador N° 2: En la Tabla 2, se presentan los parámetros mas relevantes del diseño térmico del intercambiador de dimensiones 31-192 tipo AES.

Tabla 2- Datos del Intercambiador Número Dos (31-192 tipo AES)

	Carcasa	Tubos
Fluido	Agua	Agua
Temperatura de entrada [°C]:	76,00	25,00
Temperatura de salida [°C]:	53,00	48,00
Velocidad fluido en tubos [m/s]:	0,37	
Calor intercambiado [KW]:	2885,58	
Área superficial total [m²]:	173,91	
Coefficiente global de calor, U [W/m² °C]	689,00	
Diámetro externo de los tubos [mm]	25,40	
Espesor de los tubos [mm]	2,11	
Longitud de los tubos [m]	4,88	
Distancia entre centros (Pt) [mm]	31,75	
Disposición de los tubos	30°	
Número de tubos	460	
Numero de pasos por tubo	2	
Diámetro interno de la Carcasa [mm]	790,00	
Numero de deflectores	6	

En la figura 11 se muestra la malla de elementos finitos y la distribución de temperatura en el intercambiador número dos.

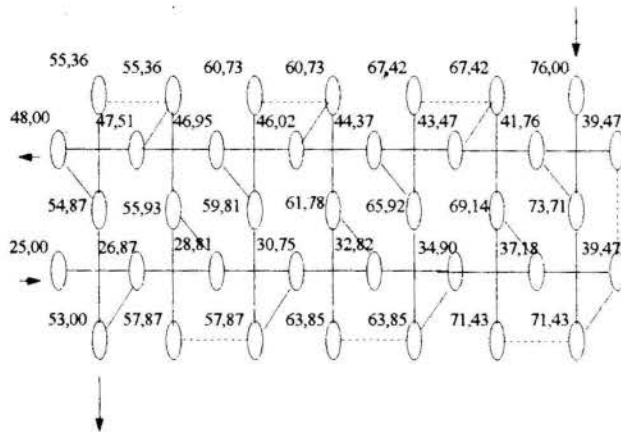


Figura 11 - Malla de elementos finitos y distribución de temperatura en el intercambiador

De la figura 12 a la 14 se presentan las variaciones de las propiedades termo físicas del fluido del lado de los tubos con la temperatura

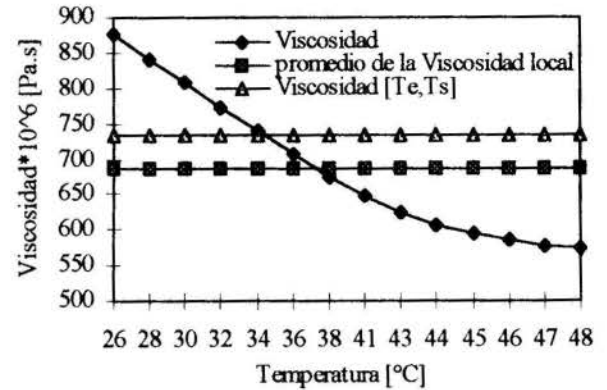


Figura 12 - Variación de la viscosidad con la temperatura

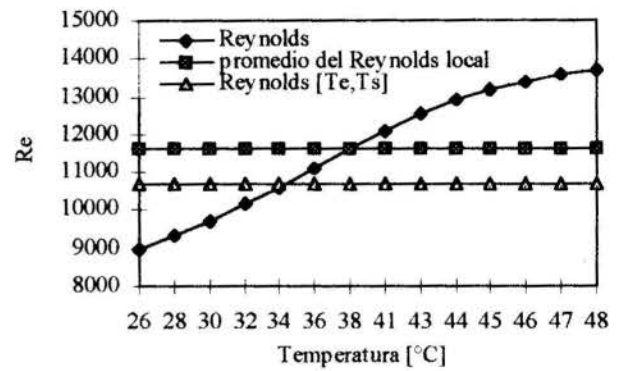


Figura 13 - Variación del número de Reynolds con la temperatura

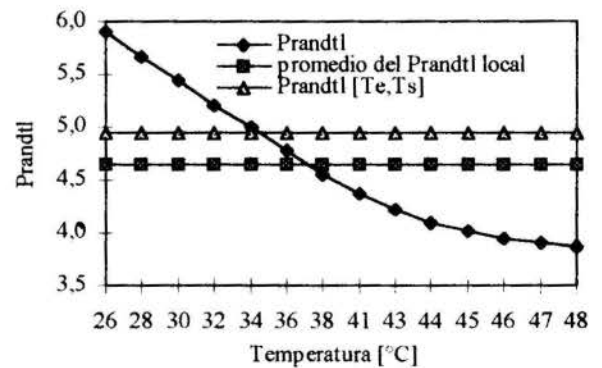


Figura 14 - Variación del número de Prandtl con la temperatura

En la figura 15, se muestra la variación del coeficiente convectivo del lado de los tubos con la temperatura.

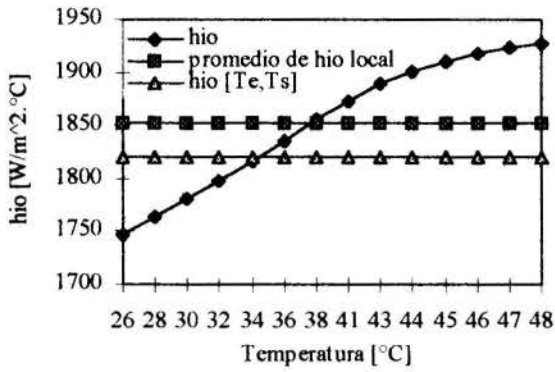


Figura 15 - Variación del coeficiente convectivo del lado de los tubos con la temperatura

En la figura 16 y 17, se presentan las variaciones de las propiedades termo físicas del fluido del lado de la carcasa con la temperatura.

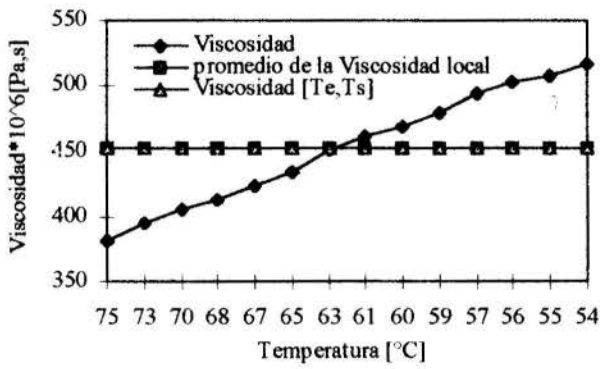


Figura 16 - Variación de la viscosidad con la temperatura

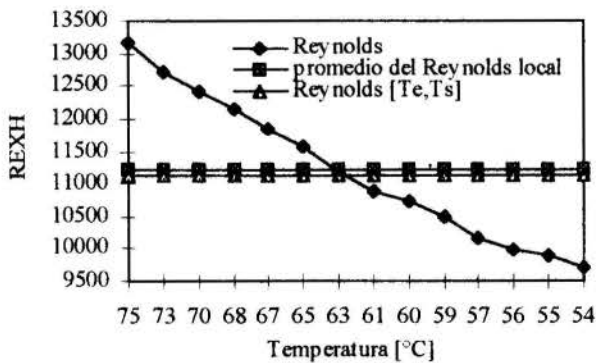


Figura 17 - Variación del número de Reynolds con la temperatura

En la figura 18, se muestra la variación del coeficiente convectivo del lado de la carcasa con la temperatura.

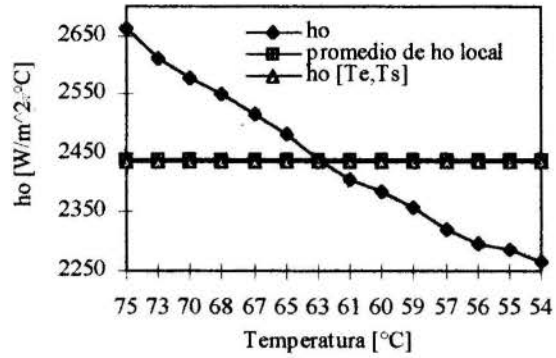


Figura 18 - Variación del coeficiente convectivo del lado de la carcasa con la temperatura

En La tabla 3, se presenta un cuadro comparativo de los coeficientes convectivos para los intercambiadores uno y dos tanto del lado de la carcasa como del lado de los tubos.

Tabla 3- Resumen de resultados

Coefficiente convectivo [W/m² °C]	Intercambiador número uno	Intercambiador número dos
• Promedio del coeficiente convectivo local lado tubos (h_{iop})	1969	1853
• Sin considerar la distribución de temperatura lado tubos (h_o)	1959	1820
• $(1-h_{iop}/h_o)*100$	-0,51%	-1,81%
• Promedio del coeficiente convectivo local lado carcasa (h_{op})	2045	2441
• Sin considerar la distribución de temperatura lado carcasa (h_o)	2062	2435
• $(1-h_{op}/h_o)*100$	0,82	-0,25

CONCLUSIONES

De los resultados obtenidos se puede concluir que el efecto de la variación de las propiedades termo físicas de los fluidos, sobre el cálculo de los coeficientes convectivos en intercambiadores de calor de carcasa y tubos, está en el orden del mas/menos dos por ciento.

El efecto de esta diferencia sería de consideración si el error involucrado en las correlaciones empíricas para el cálculo de dichos coeficientes fuera del mismo orden. De lo contrario puede despreciarse sin perder precisión en el cálculo, evaluando las propiedades a la temperatura promedio entre la entrada y la salida.

Con miras a lograr una mayor precisión en el cálculo de los coeficientes convectivos, sería deseable el desarrollo de correlaciones empíricas que se ajusten mejor a los valores experimentales.

REFERENCIAS

García, F., 1992, "Desarrollo de un procedimiento de cálculo para diseño térmico y/o evaluación térmica de intercambiadores de calor del tipo carcasa - haz de tubos", Tesis Ing. Mecánico, Facultad de Ingeniería, Universidad central de Venezuela, Caracas.

Segura, J. and Sánchez, 1992, "Temperature Distribution in Shell-and-Tube Heat Exchangers by Finite-Element-Method", Proceeding 2nd. Int. Congress of Energy, Environment and Technological Innovation, Rome, Oct. 12-16, 231-235.

Segura, J., García, F. and Finol E., 1994, "Desarrollo de un procedimiento de cálculo para el diseño térmico y/o evaluación térmica de intercambiadores de calor de carcasa y tubos", 5to. Congreso Latinoamericano de Transferencia de Calor y Materia, Caracas, Oct. 24-27, IID-4.1-IID-4.11.

TEMA, Standards of the Tubular Exchanger Manufacturers Association, 1988, 7th. De., Tarrytown.

ABSTRACT

In this work the effect that it produces upon considering the local value of the thermo-physical properties of the fluids, on the convective coefficients in shell-and-tube heat exchangers, was determined. In order to get the temperature distribution, the exchangers was discretted in elements, which allowed to compute the thermo-physical properties and the local convective coefficients, so much of the shell side like of the tubes side. With these outputs mean convective coefficients were evaluated and were compared with the gotten by the method of logarithmic-mean-temperature-difference, getting a difference least that two percent which doesn't affect the final result of the exchanger.

ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO TÉRMICO DE UN INTERCAMBIADOR DE DOBLE TUBO UTILIZADO COMO RECUPERADOR EN UN SISTEMA DE ABSORCIÓN

José Fernández-Seara, Jesús Iglesias, Manuel Vázquez

Area de Máquinas y Motores Térmicos

Universidad de Vigo

36200 - Vigo - Spain

RESUMEN

El artículo describe el estudio realizado sobre el comportamiento térmico de un intercambiador de calor de doble tubo en horquilla múltiple con el objetivo de conocer la influencia de los distintos parámetros de diseño en su prestación térmica y eficiencia, así como su régimen transitorio, cuando se utiliza como recuperador de calor entre las disoluciones fuerte y débil de un sistema de refrigeración por absorción con amoníaco-agua.

INTRODUCCION

En las últimas décadas ha resurgido el interés en el estudio de los sistemas de absorción, causado principalmente por la necesidad de un mejor aprovechamiento de la energía y por el efecto que su consumo desorbitado está ejerciendo sobre el medio ambiente. Los sistemas de refrigeración por absorción con amoníaco-agua constituyen una alternativa de futuro a los sistemas de compresión cuando aquellos pueden accionarse mediante calores residuales o energía solar y cuando las temperaturas de producción de frío no son excesivamente bajas. Además, la utilización del amoníaco como refrigerante ofrece las ventajas de una dilatada experiencia en su uso y su efecto inocuo sobre el deterioro de la capa de ozono y el efecto invernadero. Los estudios para la mejora de la eficiencia de los sistemas de absorción se dirigen hacia la utilización de nuevos ciclos, el uso de nuevos pares absorbente-refrigerante y la optimización en el diseño de los componentes del sistema. En esta última dirección se encuadra el trabajo que se expone en este artículo.

La utilización de un intercambiador como recuperador de calor entre la disolución débil a elevada temperatura, procedente de la torre de destilación hacia el absorbedor y la disolución fuerte a baja temperatura, que circula en sentido contrario a la anterior (ver Fig. 1), es junto con el rectificador, un componente muy importante para la mejora de la eficiencia de los sistema de absorción con amoníaco-agua (Stoecker y Reed, 1971).

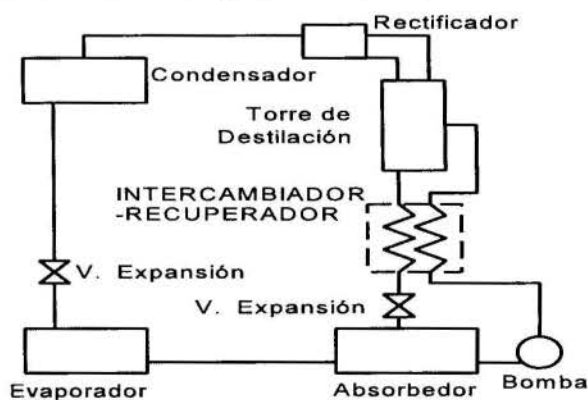


Figura 1 - Situación del intercambiador en un sistema de absorción con amoníaco-agua y ciclo simple

Los intercambiadores de doble tubo son los comúnmente utilizados en esta aplicación, debido a su sencillo proceso de construcción con los materiales requeridos para evitar su corrosión por las disoluciones de amoníaco, si bien en la actualidad existen intentos de introducir los intercambiadores compactos de placas, como puede verse en los trabajos de Becker (1989), Masaharu (1991) o en la instalación descrita por Bassols et al. (1993), aunque su proceso de fabricación resulta, todavía, complicado y costoso. Por ello y dentro del objetivo de optimizar todos los componentes del sistema de absorción para mejorar su rendimiento, se ha elaborado un modelo matemático que permite conocer la influencia de los distintos parámetros de diseño y el estudio del régimen transitorio en los intercambiadores de doble tubo y horquilla múltiple, de forma semejante a la utilizada por Infante Ferreira et al. (1994).

En la Fig. 2 se muestra el esquema del tipo de intercambiador considerado, en el que los fluidos circulan en contracorriente, uno por el tubo interior y el otro por la región anular.

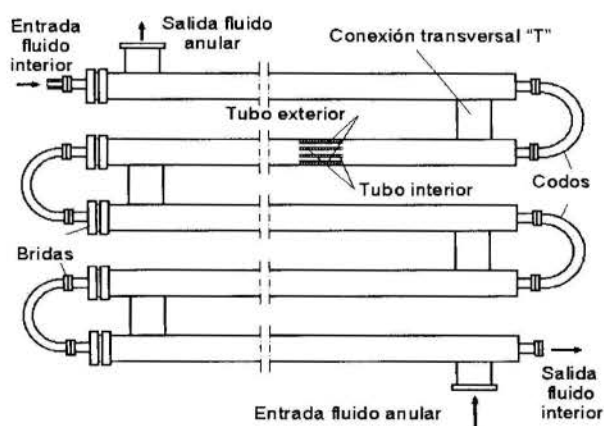


Figura 2 - Intercambiador de doble tubo y horquilla múltiple

Es de destacar que, aunque en este trabajo se utiliza dicho modelo para el análisis del intercambiador como un componente de un sistema de absorción, el modelo es general y podría usarse para el estudio de estos intercambiadores en cualquier otra aplicación, sin más que considerar, en cada caso, las propiedades de los fluidos entre los que se intercambia calor.

FORMULACION DEL MODELO

Para la elaboración del modelo matemático se considera el sistema intercambiador dividido en los siguientes subsistemas: fluido interior, tubo interior, fluido anular y tubo exterior, además del ambiente. El estudio se realiza de forma independiente para los tramos rectos de intercambiador (doble tubo), los codos del tubo interior y las conexiones en "T" entre los tubos exteriores, teniendo en cuenta, en cada caso, los subsistemas que interaccionan y utilizando las ecuaciones generales de conservación de la masa y energía (Welty, 1984). Las hipótesis generales consideradas para los fluidos han sido: que son incompresibles, flujo unidireccional, que su temperatura en una sección transversal es independiente de las coordenadas radial y angular y que el flujo de calor axial es despreciable frente al radial. En los tubos se considera como temperatura característica la de su sección media.

En las siguientes ecuaciones, que constituyen el modelo matemático, se ha considerado como sentido positivo el de circulación del fluido interior y en ellas T designa la temperatura [°C], t el tiempo [s], z la coordenada axial [m], u la velocidad de circulación de los fluidos [m/s], M la masa [kg], A la sección transversal [m²], ρ la densidad [kg/m³], Cp el calor específico [kJ/kg °C], λ la conductividad térmica [kW/m °C] y φ la densidad de flujo de calor [kW/m²]. Los subíndices hacen referencia a: fi fluido interior, ti tubo interior, fa fluido anular, te tubo exterior, am ambiente, X conexión en "T" entre los tubos exteriores, e entrada y s salida. Las magnitudes geométricas se representan en las figuras correspondientes.

Tramos Rectos (Doble Tubo). Se considera un elemento diferencial de longitud dz, tal como se muestra en la Fig.3.

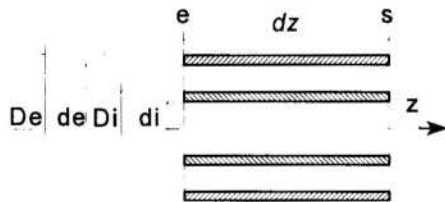


Figura 3 - Elemento diferencial de doble tubo

En él se analiza cada uno de los subsistemas: fluido interior, tubo interior, fluido anular y tubo exterior. De la aplicación de las ecuaciones generales de conservación de la masa y energía y teniendo en cuenta las hipótesis citadas anteriormente, se obtienen en cada uno de ellos las siguientes ecuaciones:

Fluido interior

$$\rho_{fi} C_{p_{fi}} \frac{\partial T_{fi}}{\partial t} + \rho_{fi} C_{p_{fi}} u_{fi} \frac{\partial T_{fi}}{\partial z} = \varphi_{fi-ti} \frac{4}{d_i} \quad (1)$$

Tubo interior

$$M_{ti} C_{p_{ti}} \frac{\partial T_{ti}}{\partial t} = \lambda_{ti} A_{ti} \left[\left(\frac{\partial T_{ti}}{\partial z} \right)_e - \left(\frac{\partial T_{ti}}{\partial z} \right)_s \right] +$$

$$+ \varphi_{ti-fi} \pi d_i dz + \varphi_{ti-te} \pi D_i dz \quad (2)$$

Fluido Anular

$$\rho_{fa} C_{p_{fa}} \frac{\partial T_{fa}}{\partial t} - \rho_{fa} C_{p_{fa}} u_{fa} \frac{\partial T_{fa}}{\partial z} = \varphi_{fa-ti} \frac{4D_i}{d_e^2 - D_i^2} + \varphi_{fa-te} \frac{4d_e}{d_e^2 - D_i^2} \quad (3)$$

Tubo Exterior

$$M_{te} C_{p_{te}} \frac{\partial T_{te}}{\partial t} = \lambda_{te} A_{te} \left[\left(\frac{\partial T_{te}}{\partial z} \right)_e - \left(\frac{\partial T_{te}}{\partial z} \right)_s \right] + \varphi_{te-fa} \pi d_e dz + \varphi_{te-am} \pi D_e dz \quad (4)$$

Codos de unión de los tubos interiores. Estos se consideran divididos en elementos diferenciales, tal como se indica en la Fig. 4. En ellos se analizan el fluido interior y el tubo interior, las ecuaciones que se obtienen son:

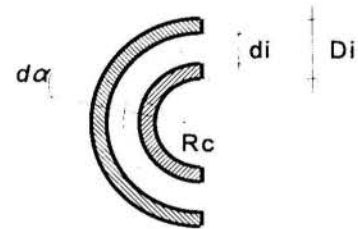


Figura 4 - Codo del tubo interior

Fluido Interior

$$\rho_{fi} C_{p_{fi}} \frac{\partial T_{fi}}{\partial t} + \frac{\rho_{fi} C_{p_{fi}} u_{fi}}{R_c} \frac{\partial T_{fi}}{\partial \alpha} = \varphi_{fi-ti} \frac{4}{d_i} \quad (5)$$

Tubo Interior

$$M_{ti} C_{p_{ti}} \frac{\partial T_{ti}}{\partial t} = \lambda_{ti} \frac{A_{ti}}{R_c} \left[\left(\frac{\partial T_{ti}}{\partial \alpha} \right)_e - \left(\frac{\partial T_{ti}}{\partial \alpha} \right)_s \right] + \varphi_{ti-fi} \pi d_i R_c d\alpha + \varphi_{ti-am} \pi D_i R_c d\alpha \quad (6)$$

Conexiones en "T" entre los tubos exteriores. En ellas se considera el fluido anular y el tubo, si bien las dimensiones de éste no coinciden normalmente con las de los tramos rectos. Los elementos diferenciales para la obtención de las ecuaciones se consideran tal como se indica en la Fig. 5.

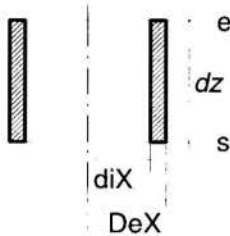


Figura 5 - Elemento diferencial de una conexión en "T"

Las ecuaciones que se obtienen son:

Fluido Anular

$$\rho_{fa} C_{pfa} \frac{\partial T_{fa}}{\partial t} - \rho_{fa} C_{pfa} u_{faX} \frac{\partial T_{fa}}{\partial z} = \varphi_{fa-iX} \frac{4}{d_{iX}} \quad (7)$$

Tubo Exterior

$$M_{iX} C_{p_{iX}} \frac{\partial T_{iX}}{\partial t} = \lambda_{iX} A_{iX} \left[\left(\frac{\partial T_{iX}}{\partial z} \right)_e - \left(\frac{\partial T_{iX}}{\partial z} \right)_s \right] + \varphi_{iX-fa} \pi d_{iX} dz + \varphi_{iX-am} \pi D_{eX} dz \quad (8)$$

Densidades de Flujo de Calor y Coeficientes de Transmisión. Las densidades de flujo de calor entre los subsistemas que interaccionan en cada caso responden a la fórmula genérica de:

$$\varphi_{s1-s2} = U_{12} (T_{s1} - T_{s2}) \quad (9)$$

siendo: U_{12} el coeficiente global de transmisión de calor [$\text{kW/m}^2\text{°C}$] y T_{s1} y T_{s2} las temperaturas de cada uno de los subsistema [°C].

Los coeficientes globales de transmisión de calor se obtienen como la inversa de la suma de la resistencia térmica por convección entre cada fluido y la superficie correspondiente y la resistencia por conducción de la pared del tubo hasta su sección central.

Los coeficientes de convección se obtienen de forma local a lo largo de todo el intercambiador, evaluando puntualmente las propiedades de los fluidos. Cuando éstos fluyen por la sección interior completa de un tubo (fluido interior-tubo interior y fluido exterior-"T" de conexión) se calculan según Hausen (1943) para régimen laminar y según Gnielinsky (1976) para régimen turbulento. En la región anular se calculan según las fórmulas propuestas en VDI-Wärmeatlas (1984). Los coeficientes de convección entre las superficies de tubo en contacto con el ambiente exterior se obtienen según Baehr (1954) y Jakob (1949).

IMPLEMENTACION DEL MODELO

Para la implementación del modelo descrito anteriormente se han discretizado las ecuaciones diferenciales utilizando para ello el Método Implícito de Diferencias Finitas, se han definido las condiciones iniciales del problema y se ha establecido un proceso de cálculo en el cual iterando con la temperatura de salida de uno de los fluidos, se puede resolver el sistema de ecuaciones en uno de los elementos de entrada y sucesivamente en los elementos contiguos.

Discretización de las Ecuaciones. Para la discretización de las ecuaciones diferenciales que constituyen el modelo, se ha considerado como temperatura característica del fluido interior la de salida de cada elemento y para el fluido anular la de entrada en el mismo. Para ambos tubos se considera la temperatura en el centro del elemento y en su sección media, tal como se indica en la Fig. 6.

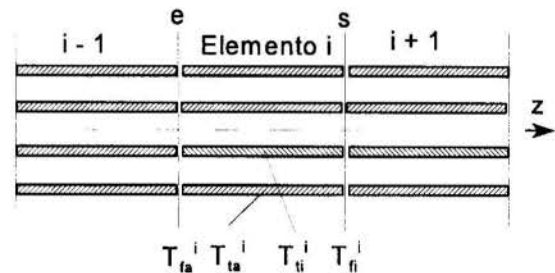


Figura 6. Elemento discreto de tubo de longitud Δz

Los codos del tubo interior y las conexiones en "T" de los tubos exteriores, se han discretizado como elementos únicos de longitudes πR_c y $2R_c - D_e$, respectivamente. Con el fin de evitar plantear y resolver un sistema global de todo el intercambiador, se ha considerado la hipótesis adicional de despreciar el calor intercambiado por conducción entre los elementos de tubo. De esta forma es posible resolver el sistema de ecuaciones de cada elemento de forma separada, obteniendo en cada caso las T_{fi}^i , T_{fa}^i , T_{ti}^i y T_{ta}^i como función de las temperaturas características del elemento $i-1$ y las del elemento i en el instante de tiempo anterior.

Condiciones Iniciales. Para comenzar el proceso de resolución es necesario establecer las distribuciones de temperatura en cada subsistema en el instante inicial. Estas se han definido tomando, $t=0$, cuando ambos fluidos se cruzan en el interior del intercambiador. Así, se determina el instante en que ambos fluidos se cruzan teniendo en cuenta la velocidad de circulación de cada uno de ellos y se obtienen las distribuciones de temperatura en cada uno de los fluidos y de los tubos que le rodean, considerando que en la región de paso adyacente existe aire a temperatura ambiente. Dichas distribuciones de temperatura se toman como condiciones iniciales para el proceso general de resolución.

Proceso de Cálculo. El proceso general de cálculo se muestra de forma esquemática en la Fig. 7. En él, se parte de las condiciones de entrada y caudales de cada uno de los fluidos, de las condiciones que definen el ambiente (temperatura y humedad) y de las características físicas y geométricas del intercambiador. Se definen los parámetros de análisis: tiempo total de operación, número de intervalos de tiempo y el número de elementos a considerar por tubo.

Programación. El proceso de cálculo descrito anteriormente se ha implementado mediante un programa en Fortran 77. En las aplicaciones en las que se ha utilizado el programa con intervalos de tiempo superiores a 60 s y longitudes de elementos de 0.1 m no se ha encontrado ningún tipo de problemas de estabilidad en el método. El tiempo de ejecución para los casos que se describen en el apartado de resultados es, aproximadamente, de unos 300 s en un Pentium a 100 MH.

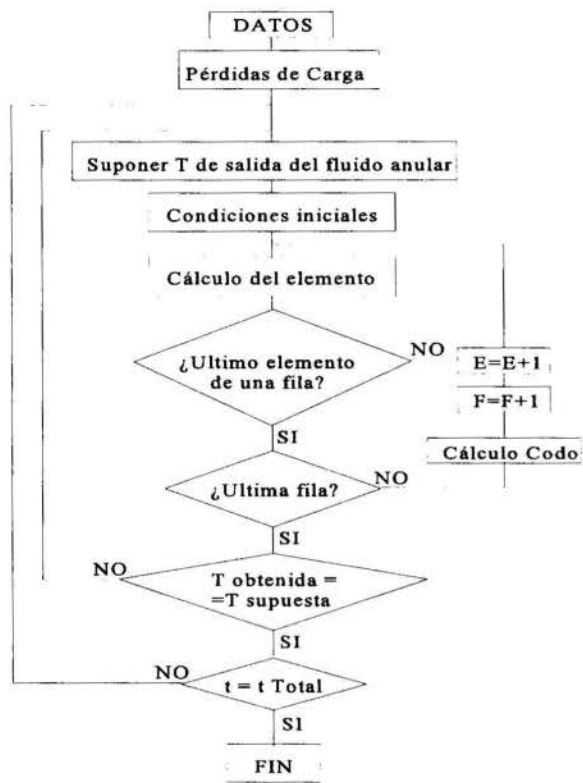


Figura 7 - Esquema general del proceso de cálculo

Resultados. Los resultados que se obtienen directamente del proceso de cálculo descrito son: las distribuciones de temperatura del fluido interior, fluido anular, tubo interior y tubo exterior en cada intervalo de tiempo y al final del tiempo de análisis, el flujo de calor intercambiado en cada elemento entre los fluidos y el disipado al ambiente, el flujo de calor total, intercambiado y disipado, en cada intervalo de tiempo y durante el periodo completo en el que se realiza el análisis. Así puede conocerse la evolución temporal de las magnitudes antes señaladas y estudiar la influencia de los distintos parámetros de diseño y condiciones de funcionamiento en su comportamiento. También se calculan las pérdidas de carga de ambos fluidos mediante la correlaciones propuestas en VDI-Wärmeatlas (1984).

APLICACION Y RESULTADOS

Los resultados que se incluyen corresponden al estudio del intercambiador utilizado como recuperador de calor en un sistema de refrigeración por absorción con amoníaco-agua, según la Fig. 1. Los fluidos de trabajo son disoluciones con distintas concentraciones de amoníaco en agua y a diferentes presiones. Se considera que la concentración y fase de dichas disoluciones permanece constante en todo el intercambiador. Por ello, en el modelo, para el cálculo de las propiedades físicas

de estas disoluciones, se han utilizado las ecuaciones obtenidas por Ziegler y Trepp (1984). Para el cálculo de las propiedades del aire se han usado las subrutinas programadas por Wang (1991). Es de destacar que el proceso de cálculo es general y podría utilizarse en cualquier otra aplicación introduciendo las propiedades de los fluidos entre los que se produce el intercambio de calor.

Régimen transitorio. A modo de ejemplo se considera la siguiente aplicación para el estudio del régimen transitorio: caudal másico de disolución débil 0.1 kg/s, concentración 20%, temperatura de entrada de 135 °C y a una presión de 0.2 MPa, caudal de la disolución fuerte 0.2 kg/s, concentración 30%, temperatura de entrada 27 °C y presión 1.5 MPa. Las características de los tubos del intercambiador son: longitud por tubo, $L=1$ m, $d_i=14.9$ mm, $D_i=17.2$ mm, $\rho_{L_i}=0.85$ kg/m³, $d_e=22.4$ mm, $D_e=26.9$ mm, $\rho_{L_e}=2.48$ kg/m³, $d_x=21$ mm, $D_x=25$ mm, $\rho_{L_x}=2.07$ kg/m³, $C_p=0.465$ kJ/kg °C, $\lambda=0.05$ kW/m °C y rugosidad 0.004 mm. El intercambiador se compone de 14 tubos y el radio de los codos es de 40 mm. En el ambiente exterior se considera una temperatura de 15 °C y una humedad relativa del 80%. La disolución débil circula por la región interior y la fuerte por la anular.

Del análisis de los resultados obtenidos destaca la corta duración del periodo transitorio, que es en torno a los 10 minutos, como puede verse en las Fig. 8 y Fig. 9, en las que se representa el flujo de calor intercambiado y disipado al ambiente, en cada intervalo de tiempo, considerando para el análisis, 6 elementos por tubo, intervalos de 60 s y un tiempo total de análisis de 1800 s.

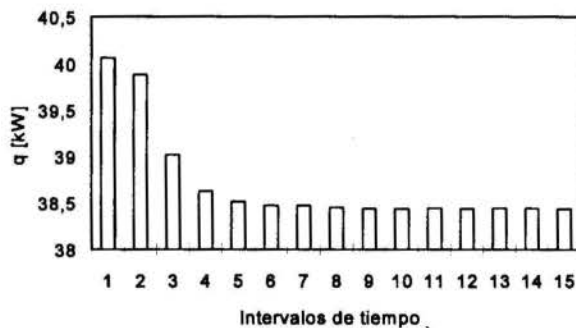


Figura 8 - Flujo de calor intercambiado entre los fluidos en cada intervalo ($\Delta t=60$ s)



Figura 9 - Flujo de calor disipado al ambiente por intervalo de tiempo ($\Delta t=60$ s)

Se observa, en las Figs. 8 y 9, la rápida estabilización del flujo entre los fluidos, que tiende a estabilizarse entorno a los 38.5 kW y del calor disipado al ambiente que lo hace entorno a

los 0.77 kW.

En la Fig. 10, se representa la evolución de las distribuciones de temperaturas de ambos fluidos a los 2, 4 y 14 minutos de funcionamiento. Puede observarse que las distribuciones no son uniformes si no que existen unos pequeños dientes de sierra que delatan la existencia de los codos. Para los tubos se obtienen distribuciones de temperatura semejantes.

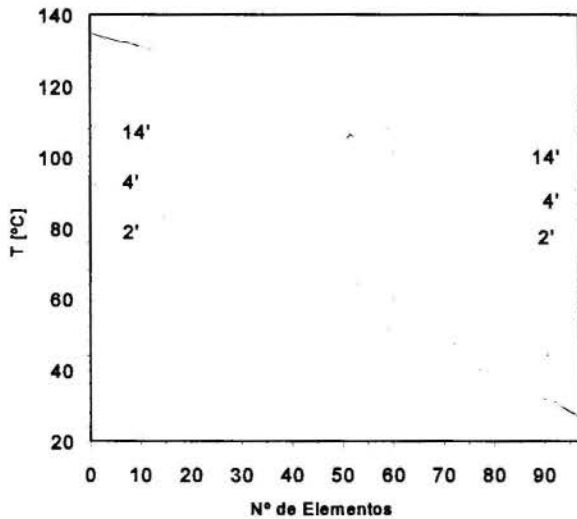


Figura 10- Evolución de las distribuciones de temperatura en los fluidos al cabo de 120, 240 y 840 s de funcionamiento del intercambiador

Análisis de los Parámetros de Diseño. El estudio de la influencia de los diversos parámetros de diseño en la prestación térmica y eficiencia del intercambiador, se realiza una vez establecido el régimen permanente. En la Fig. 11 se muestra el flujo de calor intercambiado y las pérdidas de carga del fluido anular como función de la variación del diámetro interior y exterior, considerando que éste último varía en función del primero de tal forma que las secciones de pasos de ambos fluidos se mantienen iguales y ambos tubos tienen el mismo espesor. Los datos son los utilizados en el estudio del régimen transitorio a excepción de los caudales que se consideran de 0.03 kg/s y las temperaturas de entrada de 120 y 40 °C, respectivamente para la disolución débil y fuerte, además se considera la circulación de la disolución fuerte por el interior.

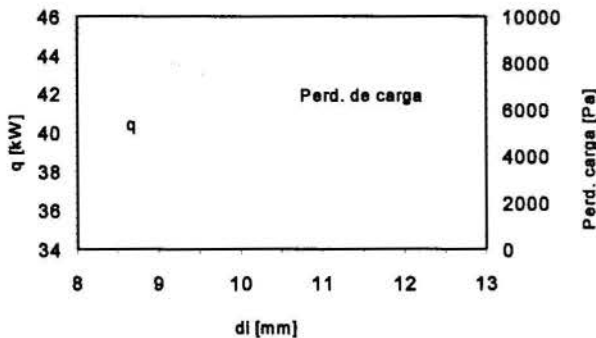


Figura 11 - Variación de la prestación térmica y las pérdidas de carga como función de los diámetros, manteniendo iguales ambas secciones de paso y los espesores de los tubos

En el dimensionamiento del intercambiador el parámetro fundamental, una vez seleccionados los diámetros de los tubos, es la longitud (superficie) total de intercambio. En las Figs. 12

y 13, se muestra la influencia de la longitud total en la prestación térmica y en la eficiencia del intercambiador, considerando los mismos datos que en la Fig. 11. Además, se consideran las dos posibilidades de circulación relativa entre los fluidos. Se observa que se produce un mayor intercambio de calor cuando circula el fluido caliente por el tubo interior debido a que se producen menores pérdidas al ambiente, ya que no se considera aislamiento, mientras que la eficiencia es mayor en el caso inverso por la razón opuesta.

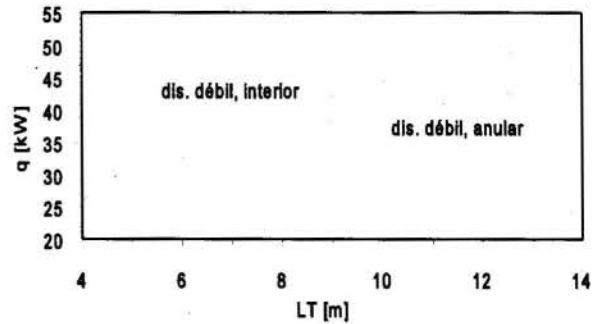


Figura 12 - Influencia de la longitud (superficie) total de intercambio en la prestación térmica del intercambiador

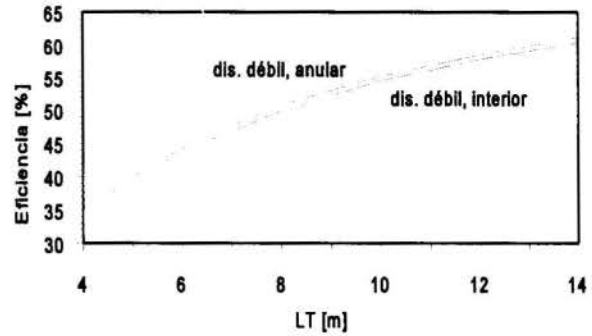


Figura 13 - Variación de la eficiencia del intercambiador como función de la longitud (superficie) de intercambio

Como puede verse en Keizer (1982) y también lo señala Kahn et al. (1993), el proceso de transmisión de calor que se produce en este intercambiador, junto con los procesos de rectificación, son los que introducen mayores irreversibilidades en los ciclos de absorción. El objetivo a conseguir es la mayor eficiencia posible por lo que resulta importante conocer su variación con las condiciones de funcionamiento. De la Fig. 13 puede deducirse la circulación relativa más conveniente en las condiciones consideradas en este estudio.

La eficiencia en los sistemas de refrigeración por absorción depende de forma importante de las temperaturas de generación y absorción, que son las de entrada de las disoluciones débil y fuerte en el intercambiador-recuperador. En las Figs. 14 y 15, se representa la variación de la eficiencia y prestación térmica como función de las temperaturas de entrada de ambos fluidos, manteniendo constantes los demás parámetros e iguales a los considerados en las gráficas anteriores. Resulta conveniente conocer la variación de la eficiencia del intercambiador en función de dichas temperaturas ya que se utiliza como dato en muchos de los modelos de simulación de estos sistemas, para definir el comportamiento del intercambiador (Rose et al., 1993, Grossman y Wilk, 1994).

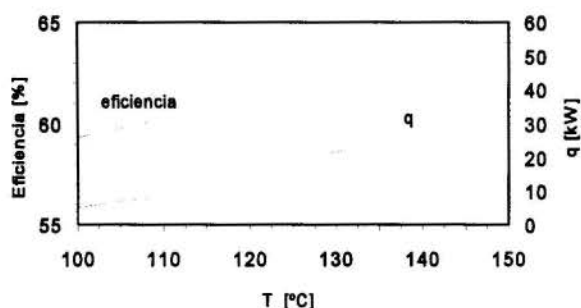


Figura 14 - Eficiencia y prestación térmica en función de la temperatura de entrada de la disolución débil

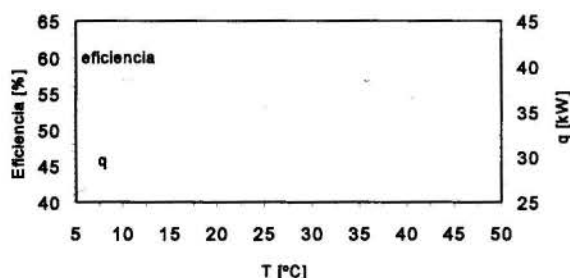


Figura 15 - Eficiencia y prestación térmica en función de la temperatura de entrada de la disolución fuerte

En la tabla 2 se muestra el diseño seleccionado, considerando como función objetivo el cociente entre la eficiencia y precio, para su utilización en un sistema de refrigeración por absorción funcionando mediante un ciclo simple con aprovechamiento del calor de rectificación y en las condiciones indicadas en la tabla 1. Se ha considerado la circulación del fluido caliente por la región anular teniendo en cuenta los resultados de la Fig. 13.

Tabla 1. Condiciones de funcionamiento del sistema de absorción.

Temperatura de generación	140 °C
Temperatura de condensación	40 °C
Temperatura de absorción	36 °C
Temperatura de evaporación	- 15 °C
Producción frigorífica	5 kW

Tabla 2. Resumen de las características del intercambiador seleccionado para su uso en la aplicación descrita anteriormente.

Nº de Tubos (L=1 m)	14
Tubo interior ($D_i/e/\rho_i$)	10.2 mm / 1.6 mm / 0.344 kg/m ³
Tubo exterior ($D_e/e/\rho_e$)	17.2 mm / 1.8 mm / 0.668 kg/m ³
Conexiones T ($D_eT/e/\rho_i$)	21.3 mm / 2 mm / 0.962 kg/m ³
Perd. de carga fluido interior	7000 Pa
Perd. de carga fluido anular	11000 Pa
Eficiencia	83.25 %
Coste (aproximado)	370000 Ptas
Relación Eficiencia/Coste (*10000)	2.24

REFERENCIAS

Baehr, H. D., 1954, "Zur Darstellung des Wärmeübergangs bei freier Konvektion durch Potenzgesetze", *Chemical Engineering Technology*, Vol. 26, pp. 269

Bassols, J., Schneider, R., Veelken, H., Kuckelkorn, B., Ohrt, D. and Langreck, J., 1993, "First Operation Results of a Gas-Fired 250 kW Absorption Heat Pump with Plate-Fin Heat Exchangers", *Proceedings, Absorption Heat Pump Conference*, ASME, AES-Vol. 31, pp.73-77.

Becker, H., 1989, "Compact Heat and Mass Exchangers of the Plate Fin Type in Thermal Sorption Systems", Ph. D. Thesis, Delft University of Technology, Delft, Holanda.

Gnielinsky, V., 1967, "New Equations for Heat Transfer in Turbulent Pipe and Channel Flow", *Industrial Chemistry Engineering*, Vol. 68, pp. 359-368.

Grossman, G., Wilk, M., 1994, "Advanced Modular Simulation of Absorption Systems", *International Journal of Refrigeration*, Vol. 17, pp. 231-243.

Hausen, H., 1943, "Darstellung des Wärmeüberganges in Rohren durch vergallgemeinerte Potenzbeziehungen", *Z.A.V.D.I. Beihefte Verfahrenstech.*, Nº 4, pp. 91.

Infante Ferreira, C., Kalker-Kalkman, C. M., Aginagalde, X. y Fernández-Seara, J., 1994, "Air Coolers for Indirect Refrigeration Systems", *Proceedings, The Tenth International Heat Transfer Conference*, Taylor&Francis, Brighton, UK, Vol. 4, pp. 363-368.

Jakob, M., (1957), "Heat Transfer", Vol. 1 y Vol. 2, Wiley, New York.

Kahn, R., Alefeld, G., Hammerer, S., Pfeifer, R. y Tomasek, M.-L., 1993, "An Ammonia-Water Absorption Cycle with High Temperature Lift", *Proceedings, International Absorption Heat Pump Conference*, ASME, AES-Vol. 31, pp. 93-100.

Keizer, C., 1982, "Absorption Refrigeration Machines", Ph. D. Thesis, Delft University of Technology, Delft, Holanda.

Masaharu, Tetsuo y Mitsuru, 1991, "Development of Compact Laminated Heat Exchangers for R22-DEGDME Absorption Refrigerating Machine", *Proceedings, Absorption Heat Pump Conference '91'*, Watanabe, K., pp. 195-200, Tokyo, Japón.

Rose, D. T., Zuritz, C.A. y Pérez-Blanco, H., 1993, "Thermodynamic Analysis an Pilot Plant Design for a Solar Assisted Double-Effect Refrigeration Absorption Cycle", *Proceedings, International Absorption Heat Pump Conference*, ASME, AES-Vol. 31, pp. 109-116.

Stoecker, W. F. and Reed, L. D., 1971, "Effect of Operating Temperatures on the Coefficient of Performance of Aqua-Ammonia Refrigerating Systems", *ASHRAE Transactions*, Vol. 77 (2), pp.163-170.

VDI-Wärmeatlas, 1984, "Berechnungsblätter für den Wärmeübergang", VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf.

Wang, H., 1991, "Modelling of a Refrigerating System coupled with a Refrigerated Room", Ph. D. Thesis, Delft University of Technology, Delft, Holanda.

Welty, J. R., 1984, "Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer", Ed. John Wiley and Sons.

Ziegler, B. y Trepp, Ch., 1984, "Equation of State for Ammonia-Water Mixtures", *International Journal of Refrigeration*, Vol. 7, pp. 101

ABSTRACT

The paper describes the analysis of the thermal behavior of a two-pipe heat exchanger used as a heat recoverer between the weak and strong solutions in an ammonium-water absorption refrigeration system. A mathematical model based on the general energy equation is set and implemented by using the Finite Difference Method. The numerical results show the shortness of the transient period and let know the influence of the design relevant parameters on the heat transfer rate and the heat exchanger effectiveness.



HEAT TRANSFER ENHANCEMENT IN PLATE FIN-TUBE HEAT EXCHANGER BY LONGITUDINAL VORTEX GENERATORS



Jurandir I. Yanagihara, Hamilton J. Sabanai
 Department of Mechanical Engineering
 Polytechnic School of University of São Paulo
 05508-900 - São Paulo - SP-Brazil

SUMMARY

This work describes an experimental study about the influence of longitudinal vortex generators when applied to a single row plate fin-tube heat exchanger model. A set of configurations of delta winglet pair over the fins surface was studied. For each vortex generators position the Reynolds number was varied from 1000 to 2000. The results indicate that it is possible to achieve about 15% of intensification when comparing with a flat plate fin-tube heat exchanger.

INTRODUCTION

Several enhancement techniques have been studied and applied in compact heat exchangers to improve its performance. Some of them can be found in Bergles (1991). Among the techniques the use of vortex generators has received attention in the recent years because its application in fin-tube heat exchangers apparently leads to a simultaneous heat transfer enhancement and pressure loss reduction.

The flow structure through a plate fin-tube heat exchanger is characterized by the boundary layer growth between the plates until the region where the tube is placed. At this point the interaction of the flow with the fin and the tube produces the horseshoe vortex as showed in Figure 1.

A recirculation region behind the tube, caused by the flow separation from the tube surface, can be noticed. The heat transfer coefficient is low in this region and it is possible to augment it using the delta winglet pair near this region. This is

possible because the winglets promote a secondary flow called longitudinal vortex which carries the high momentum fluid from the outer regions to the recirculation zone improving the heat transport from the fin to the fluid. The secondary flow has a complex structure and a series of studies were conducted to understand the phenomena. Brockmeier et al. (1989), Yanagihara and Torii (1991), Fiebig et al. (1991), Biswas and Chattopadhyay (1992) are examples of works in the area.

The longitudinal vortex generated by a delta winglet was described with more details by Yanagihara and Torii (1991) as showed in Figure 2.

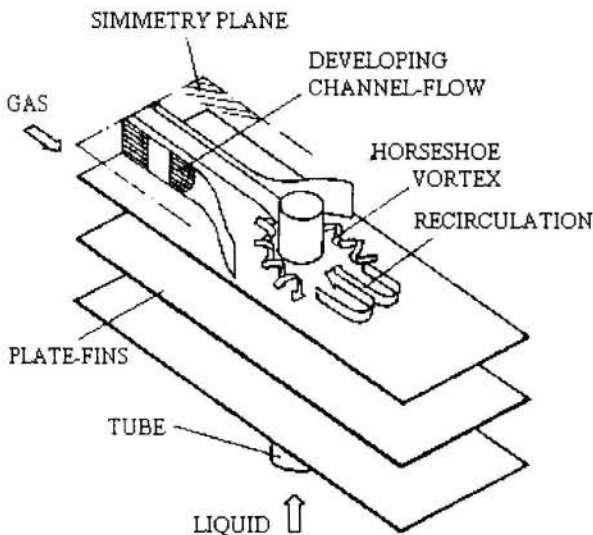


Figure 1 - Flow structure through the plate fin-tube (Fiebig et al., 1990)

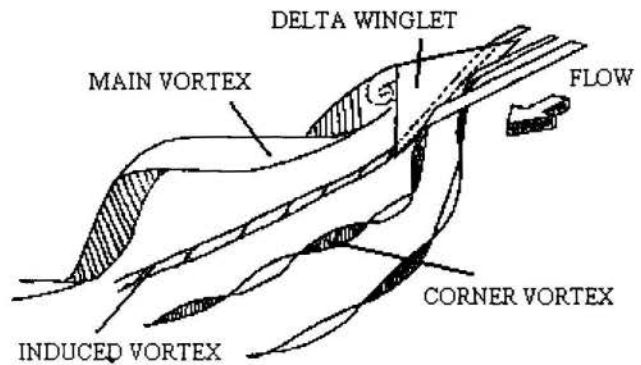


Figure 2 - Longitudinal vortex system generated by a delta winglet (Yanagihara and Torii, 1991)

The structure is formed by a main vortex generated at the winglet tip, a corner vortex which is a kind of horseshoe vortex at the winglet base and an induced vortex between them. The main vortex directs the flow to the fin causing a thinning of the boundary layer, enhancing the heat transfer. At the opposite side the movement is reverted and the flow departs from the fins causing a thickening of the boundary layer and tending to decrease

the heat transfer. However, at this same region the existence of the corner vortex produces a local heat transfer enhancement.

Fiebig et al. (1990) carried out a study varying the winglet position around the tube and the Reynolds number from 2000 to 5000. Their best result was 20% gain in heat transfer conjugated with 10% reduction in flow losses. This result was obtained positioning a winglet pair, with aspect ratio (Λ) equal to 2, one diameter apart and half diameter behind the tube center line, with $Re = 5000$. The authors also observed that the angle of attack (β), which consists of the winglet deviation relatively to the main flow direction, must be 45° and that the configurations using the winglets in front of the tube are worse than those using the wings behind it.

Valência et al. (1993) studied the use of winglet pairs in a three row plate fin-tube heat exchanger. The winglets parameters and position used were as recommended by Fiebig et al. (1990) and the tubes were arranged in line and staggered. For in line tubes it was observed a heat transfer enhancement of 65 % and for staggered tubes the intensification was about 9%, both results obtained at $Re=2600$.

Biswas et al. (1994) studied numerically the same configuration of Valência et al. (1993). By plotting the velocity field around the tube it was showed that the interaction between the longitudinal vortex and the horseshoe vortex induces a displacement of the boundary layer separation point over the tube. The separation which was occurring at the cylinder's front part, moves to the rear with the presence of the longitudinal vortex. This fact yields a reduction in the recirculation zone behind the cylinder which enhances the heat transfer and reduces the tube form drag of an amount that compensates the form drag induced by the winglets, reducing consequently the global flow losses.

This work presents a study of the influence of a delta winglet pair when positioned in different locations along the fin surface of a single row plate fin-tube heat exchanger. Since the Fiebig et al

(1990) article is very similar to this study it is possible to compare the results, remembering though that there are differences in the geometric dimensions and the Reynolds number range.

EXPERIMENTAL APPARATUS AND PROCEDURES

The low speed wind tunnel used to determine the global convective heat transfer coefficient is showed in Figure 3. The mass flow rate can be controlled varying the fan angular velocity using a frequency inverter. The instrumentation consists of a type J thermocouple set, a wattimeter and two parallel orifice plates.

The plate fin-tube heat exchanger model was electrically heated by inserting an helicoidal resistance inside the tube, thus the air was heated while passing through the fins. The heat transfer coefficient was determined applying the Newton's Cooling Law:

$$\bar{h}_c = \frac{\dot{Q}}{A_t \Delta T_{log}} \quad (1)$$

The heat transferred to the air is determined by measuring the electrical power consumed and correcting it for heat losses, which amounts to 3.3 % for natural convection and 2.2% for radiation. The heat transfer area was calculated from the geometrical fin-tube parameters and the logarithmic mean temperature difference was based on the air bulk temperature at the test section inlet and outlet and the tube surface temperature :

$$\Delta T_{log} = \frac{(T_w - T_i) - (T_w - T_o)}{\ln \left(\frac{T_w - T_i}{T_w - T_o} \right)} \quad (2)$$

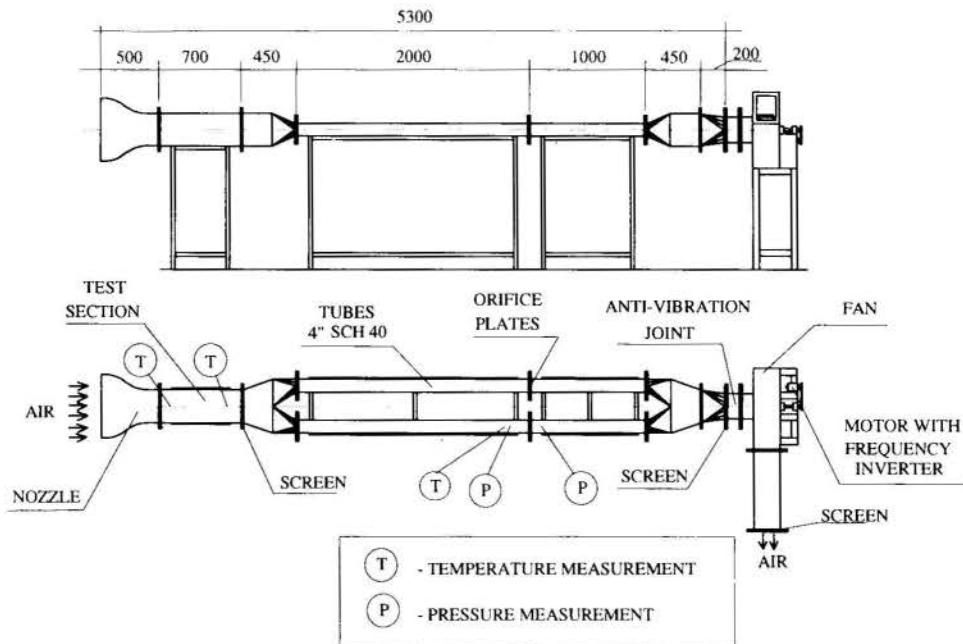


Figure 3 - Test facility

The air temperature at the inlet was measured in one point at the center of a section located upstream the model. The air bulk temperature at the outlet was determined using the expression derived from the energy conservation, assuming that the air enthalpy is a function only of the temperature:

$$h_o(T_o) = \frac{\dot{Q}}{\dot{m}} + h_i(T_i) \quad (3)$$

Measuring the heat transferred, the mass flow rate and the inlet temperature, the outlet temperature can be calculated by Eq. (3). The relation between enthalpy and temperature used to carry out this procedure, were extracted from Simões Moreira (1995):

$$h_u = h_a + \omega h_v \quad (4)$$

$$h_a = 1.598.10^{-5} T^2 + 1.006T \quad (5)$$

$$h_v = -8.0.10^{-6} T^3 - 2.0.10^{-4} T^2 + 1.851T + 2501.2 \quad (6)$$

The dry air enthalpy (h_a) was corrected for the air humidity ω and the vapor enthalpy, in order to give the moist air enthalpy (h_u).

The tube wall temperature is the arithmetic mean of four temperatures measured in different angular positions over the tube surface.

The fin-tube model and the delta winglet pair parameters were defined as showed in Figure 4.

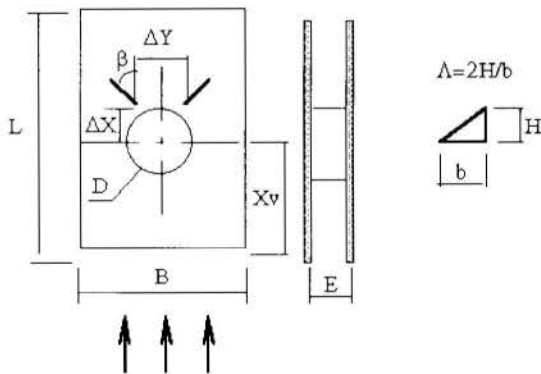


Figure 4 - Fin-tube model and vortex generators parameters

The defined parameters can be expressed in a non dimensional form dividing all linear dimensions by the tube diameter. This set of non dimensional parameters is useful for comparison with other similar works.

Extracting the data from Fiebig et al. (1990), Valência et al. (1993) and Biswas et al. (1994) works, and rearranging them in the non dimensional form, it is possible to compare the conditions used to produce the available data.

Table 1 - Model and vortex generators parameters

	Fiebig (1990)	Valência (1993)	Biswas (1994)	Present work
L/D	10	2.25	3.0	2.2
B/D	3	2.0	2.0	2.9
E/D	0.4	0.22	0.2	0.2
Xv/D	3	1.33	1.5	1.1
H/D	0.4	0.22	0.2	0.2
Λ	2	1.0	0.75	2
Re _E	2000 - 5000	600 - 2600	500 - 1000	750 - 1750
ΔX/D	-1.6 - 1.1	0.5	0.5	0 - 0.6
ΔY/D	0.6 - 1.2	1.0	1.0	0.6 - 1.4
β	25° - 55°	45°	45°	45°

It is noteworthy that the Reynolds number range based on the fins distance ($750 < Re_E < 1750$) is equivalent to the Reynolds number range based on the hydraulic diameter ($1000 < Re < 2000$).

The most expressive results obtained by these works are presented in Table 2.

Table 2 - Available results for plate fin-tube with delta winglet pair heat exchanger

Author	Enhanc.	Coefficient	Arrangement
Fiebig	20%	Global	1 row
Valência	65%	Global	3 rows in line
Valência	9%	Global	3 rows staggered
Biswas	240%	Local	3 rows staggered

FACILITY CERTIFICATION

In order to assure that the results obtained with the experimental apparatus were reliable, it was carried out a preliminary test using a single row plate fin-tube. The results were compared with data previously published by Rich (1973) and McQuinston (1977) for a similar geometry.

The geometrical parameters referred to each work are described in Table 3.

Rich (1973) proposed the correlation given in Eq.(7) and McQuinston (1977) the one given in Eq. (8):

$$j = 0.0797 Re^{-0.35} \quad (7)$$

$$j = 0.0014 + 0.2618JP \quad (8)$$

$$JP = Re_D^{-0.4} \left[\left(\frac{4}{\pi} \right) \left(\frac{L}{D_h} \right) \left(\frac{B}{D} \right) \sigma \right]^{-0.15}$$

Table 3 - Comparative fin-tube dimensions studied by the different authors

	Rich (1973)	McQuinston (1977)	Present work
L/D	2,1	2,2	2,2
B/D	2,4	2,9	2,9
E/D	0,1	0,2	0,2
Rows	4	4	1
e/D	0,011	0,017	0,017
D _h	2,3	2,5	2,5
Re	500-2000	1000-2000	1000-2000

The correlations were corrected to one row heat exchanger by the expression proposed by McQuinston (1977):

$$\frac{j_n}{j_1} = 1 - 1280 \cdot n \cdot Re_{S_L}^{-1,2} \quad (9)$$

In the above equation n is the number of tube rows and j is the Colburn factor.

Rearranging equations (7), (8) and (9) and referring all Reynolds number involved to the hydraulic diameter:

$$j_i = \frac{0,0797 Re^{-0,35}}{1 - 238,1502 Re^{-1,2}} \quad (10)$$

$$j_j = \frac{0,0014 + 0,1002 Re^{-0,4}}{1 - 414,4593 Re^{-1,2}} \quad (11)$$

Eq. (10) is referred to Rich's (1973) initial correlation and Eq. (11) to McQuinston's (1977). For the latter, the geometric parameters required to calculate the term JP in Eq. (8) were taken from the dimensions of the model studied in this work.

Varying the Reynolds number for equations (10) and (11) it was determined the Colburn factor for one row plate fin-tube heat exchanger.

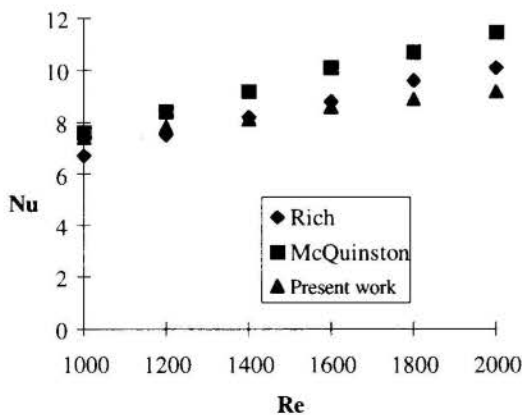


Figure 5 - Nu variation as a function of Re

Converting the values calculated as described above to Nusselt number, using the expression:

$$Nu = j \cdot Pr^{1/3} \cdot Re \quad (12)$$

and plotting it in a graphic as showed in Figure 5, it is possible to verify the reliability of the procedure adopted in this work.

The results have smaller deviations with Reynolds number about 1000 and as all data present na uncertainty of 10 %, they can be accepted as suitable.

RESULTS AND DISCUSSION

Fixing the angle of attack (β) in 45° and the aspect ratio (A) in 2, the study of the influence of the Reynolds number and vortex generator's position on the heat transfer was carried as defined in Figure 6.

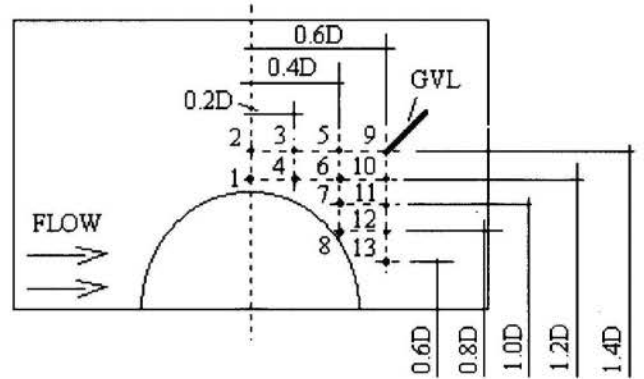


Figure 6 - Vortex generators positions studied

The Nusselt numbers were evaluated in every position for Reynolds number varying from 1000 to 2000 with a step of 200. For all values calculated the corresponding uncertainty was about 10% (95% of confidence level).

Table 4 - Nusselt numbers for plate fin-tube heat exchangers with vortex generators located in different positions over the fins

Pos	Reynolds Number					
	1000	1200	1400	1600	1800	2000
1	7.2	7.8	7.9	8.8	9.1	9.4
2	7.8	8.0	8.6	8.9	9.3	9.6
3	7.3	7.8	8.3	8.6	9.1	9.6
4	7.6	8.2	8.6	9.1	9.5	9.8
5	7.7	8.2	8.8	8.9	9.5	9.7
6	7.8	8.3	8.7	9.3	10.0	10.1
7	8.4	9.0	9.5	10.1	10.5	10.8
8	7.8	8.2	8.7	9.2	9.5	10.0
9	7.6	8.1	8.4	8.9	9.1	9.3
10	7.9	8.5	8.8	9.1	9.5	10.2
11	7.8	8.2	8.7	9.1	9.5	9.8
12	7.7	8.0	8.5	8.7	9.3	9.4
13	7.2	7.8	8.2	8.5	8.7	9.2

The reference Nusselt numbers determined in the certification test and used for calculating the intensification factor are :

Table 5 - Reference Nusselt numbers

Re	1000	1200	1400	1600	1800	2000
Nu ₀	7.4	7.8	8.1	8.6	8.9	9.2

The heat transfer coefficient for all configurations were compared with the values showed in Table 5. The intensification factor was defined as :

$$I = \left(\frac{Nu}{Nu_0} - 1 \right) \cdot 100 \quad (13)$$

Table 6 shows the intensification factors for all positions studied. As can be seen the intensification factor varied from -2.7 to 7% for the major positions, and the most significant values were obtained for positions 6, 7, 8, 9 and 10.

Figure 7 presents the Nusselt number variation as a function of Reynolds number for the better positions in a graphic form :

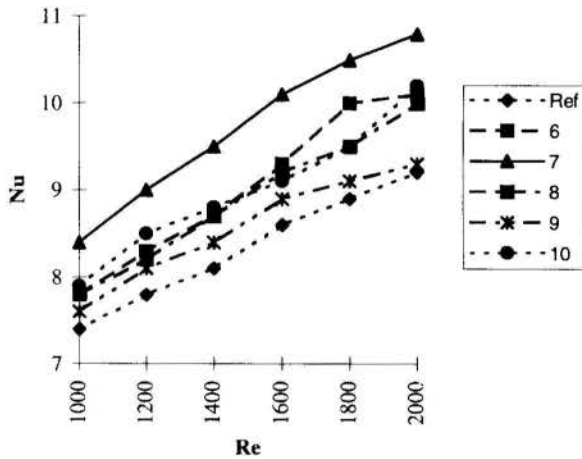


Figure 7 - Nusselt number versus Reynolds number

Figure 8 presents the correspondent intensification factors :

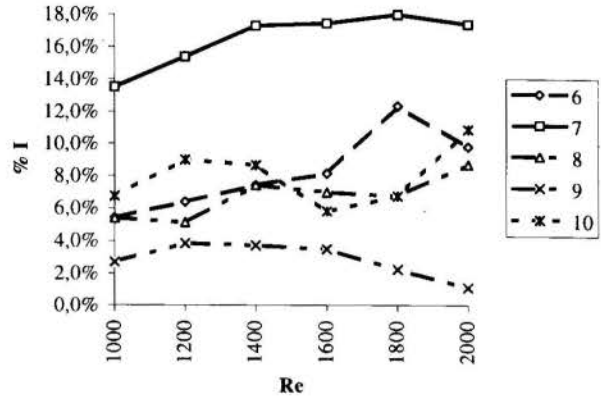


Figure 8 - Intensification factors for different vortex generator's positions

The indicated area on Figure 9 represents the region where the better results were found. Particularly, an intensification factor of 17% was found at position 7. The best position for Fiebig et al. (1990) was located at 1.0 D apart, as in this case, and 0.5 D behind the tube center line; this is very close to the 0.4 D referred to position 7. The most significant difference between these two works is the fin length that is larger for the work of Fiebig (1990). This fact would induce a slightly higher intensification factor than the one found in this work, but this was not confirmed by the results. It could be influenced by other geometrical differences or by the uncertainties of both experiments.

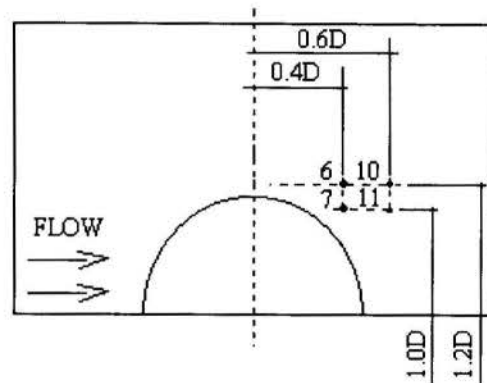


Figure 9 - Better delta winglet positions over the fin

Table 6 - Intensification factors for the positions studied

Re	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1000	-2.7	5.4	-1.4	2.7	4.1	5.4	13.5	5.4	2.7	6.8	5.4	4.1	-2.7
1200	0.0	2.6	0.0	5.1	5.1	6.4	15.4	5.1	3.8	9.0	5.1	2.6	0.0
1400	-2.5	6.2	2.5	6.2	8.6	7.4	17.3	7.4	3.7	8.6	7.4	4.9	1.2
1600	2.3	3.5	0.0	5.8	3.5	8.1	17.4	7.0	3.5	5.8	5.8	1.2	-1.2
1800	2.2	4.5	2.2	6.7	6.7	12.4	18.0	6.7	2.2	6.7	6.7	4.5	-2.2
2000	2.2	4.3	4.3	6.5	5.4	9.8	17.4	8.7	1.1	10.9	6.5	2.2	0.0

CONCLUSIONS

The global convective heat transfer coefficient was experimentally determined for several locations of vortex generators on a plate fin-tube heat exchanger model. The results showed that it is possible to enhance the heat transfer from the fin to the air. An intensification factor of 17% was found positioning the winglets 1.0 D apart and 0.4 D behind the center line of the tube. Comparing this result with those of Fiebig et al. (1990) it could be verified that they are quite similar.

The heat transfer coefficient increases as the Reynolds number passes from 1000 to 2000, reproducing the already published results.

Pressure drop measurements are needed in order to complement the work and another apparatus to carry these experiments is currently in construction.

ACKNOWLEDGEMENTS

Support for this work from MULTIBRÁS S.A. is gratefully acknowledged.

REFERENCES

- BERGLES, A. E., Heat Transfer Enhancement - Second Generation Heat Transfer Technology, **Proc. of the 11th ABCM Mechanical Engineering Conference**, São Paulo, 1991.
- BISWAS, G., CHATTOPADHYAY, H., Heat Transfer in a Channel with Built-in Wing Type Vortex Generators, **Int. J. Heat Mass Transfer**, vol. 35, n 4, pp 803-814, 1992.
- BISWAS, G, MITRA N.K., FIEBIG, M., Heat Transfer Enhancement in Fin-Tube Heat Exchangers by Winglet Type Vortex Generators, **Int. J. Heat Mass Transfer**, vol. 37, n 2, pp 283-291, 1994.
- BROCKMEIER, U., FIEBIG, M., GUNTERMANN, T., MITRA, N. K., Heat Transfer Enhancement in Fin-Plate Heat Exchanger by Wing Type Vortex Generators, **Chemical Engineering Technology**, vol. 12, pp 288-294, 1989.
- FIEBIG, M., MITRA, N., DONG, Y., Simultaneous Heat Transfer Enhancement and Flow Loss Reduction of Fin-Tubes, **Proceedings of the 9th International Heat Transfer Conference**, vol. 4, pp 51-56, Hemisphere, 1990.
- FIEBIG, M., KALLWEIT, P., MITRA, N., TIGGELBECK, S., Heat Transfer Enhancement and Drag by Longitudinal Vortex Generators in Channel Flow, **Experimental Thermal and Fluid Science**, vol. 4, pp 103-114, 1991.
- MCQUINSTON, F. C., Correlation of Heat, Mass and Momentum Transport Coefficients for Plate-Fin-Tube Heat Transfer Surfaces with Staggered Tubes, **ASHRAE Transactions**, vol. 83, pp 294-309, 1977.
- RICH, D. G., The Effect of Fin Spacing on the Heat Transfer and Friction Performance of Multi-Row, Smooth Plate Fin-and-Tube Heat Exchangers, **ASHRAE Transactions**, vol. 79, Part 2, pp 137-145, 1973.
- SIMÕES MOREIRA, J.R., Programa Simplificado para Cálculos Psicrométricos, **Anais do Encontro Nacional de Modelos de Simulação de Ambientes**, pp 101-115, Faculdade de Arquitetura e Urbanismo da Universidade de São Paulo, 1995.
- VALÊNCIA, A., FIEBIG, M., MITRA, N. K., Experimental Investigation of Heat Transfer and Flow Loss in a Fin-Tube Heat Exchanger Element with Longitudinal Vortex Generators, **Proc. of the Eurotherm Vortices and Heat Transfer Seminar**, vol. 31, pp 224-230, Bochum, 1993.
- YANAGIHARA, J. I., TORII, K., Enhancement of Laminar Boundary Layer Heat Transfer by Longitudinal Vortices, **Transport Phenomena in Heat and Mass Transfer**, vol. 2, pp 942-953, Elsevier 1993.



FLUTUAÇÕES DE PRESSÃO NAS PAREDES DE UM BANCO DE TUBOS COM ESCOAMENTO TURBULENTO



Luiz Augusto M. Endres e Sérgio Viçosa Möller

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - PROMEC
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS

RESUMO

Neste artigo, são apresentados resultados de medições do campo de pressões flutuantes sobre as paredes de bancos de tubos submetidos a escoamento turbulento transversal. Os bancos de tubos possuem arranjos quadrangulares e triangulares, sendo que são analisadas quatro razões de aspecto diferentes para cada tipo de arranjo investigados. As flutuações de pressão estão apresentadas na forma de suas funções de densidade autoespectral e de variâncias. Os resultados mostram frequências definidas de geração de vórtices apenas para a maior razão de espaçamento. A diminuição da razão de espaçamento tende a uniformizar o campo de pressões flutuantes sobre os tubos.

INTRODUÇÃO

O processo de transferência de calor em trocadores convencionais como os de casco e tubo foi bastante estudado nos últimos 50 anos, mas a tentativa de elevar as taxas de transferência de calor com aumento de velocidades do escoamento e redução de espaçamentos entre os tubos requer, constantemente, novas informações para projetos. A generalização do grande volume de resultados experimentais existentes, através de estudos de semelhança e o desenvolvimento dos equipamentos de medição de grandezas nos escoamentos turbulentos permitiram uma melhor compreensão dos fenômenos térmicos e hidrodinâmicos envolvidos. Como as características do escoamento em torno dos tubos influem consideravelmente na transferência de calor esperada dos trocadores, torna-se necessário o conhecimento do escoamento resultante através de experimentos.

Em torno de um tubo em um banco, o escoamento é fortemente influenciado pelos tubos vizinhos. Em uma fenda estreita entre dois tubos de uma linha transversal ao escoamento de aproximação, por exemplo, o gradiente de pressão varia de tal forma a causar correspondente variação na distribuição de velocidades e no aspecto geral do escoamento adiante desta posição. Zukauskas (1972) compara o escoamento verificado nos arranjos triangulares ao de um canal curvo com seções transversais periodicamente convergentes e divergentes, o que torna a distribuição de velocidades semelhante em diferentes linhas de tubos. Nos arranjos quadrangulares a comparação é feita com canais retilíneos e a distribuição de velocidades nas fendas estreitas é determinada, principalmente, pela razão de espaçamento entre os tubos. O posicionamento dos tubos das linhas posteriores nas esteiras das linhas que os precedem, torna a distribuição de velocidades notadamente não uniforme. Zukauskas (1972) também mostra que, com relação ao coeficiente de transferência de calor local, verifica-se uma distribuição com o mesmo padrão de variação da velocidade, reduzindo-se estas variações na medida em que a razão de espaçamento é reduzida. Este parâmetro torna-se quase uniforme para arranjos com razão de espaçamento menores (Möller, 1982).

Na camada de escoamento com características laminares, junto à superfície sólida dos tubos, não há movimento normal ao escoamento principal e, portanto, não há uma mistura eficiente do fluido lá existente, que se processa apenas por condução. Por

outro lado, os vórtices da região turbulenta, eventualmente, penetram no limite da região laminar induzindo uma rápida mistura entre os fluidos destas camadas. Sendo assim, uma forma eficiente para elevar a taxa de transferência de calor é a redução na resistência da camada em que predomina o efeito viscoso combinada com um aumento na intensidade da turbulência do escoamento.

No entanto, Knudsen e Katz (1958) já chamavam a atenção para a presença de vórtices no escoamento turbulento como associados a grandes perdas de energia do movimento. Qualquer promoção de turbulência requer maior consumo de energia para manter o fluido em escoamento e, como um dos pontos críticos do equipamento de transferência de calor é o investimento a ser feito durante a operação, não se pode deixar de comparar os custos de bombeamento extra com a economia obtida na transferência de calor. Assim, na busca do equilíbrio entre aumento da turbulência e redução na perda de energia do movimento, fica claro que todo o esforço incapaz de afetar a subcamada viscosa próxima à superfície sólida apenas contribui para a perda de energia e desperdício de recursos, entre outras consequências indesejáveis relativas à integridade do equipamento. Por esses motivos, o conhecimento em detalhe da estrutura hidrodinâmica no interior do banco de tubos aparece como um importante item neste tipo de operação.

A preocupação quanto à integridade de equipamentos de transferência de calor e periféricos é decorrente da íntima relação existente entre o escoamento de fluidos em torno de estruturas sólidas e as vibrações por ele induzidas. A força do fluido sobre a estrutura provoca sua deformação que, enquanto ocorre, provoca mudanças na orientação do movimento com o mesmo caráter aleatório das flutuações das grandezas turbulentas do escoamento.

Diferentemente de bancos de tubos com grandes razões de aspecto, onde as cargas hidrodinâmicas estão principalmente associadas com o processo de formação e fuga de vórtices, o escoamento turbulento em bancos de tubos com pequenas razões de aspecto é caracterizado por um amplo espectro de energia, sem uma frequência definida (Blevins, 1990).

As flutuações de pressão resultam de flutuações de velocidade em diferentes pontos do campo de escoamento. O campo de pressões resultante é descrito pela equação de Poisson obtida da divergência da equação de Navier-Stokes, na forma da Eq. (1) em notação indicial (Willmarth, 1975):

$$\nabla^2 p = -\rho \frac{\partial^2 (u_i u_j)}{\partial x_i \partial x_j} \quad (1)$$

onde

- p = pressão;
- ρ = massa específica do fluido;
- u = velocidade do escoamento; e
- x = coordenada espacial.

Se introduzirmos a hipótese de Reynolds (segundo a qual uma grandeza qualquer Z pode ser representada pela soma de seu valor médio no tempo \bar{z} com a flutuação z' em torno desta média na forma $z = \bar{z} + z'$) na expressão anterior e isolarmos o termo representativo do campo de pressões flutuantes obtém-se a Eq. (2) (Rotta, 1972) que tem como solução geral uma relação onde o campo de pressões é dependente de integração sobre todo o campo de velocidades e não uma grandeza localizada.

$$\nabla^2 p' = -2\rho \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} - \rho \frac{\partial^2 (u_i' u_j')}{\partial x_i \partial x_j} + \rho \frac{\partial^2 \bar{u}_i' u_j'}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2)$$

No entanto, conforme Townsend, (1976), a amplitude das flutuações de pressão deve ser influenciada apenas por flutuações de velocidade a uma distância comparável ao comprimento de onda destas flutuações. Sendo assim, uma busca da forma e magnitude da correlação entre estas duas grandezas pode auxiliar na compreensão do complexo fenômeno aqui descrito. Esta investigação já está iniciada e será apresentada oportunamente.

O objetivo deste trabalho é apresentar resultados de medições do campo de pressões flutuantes sobre o contorno dos tubos de bancos com arranjos quadrangulares e triangulares, com pequena razão de aspecto, e investigar seu comportamento como uma função da posição no interior do banco.

SEÇÃO DE TESTES

As medições foram realizadas em um canal retangular com 146 mm de altura e 765 mm de comprimento, onde os bancos de tubos foram colocados. O fluido de trabalho foi o ar que, impelido por um ventilador centrífugo, passava por uma câmara de tranquilização e um conjunto de colméias e telas, antes de atingir o banco de tubos. O ângulo de incidência do escoamento com os tubos era de 90°. A vazão de ar na seção de testes, e então o número de Reynolds, era controlada com a utilização de uma válvula de gaveta. Antes do banco de tubos, um tubo de Pitot foi colocado, em uma posição fixa, para medir a velocidade de referência dos experimentos, uma vez que o perfil de velocidade incidente ao banco de tubos era uniforme. A figura 1 representa o canal esquematicamente.

Os bancos de tubos investigados possuíam arranjos quadrangulares ou triangulares, com 5 linhas e 4 ou 5 colunas para as medições de pressões flutuantes, conforme representado na figura 2. Os resultados apresentados neste artigo referem-se

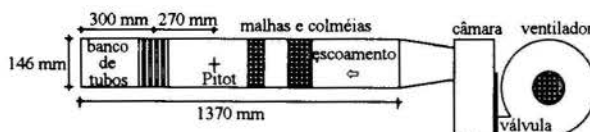


Figura 1 - Representação esquemática do canal

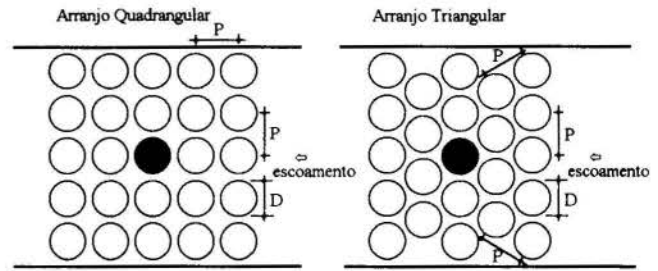


Figura 2 - Representação esquemática dos arranjos de tubos (o tubo instrumentado aparece hachurado).

às razões entre espaçamento e diâmetro (P/D) iguais a 1,60 ; 1,26 ; 1,16 e 1,05 , sendo o diâmetro dos tubos 32,1 mm e os números de Reynolds correspondentes, respectivamente iguais a $17 \cdot 10^3$; $12 \cdot 10^3$; $10 \cdot 10^3$ e $5,8 \cdot 10^3$, calculados com base na velocidade de referência e diâmetro dos tubos (Re_R).

Nas medições de pressões flutuantes, devido à redução do espaçamento entre os tubos do banco, uma maior perda de carga acarretou variações no valor do número de Reynolds. Utilizando valores de velocidade nas fendas estreitas, calculados a partir da velocidade de referência e com base na área efetiva de passagem do escoamento na primeira linha de tubos, os valores de número de Reynolds (Re_F) passam a ser $51 \cdot 10^3$; $71 \cdot 10^3$; $85 \cdot 10^3$ e $82 \cdot 10^3$. Os sub-índices R e F referem-se, respectivamente, ao emprego das velocidades do escoamento "de referência" e "nas fendas estreitas entre os tubos", como parâmetro de adimensionalização. Existem variações nos valores dos números de Reynolds obtidos para os arranjos quadrangulares e triangulares de até 11 %, sendo aqui mostrados o maior dos dois.

As medições de pressão nos contornos foram realizadas através de uma tomada de pressão no tubo central da terceira linha, que aparece hachurado na figura 2, conectada por pequenos tubos plásticos a um transdutor de pressão piezo-resistivo ENDEVCO, montado no interior do tubo, na forma mostrada na figura 3.

Medições prévias em duto circular mostraram que esta técnica de montagem era adequada às medições a serem realizadas (Endres, Möller 1994). O tubo assim instrumentado girava em torno de seu eixo permitindo medidas a cada 10°. Estes ângulos são medidos entre a direção do escoamento incidente antes do banco de tubos e a posição da tomada de pressão. Zero graus (0°) corresponde à localização onde a tomada de pressão fazia o escoamento principal.

A aquisição de dados das flutuações de pressão foi realizada por um conversor analógico-digital controlado por micro computador compatível com IBM/PC, empregado, também, para a avaliação dos resultados (Endres 1990).

Para a caracterização das medições realizadas foram determinados:

(i) a média temporal das flutuações de pressão \bar{p} , definida como

$$\bar{p} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T p(t) dt \quad (3)$$

onde

- p(t) = valores da pressão ao longo do tempo; e
- T = intervalo de tempo da medição; e

(ii) a função de densidade autoespectral (ou espectro de potência) $\Phi_{pp}(f)$ das flutuações de pressão que representa a taxa

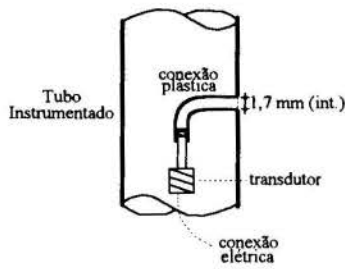


Figura 3 - Montagem do transdutor de pressão no tubo

de variação do valor quadrático médio destas pressões flutuantes no escoamento com relação à frequência f e é definida, conforme Bendat e Piersol (1986) como

$$\Phi_{pp}(f) = \frac{1}{BT} \int_0^T p^2(f, B, t) dt \quad (4)$$

onde B representa a largura da banda de resolução do espectro. A área abaixo desta curva fornece a variância da flutuação de pressão e a raiz quadrada deste valor é a raiz média quadrática (desvio padrão) ou, neste caso em que se trabalha apenas com as flutuações das grandezas, o valor RMS da pressão.

Para a determinação das funções de densidade autoespectral, a frequência de amostragem foi de 16,1 kHz sendo os sinais dos instrumentos filtrados para passarem acima de 1 Hz e abaixo de 8,05 kHz. Por outro lado na determinação de valores RMS, a frequência de amostragem utilizada foi de 3 kHz e a filtragem entre 1 Hz e 1 kHz.

A avaliação da incerteza das medições neste trabalho permite concluir que os equipamentos utilizados, multímetros, manômetros de líquido e eletrônicos, transdutor de pressão (incluindo o condicionamento do sinal elétrico) e conversor analógico-digital, são responsáveis por uma parcela de 1,4 % das incertezas e o emprego de conexões plásticas entre as tomadas e o transdutor de pressão em outra parcela de 5,0 %. Sendo assim, o valor total esteve abaixo de 6,5 % para os valores RMS e para as determinações dos espectros das flutuações de pressão, até frequências da ordem de 1000 Hz. Este intervalo de frequências foi tomado como referência, por esperar-se que o mesmo contenha as maiores estruturas do escoamento no interior dos bancos de tubos.

RESULTADOS

Antes de iniciar os experimentos a distribuição do escoamento na seção de testes foi medida com anemômetro de fio quente (empregando técnica descrita em Vosáhló 1984 e Möller 1988), mostrando um perfil de velocidades uniforme com 2 % de intensidade da turbulência da corrente livre, na mesma ordem de grandeza do trabalho de Zdravkovich e Stonebanks (1988). Medições das vibrações da seção de testes (incluindo os tubos nos bancos) foram, também, realizadas com o emprego de um acelerômetro METRA, para identificar possíveis influências provocadas pelo ventilador ou motor elétrico de acionamento. Duas importantes frequências de ressonância da seção de testes foram detectadas, a primeira em torno de 2 kHz e a segunda em torno de 8 kHz.

As figuras 4 e 5 mostram os valores RMS das flutuações de pressão adimensionalizados, tomando-se as velocidades na fenda como parâmetro de adimensionalização, em função da posição angular para o tubo instrumentado dos arranjos quadrangulares e triangulares, respectivamente.

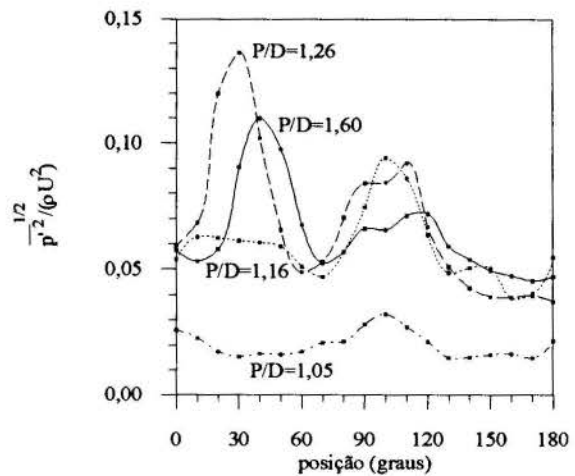


Figura 4 - Valores RMS das flutuações de pressão, adimensionais, para arranjos quadrangulares (linhas apenas para visualização)

Na figura 4 percebem-se duas regiões com picos dos valores deste parâmetro para os arranjos quadrangulares. A primeira na faixa entre 0 e 60 graus e, a segunda, entre 70 e 130 graus. Nas duas regiões os pontos de máximo ocorrem para ângulos menores na medida em que o espaçamento relativo é reduzido. Devido à redução na razão de espaçamento de 1,60 para 1,26 verifica-se uma significativa elevação nos picos deste valor. No entanto, entre $P/D=1,26$ e $P/D=1,16$ uma redução brusca é verificada na primeira região enquanto valores da mesma ordem foram obtidos na segunda região. Neste espaçamento relativo de 1,16 o pico da primeira região está achatado, salientando-se apenas o da segunda região. Entre $P/D=1,16$ e $P/D=1,05$ têm-se uma redução significativa nos valores RMS da flutuação de pressão deste arranjo menos espaçado, inclusive na região do segundo pico onde afasta-se das demais. Sua curva apresenta-se praticamente plana quando comparada às dos outros arranjos, mostrando uma acentuada uniformização na distribuição da flutuação de pressão nesta geometria.

Na figura 5, por outro lado, existe um padrão na forma das curvas representativas do valor RMS da flutuação de pressão dos arranjos triangulares com espaçamentos relativos 1,26; 1,16 e

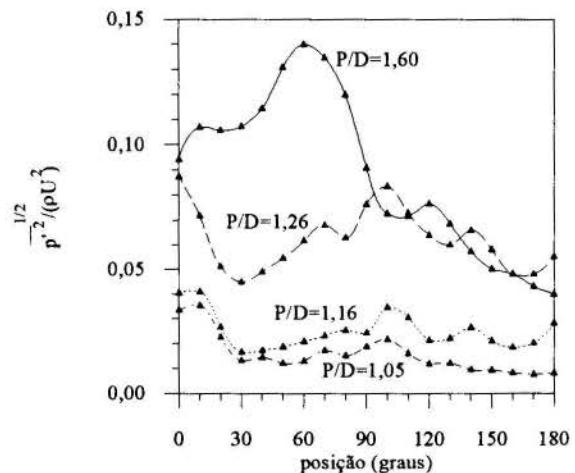


Figura 5 - Valores RMS das flutuações de pressão, adimensionais, para arranjos triangulares (linhas apenas para visualização)

1,05, embora com redução dos valores obtidos, na medida em que P/D é reduzido, sem superposições.

A partir de 90 graus ocorrem repetições de valores apenas na comparação entre os espaçamentos 1,60 e 1,26. O arranjo com espaçamento relativo de 1,60 possui valores crescentes até a posição de 60 graus de forma oposta aos demais, que inicialmente decrescem. O aspecto relativamente plano dos arranjos com espaçamento relativo 1,16 e 1,05, com valores mais baixos deste parâmetro, assemelha-se ao da figura 4 com espaçamento relativo 1,05.

As figuras 6, 7 e 8 mostram as densidades autoespectrais das flutuações de pressão na parede do tubo instrumentado (ver figura 2), nas fendas estreitas entre os tubos, respectivamente para a tomada de pressão posicionada em 45, 90 e 135 graus, tomando-se as velocidades na fenda como parâmetro de adimensionalização.

As curvas possuem, em geral, magnitudes com a mesma ordem de grandeza, quando comparados os arranjos quadrangulares com os triangulares de cada figura. Uma exceção notável está na figura 6, para o ângulo de 45°, em que os espaçamentos relativos de 1,26 e 1,16 apresentam valores menores nos arranjos triangulares.

É regra geral, também, uma redução das magnitudes, para toda a faixa de variação dos números de Strouhal, na medida em que é reduzido o espaçamento relativo, considerada uma posição angular fixa.

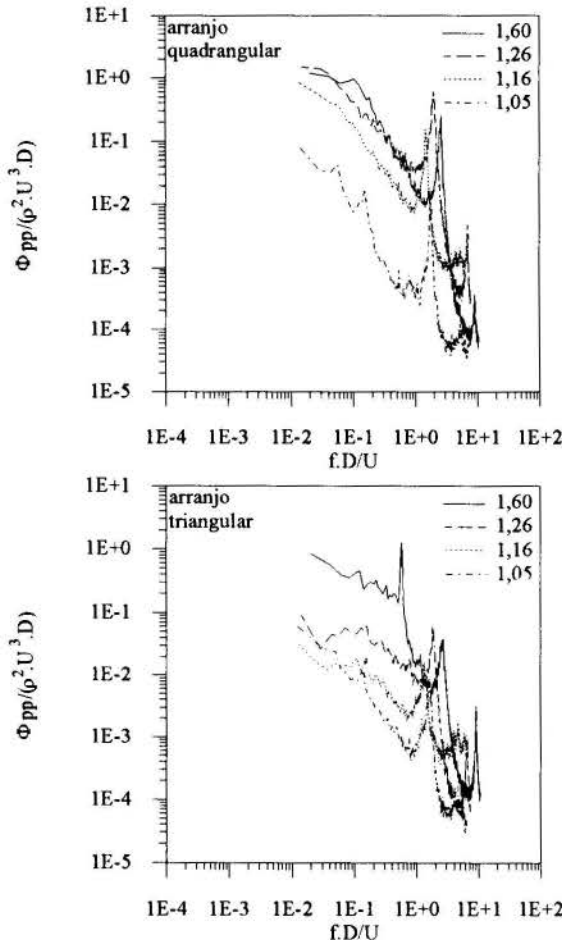


Figura 6 - Densidades autoespectrais adimensionalizadas, das flutuações de pressão nos arranjos quadrangulares e triangulares, para as diferentes razões de espaçamento: tomada de pressão a 45°.

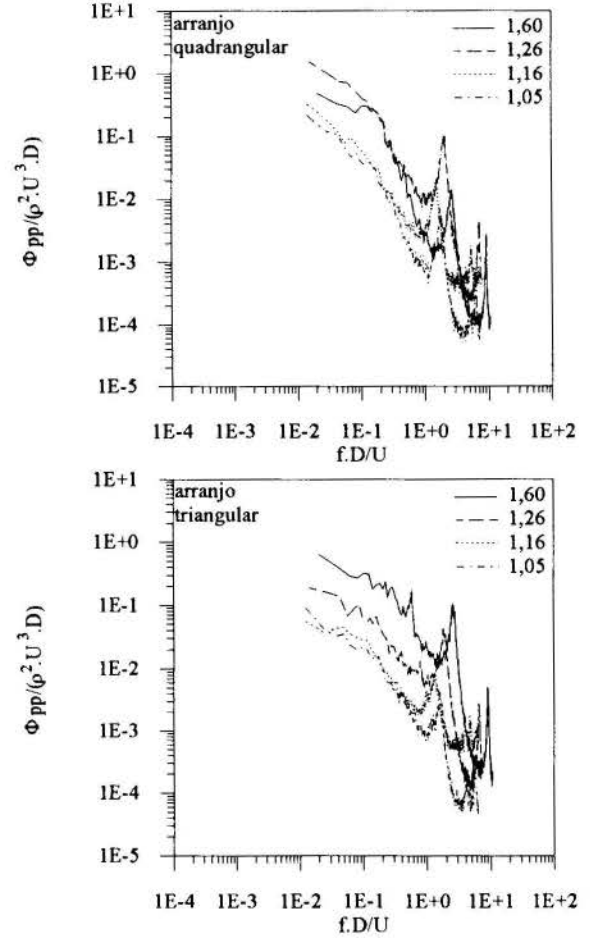


Figura 7 - Densidades autoespectrais adimensionalizadas, das flutuações de pressão nos arranjos quadrangulares e triangulares, para as diferentes razões de espaçamento: tomada de pressão a 90°.

No arranjo triangular com espaçamento relativo igual a 1,60, marcadamente na figura 6 referente a 45° e, com menor intensidade, nas figuras 7 e 8, percebe-se um pico do espectro na posição de Strouhal igual a 0,57; relativo à frequência de 440 Hz, provavelmente devido ao processo de formação e fuga de vórtices na esteira dos cilindros anteriores ao instrumentado.

Este resultado está de acordo com os obtidos em situações semelhantes relatadas na literatura consultada. Com alguma surpresa não foi possível constatar ocorrência análoga no arranjo quadrangular de mesmo espaçamento. Para as demais razões de espaçamento, as curvas possuem um decaimento uniforme no sentido do crescimento de Strouhal, com a presença de picos nos números de Strouhal correspondentes às frequências mencionadas anteriormente, referentes à ressonância da seção de teste.

Resultados de decaimento uniforme nos valores das funções de densidade espectral, sem o surgimento de periodicidades devidas exclusivamente ao processo hidrodinâmico são, em parte, confirmados por medições prévias efetuadas com anemometria de fio quente em arranjos quadrangulares e triangulares para razões de espaçamento iguais a 1,26 e 1,16 (Endres, Silva e Möller, 1995 I e II).

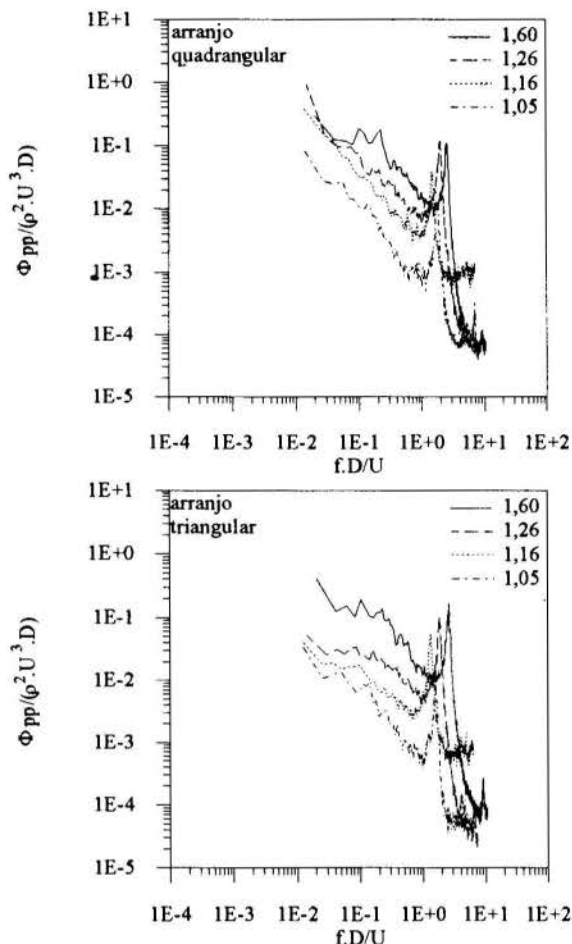


Figura 8 - Densidades autoespectrais adimensionalizadas, das flutuações de pressão nos arranjos quadrangulares e triangulares, para as diferentes razões de espaçamento: tomada de pressão a 135° .

CONCLUSÕES

Este artigo apresenta resultados de medições de campos de pressão flutuante em bancos de tubos com arranjos quadrangulares e triangulares, com pequena razão de aspecto, tendo como objetivo investigar características das flutuações de pressão em função da posição no interior do banco.

As medições dos valores RMS das flutuações de pressão, adimensionalizados com emprego da velocidade calculada para as fendas estreitas entre os tubos, têm aproximadamente a mesma magnitude nas duas geometrias de arranjos estudados, sendo influenciados, de maneira distinta, pela razão de espaçamento. Enquanto nos arranjos triangulares as baixas razões de espaçamento têm comportamento semelhante, distinguindo-se o elevado valor máximo local para $P/D = 1,60$ na posição angular de 60° , as duas maiores razões de espaçamento com arranjo quadrangular apresentam máximos locais destacados a ângulos entre 30 e 45 graus. Em ambas geometrias a redução da razão de espaçamento tende a homogeneizar a distribuição das flutuações de pressão em torno dos tubos, levando a cargas dinâmicas sobre os mesmos e à expectativa de coeficientes de transferência de calor uniformes, como mostrado em Möller, (1982).

As funções de densidade autoespectral apresentadas nas figuras 6, 7 e 8, nas baixas razões de espaçamento, não

permitem visualizar quaisquer frequências características devidas exclusivamente a processos de causa hidrodinâmica, nos dois casos de geometrias investigadas. No entanto, no arranjo triangular mais espaçado um pronunciado pico aparece para a frequência de 440 Hz, correspondendo a um número de Strouhal $S_R = 1,68$ ($S_F = 0,57$), o que está de acordo com resultados obtidos por Polak e Weaver (1994), com diferença dentro da faixa de incerteza dos próprios autores, embora tenham empregado técnicas diferentes nesta determinação. Este resultado demonstra a adequação da técnica de medição adotada e confirma os resultados para as razões de espaçamento menores. A redução na razão de espaçamento tende a uniformizar, portanto, a distribuição das flutuações de pressão sobre as paredes, resultando funções de densidade autoespectral com decaimento uniforme.

Com base no exposto e observando-se a equação para flutuação de pressão (Eq. 2) pode-se concluir pela uniformidade na transferência de quantidade de movimento nas baixas razões de aspecto, indicando cargas dinâmicas uniformes sobre as barras dos arranjos e sugerindo uniformidade, também, de coeficientes de transferência de calor (Möller, 1982).

AGRADECIMENTOS

Este trabalho de pesquisa é financiado pelo CNPq via projetos de pesquisa 414216/90-3 e 400180/92-8.

REFERÊNCIAS

- Bendat, J. S. e Piersol, A. G., 1986, *Random Data: analysis and measurement procedures*. 2nd. ed., John Wiley & Sons, New York.
- Blevins R. D., 1990, *Flow Induced Vibrations*, van Nostrand-Reinhold, New York.
- Endres, L. A. M., 1990, "Contribuição ao Desenvolvimento de um Sistema para Aquisição e Tratamento de Pressões Instantâneas em Laboratório", Dissertação de Mestrado, IPH/UFRGS, Porto Alegre.
- Endres, L. A. M. e Möller, S. V., 1994, "Estudo Experimental da Influência de Conexões entre Tomadas e Transdutores de Pressão", *Anais VIII Simpósio Brasileiro Sobre Tubulações e Vasos de Pressão*, Gramado, pp. 416-424.
- Endres, L. A. M., Silva, C. and Möller, S. V., 1995 - I, "Experimental Study of Static and Dynamic Fluid Flow Loads in Tube Banks", *Transactions of SMiRT 13, Int. Conf. Structural Mechanics in Reactor Technology*, Porto Alegre, v.4, pp.451-456.
- Endres, L. A. M., Silva, C. and Möller, S. V., 1995 - II, "Análise Espectral da Flutuação de Pressão nas Paredes de um Banco de Tubos em escoamento Turbulento", *Anais Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Belo Horizonte.
- Möller, S. V., 1982, "Experimental Determination of the Local Heat Transfer Coefficient in a Closely Packed Pin Arrangement", *Jül - Spez - 173, Kernforschungsanlage, Jülich*.

Möller, S. V., 1988, "Experimentelle Untersuchung der Vorgänge in engen Spalten zwischen den Unterkanälen von Stabbündeln bei turbulenter Strömung", Dissertation, Universität Karlsruhe, Karlsruhe. (Também: KfK 4501, 1989.)

Polak, D. R., Weaver, D. S., 1994, "Vortex Shedding in Normal Triangular Tube Arrays", *ASME Pressure Vessels and Piping Conference*, Minneapolis, pp. 145-156.

Rotta, J. C., 1972, *Turbulente Strömungen*, B. G. Teubner, Stuttgart.

Silva, C., 1993, "Análise Experimental do Campo de Pressão e da Perda de Carga em Banco de Tubos", Dissertação de Mestrado, PROMEC/UFRGS, Porto Alegre.

Townsend, A. A., 1976, *The Structure of Turbulent Shear Flow*, Cambridge U. P., Cambridge.

Vosáňho, L., 1984, "Computer Programs for the Evaluation of Turbulence Characteristics from Hot Wire Measurements", KfK 3743, Kernforschungszentrum Karlsruhe.

Willmarth, W. W., 1975, "Pressure Fluctuations Beneath Turbulent Boundary Layers", *Ann. Rev. of Fluid Mech.*, Vol. 7, pp.13-88.

Zdravkovich, M. M., Stonebanks, K. L., 1988, "Intrinsically non-uniform and metastable flow in and behind tube arrays", *Proceedings International Symposium on Flow-Induced Vibration and Noise*, ASME, Chicago, Vol. 1, pp.23-46.

Zukauskas, A. A., 1972, "Heat Transfer From Tubes in Crossflow", *Advances in Heat Transfer.*, Vol. 8, pp.93-160.

ABSTRACT

This paper presents results of measurements of fluctuating wall pressure in tube banks subjected to turbulent cross flow. Experiments were performed in tube banks with triangular and square arrangements having four different aspect ratios. Pressure fluctuations are presented in form of autospectral density functions and variances. Results of measurements show characteristics vortex shedding frequencies only in the tube bank with the largest aspect ratio. Pressure fluctuation field on tube walls becomes uniform as the aspect ratio is reduced.



ANÁLISE "PINCH" E AVALIAÇÃO SISTEMÁTICA APLICADAS À SÍNTESE DE REDES FLEXÍVEIS DE TROCADORES DE CALOR



Marcone Lopes da Silva e
Alberto Luiz de Andrade

Faculdade de Engenharia Química
Universidade Estadual de Campinas
C.P. 6066 - C.E.P. 13083-970 - Campinas - SP - Brasil

RESUMO

De uma maneira geral, as mudanças nas condições de operação de um processo químico refletem diretamente na rede de trocadores de calor. No entanto, poucos trabalhos na literatura estudam a flexibilidade de redes. O presente trabalho tem por propósito apresentar uma metodologia de síntese de redes flexíveis, baseada na aplicação da análise "pinch" e na avaliação sistemática da rede, considerando análise de topologia da rede e avaliação de área e energia envolvida nos trocadores de calor.

INTRODUÇÃO

Uma planta química dificilmente mantém fixas suas condições de operação, devido a fatores como: variações nas condições ambientais, desativação catalítica, variações das vazões de alimentação e de especificação de um produto, incrustações em tubulações e equipamentos, etc. A rede de trocadores de calor do processo também é afetada por tais variações, pois estas certamente provocam mudanças na temperatura e vazão das correntes do processo.

Nos últimos anos, muita atenção tem sido dada ao estudo de processos integrados energeticamente, devido ao alto custo da energia. Estes estudos concentram-se basicamente na síntese de redes de trocadores de calor. No entanto, poucos são os trabalhos na literatura a estudar a flexibilidade em redes de trocadores de calor, sendo esta muito importante quando as condições operacionais do processo mudam por algum motivo.

As redes flexíveis de trocadores de calor são redes que suportam variações nas condições de operação do processo, situação normalmente encontrada na indústria. As metodologias para a síntese de redes flexíveis estão divididas em dois ramos distintos: os estudos baseados nos métodos matemáticos, através da otimização por programação linear e não linear; e os estudos baseados nas primeira e segunda leis da termodinâmica, sendo a análise "pinch" a metodologia mais consistente para síntese da rede.

Marselle et al. (1982) foi um dos pioneiros a estudar a síntese de redes flexíveis, através da composição de várias redes, geradas para as situações limites do processo, em uma única rede. Porém, os métodos de síntese existentes na época não proporcionavam bons resultados.

A aplicação do modelo de transbordo a redes multiperíodo, as quais são redes que operam em condições predefinidas, foi desenvolvida por Floudas e Grossmann (1986), com uma formulação de programação linear inteira mista, "mixed integer linear programming" (MILP), garantindo o mínimo consumo de utilidades para cada período de operação.

Linnhoff e Kotjabasakis (1986) estudaram, de maneira qualitativa, os efeitos provocados por perturbações das correntes na rede de trocadores e os caminhos que estas perturbações podiam percorrer, o "downstream path", a partir de uma rede gerada pela análise "pinch", propondo estratégias de controle para a rede. Kotjabasakis e Linnhoff (1986), também a partir de uma rede gerada pela análise "pinch", quantificaram as perturbações e seus efeitos, através da "sensitivity table". Outro

trabalho de relevância na área foi desenvolvido por Kotjabasakis (1988) em sua tese de doutorado, onde reuniu os conceitos de "downstream path" e "sensitivity table" para auxiliar na síntese e análise de redes flexíveis.

Um caso particular das redes flexíveis são as redes multiperíodo, onde a rede opera em determinadas condições preestabelecidas. No presente trabalho desenvolveu-se uma nova metodologia de síntese de redes multiperíodo.

DEFINIÇÃO DO PROBLEMA CLÁSSICO

O problema de síntese de redes flexíveis multiperíodo é apresentado na literatura da seguinte forma: projetar uma rede multiperíodo que suporte l períodos de operação, e que tenha um custo anual próximo do mínimo, onde m correntes quentes precisam ser resfriadas e n correntes frias precisam ser aquecidas.

Os problemas tratados na literatura apresentam os seguintes dados para realizar a síntese:

- temperatura de entrada das correntes quentes e frias para cada período, T_{ent} ;
- temperatura de saída das correntes quentes e frias para cada período, T_{sai} ;
- capacidade térmicas das correntes quentes e frias para cada período, W_{cp} ;
- coeficiente convectivo de transferência de calor de cada corrente, considerando que estes não mudam de um período para outro, ou coeficiente global de transferência de calor para a rede, também considerado constante de um período para outro.

Além disto, geralmente não são considerados limites de utilidades e o tipo do trocador deve ser especificado, bem como o sentido de escoamento.

METODOLOGIA BASEADA NA ANÁLISE "PINCH"

A metodologia de síntese de rede multiperíodo baseada na análise "pinch" foi proposta por Kotjabasakis e Linnhoff (1987), onde uma rede base era gerada pela análise "pinch" para uma das condições de operação. Através da aplicação do "downstream path" e "sensitivity table" foram feitas modificações na rede para que ela operasse nos outros períodos.

O "downstream path" determina o caminho que uma perturbação pode percorrer, e com isto é possível definir quais

correntes serão afetadas pela perturbação, indicando quais trocadores precisam sofrer alterações, ou em sua área ou em sua vazão. Já a "sensitivity table" quantifica os efeitos das perturbações ocorridas no processo, através da construção de tabelas providas de equações de balanço de energia dos trocadores.

METODOLOGIA PROPOSTA

A metodologia apresentada no tópico anterior auxilia o engenheiro de projeto a fazer modificações em uma rede base, de forma que esta suporte variações nas condições operacionais do processo químico. No entanto, esta metodologia apresenta algumas desvantagens que dificultam a sua aplicação. Se a rede tiver um número elevado de correntes e de trocadores, a quantidade de caminhos para a análise de "downstream path" será muito grande, sendo muito difícil analisar o efeito que uma perturbação causa nas correntes do processo. Outra dificuldade que a metodologia apresenta é o número de tabelas geradas pelo "sensitivity table" quando a rede tem um número elevado de trocadores.

O presente trabalho apresenta uma nova metodologia baseada em:

- síntese da rede para cada período de operação utilizando a análise "pinch";
- análise de topologia das diversas redes geradas, e proposição de uma topologia para a rede multiperíodo;
- avaliação de área e energia dos trocadores da topologia escolhida, através de simulação da rede.

A síntese da rede é realizada através da alocação dos trocadores entre as correntes, sendo a área de troca térmica calculada pela equação básica de projeto dada por:

$$A = \frac{Q}{U \cdot DTML} \quad (1)$$

onde, Q é a quantidade calor trocado entre as correntes quente e fria, U o coeficiente global de transferência de calor, A a área de troca térmica e $DTML$ diferença de temperatura média logarítmica.

A primeira etapa é realizada por um programa desenvolvido para a síntese de redes de trocadores de calor, baseado no trabalho de Linnhoff e Hindmarsh (1983), utilizando o método "pinch". Este programa faz a síntese automática de uma rede de trocadores de calor a partir dos dados de temperatura de entrada e saída, capacidade térmica e coeficientes convectivos das correntes do processos, e para uma mínima diferença de temperatura permitida nos terminais dos trocadores, ΔT_{min} .

O método "pinch" é uma técnica na qual realiza-se um balanço entálpico nas correntes do processo, através do algoritmo da tabela do problema. Este balanço possibilita a determinação do mínimo consumo de utilidades e a localização do ponto "pinch", o qual uma vez localizado, divide o problema em duas partes que são tratadas independentemente acima e abaixo do "pinch".

Em decorrência do balanço entálpico, acima do "pinch" só há a necessidade do fornecimento de utilidade quente para as correntes, enquanto abaixo necessita-se fornecer utilidades frias. Os critérios utilizados para a alocação dos trocadores entre as correntes visam evitar que o balanço energético seja violado nesta etapa. Estes critérios são:

- a quantidade de correntes que deixa o "pinch" sempre deve ser maior ou igual a quantidade de correntes que chega ao "pinch", por exemplo, acima do "pinch" o número de correntes quentes não pode ser maior que o número de correntes frias, caso contrário deve-se dividir uma corrente fria;
- W_{cp} das correntes, isto é, se duas correntes vão trocar

calor, a capacidade térmica da corrente que deixa o "pinch" deve ser maior ou igual a capacidade térmica da corrente que chega ao "pinch", por exemplo, acima do "pinch" a capacidade térmica da corrente fria (em que ser maior ou igual a capacidade térmica da corrente quente, caso contrário deve-se dividir a corrente quente).

Para a alocação dos trocadores utiliza-se também a heurística "tick-off", a qual indica que se duas correntes, uma quente e uma fria, são escolhidas para a alocar um trocador, estas devem trocar o máximo de calor possível, geralmente satisfazendo uma das correntes.

O programa de síntese de redes de trocadores de calor baseado na metodologia de Linnhoff e Hindmarsh (1983) é composto de quatro etapas:

- entrada dos dados das correntes do processo;
- determinação do mínimo consumo de utilidades e localização do ponto "pinch", região onde as trocas de calor são restritas, através do algoritmo da tabela do problema;
- alocação dos trocadores utilizando os critérios do método "pinch" e a heurística "tick-off";
- saída dos resultados de temperatura intermediária entre os trocadores, carga térmica dos trocadores, área de troca térmica de cada trocador e topologia da rede gerada.

O fluxograma resumido representando o algoritmo implementado é mostrado na figura 1. O programa de síntese de rede de trocadores de calor foi usado para gerar uma rede para cada período de operação.

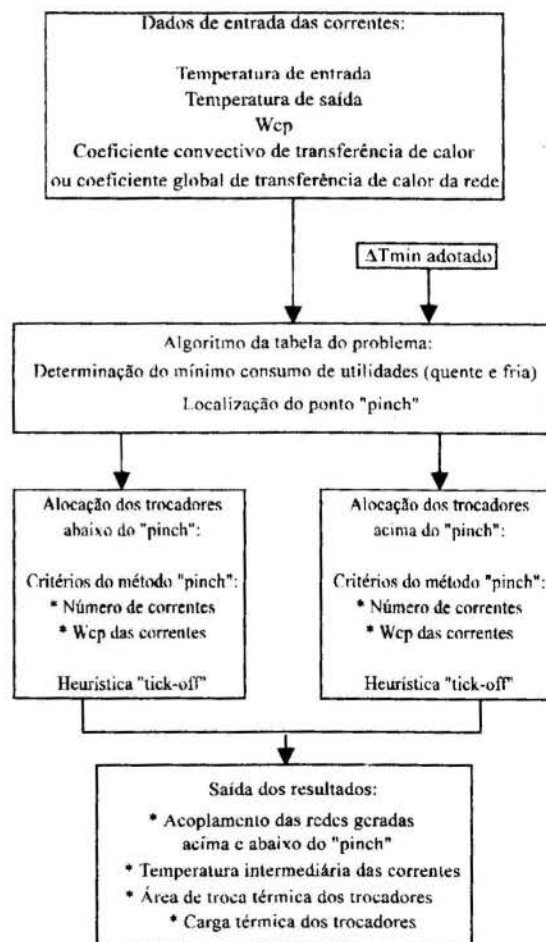


Figura 1 - Fluxograma de síntese de redes utilizando a análise "pinch"

Uma vez geradas as redes para cada período, estas são comparadas e identificadas as semelhanças. As heurísticas utilizadas para a determinação da rede flexível são baseadas no número de trocadores em cada rede, na área de cada trocador e na carga térmica. Escolhe-se a rede com o maior número de trocadores, como sendo a rede base. Esta rede poderá sofrer alterações, como adição ou exclusão de trocadores e divisão de correntes, sendo estas alterações função da topologia das redes geradas para os outros períodos. Na análise de topologia, a área e a quantidade de calor trocado pelo trocador são fatores importantes na escolha dos trocadores que comporão a rede multiperíodo. Geralmente escolhe-se os trocadores que tem a maior área de troca térmica para compor a rede.

A avaliação de área e energia é feita por meio de simulação da rede, para cada período de operação, com a topologia já definida. Nesta simulação a área dos trocadores poderão ser modificadas em função das condições mais críticas do sistema, sendo feita uma otimização de área, pois as áreas adotadas são sempre as maiores.

ESTUDO DE CASO

O caso estudado no presente trabalho foi apresentado por Kotjabasakis e Linnhoff (1987), e é mostrado na tabela 1, consistindo de quatro correntes que devem trocar calor, sendo duas quentes (Q1 e Q2) e duas frias (F1 e F2), com um ΔT_{min} de 10 °C para a rede e um coeficiente global de transferência de calor de 1 kW/m² °C. O problema proposto por Kotjabasakis e Linnhoff foi gerar uma rede multiperíodo que suportasse três períodos de operação, determinados antes da síntese da rede. Kotjabasakis e Linnhoff resolveram este caso através do método "pinch", para gerar uma única rede, e em seguida aplicaram os conceitos de "downstream path" e "sensitivity table" para alterar a rede, para que suportasse as outras condições de operação. Kotjabasakis e Linnhoff propuseram três soluções possíveis para o caso.

A representação na forma de diagrama de grade foi utilizada de acordo com a seguinte simbologia:

- - Corrente quente
- ← - Corrente fria
- (k) - Trocador de calor k
- - Utilidade j
- ⌊ - Divisão de correntes
- ⌋ - Desvio "by-pass"

Análise de topologia das redes geradas. Foi gerada uma rede para cada período de operação, utilizando o programa de síntese desenvolvido neste trabalho. Estas redes serviram de base para a proposição de uma rede flexível. As figuras 2 a 4 mostram as redes obtidas pelo programa de síntese de rede. Nestas figuras A1 é a utilidade quente, R1 e R2 as utilidades frias. Os trocadores foram numerados de modo a facilitar a localização de trocadores alocados na mesma posição, nas diferentes condições de operação.

Tabela 1 - Dados do caso Kotjabasakis e Linnhoff (1987)

Corrente	W_{cp} [kW/°C]	T_{ent} [°C]	T_{sai} [°C]
Período 1			
Q1	10,55	249	100
Q2	12,66	259	128
F1	9,144	96	170
F2	15,00	106	270
Período 2			
Q1	7,032	229	120
Q2	8,44	239	148
F1	9,144	96	170
F2	15,00	106	270
Período 3			
Q1	10,55	249	100
Q2	12,66	259	128
F1	6,096	116	150
F2	10,00	126	250

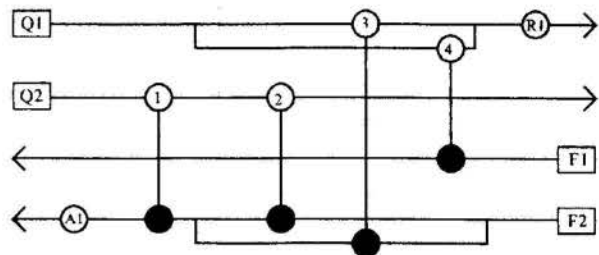


Figura 2 - Rede para o caso Kotjabasakis e Linnhoff (Período 1)

Uma análise mais detalhada mostra alguns pontos em comum entre as redes. O trocador 1 da rede gerada para o período 1, é o mesmo trocador para os outros dois períodos. Já o trocador 2 da rede gerada para o período 2 equivale ao trocador 4 da rede gerada para o período 1 e não tem equivalente para a rede gerada para o período 3. Esta diferença de configurações ocorre devido a mudança da localização do ponto "pinch", de período para período, resultando na mudança completa dos critérios de alocação dos trocadores.

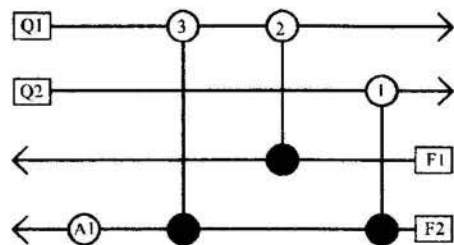


Figura 3 - Rede para o caso Kotjabasakis e Linnhoff (Período 2)

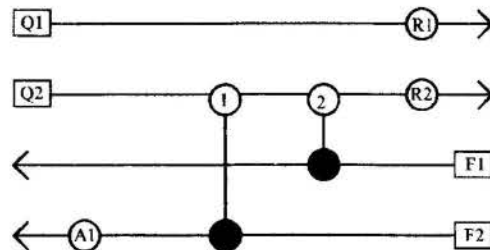


Figura 4 - Rede para o caso Kotjabasakis e Linnhoff (Período 3)

O objetivo é propor uma rede que satisfaça aos três períodos. A rede gerada para o período 1 pode satisfazer estas condições, com uma alteração que é o acoplamento do trocador 1 ao trocador 3. Pelas heurísticas adotadas neste trabalho esta rede é a mais adequada. Portanto a rede proposta, apresentada na figura 5, seria a rede mais indicada segundo análise de topologia das redes geradas para cada período. Nesta figura, dependendo da condição de operação os trocadores 1 e 3 podem sofrer alteração na vazão através do "by-pass".

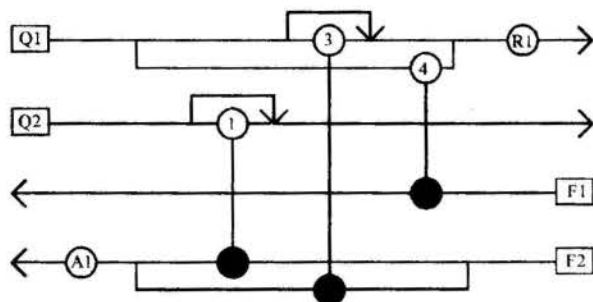


Figura 5 - Rede flexível proposta para o caso Kotjabasakis e Linnhoff

A figura 6 mostra a rede obtida por Kotjabasakis e Linnhoff (1987), onde eles propõem a retirada do trocador 1. Com esta modificação a rede mostrada na figura 6 torna-se muito parecida com a rede proposta no presente trabalho.

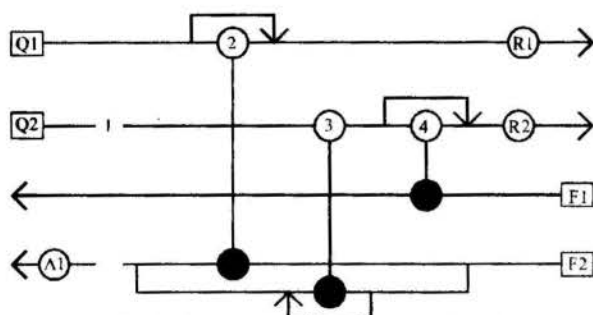


Figura 6 - Rede flexível proposta para o caso Kotjabasakis e Linnhoff

Avaliação de área e energia por simulação. A tabela 2 apresenta os resultados obtidos para os três períodos de operação. Estes resultados mostram que se houvesse um acoplamento entre as três redes haveria oito trocadores na rede flexível proposta e a área global de troca térmica entre as correntes seria de aproximadamente 248 m^2 , sendo esta área menor que a proposta por Kotjabasakis e Linnhoff (1987), para a solução 1, a primeira das três soluções propostas no trabalho.

Há a necessidade de definir uma nova configuração para a rede flexível, pois a rede proposta no estudo de topologia não satisfaz as condições de troca térmica das correntes nos diversos períodos de operação, segundo resultados de simulação. Entretanto, considerando a topologia proposta, pode-se fazer uma pequena alteração, de forma a satisfazer as condições de troca térmica, com a adição de uma utilidade fria na corrente 2, pois apenas esta corrente não satisfaz as condições de troca térmica.

Tabela 2 - Resultados obtidos para o caso Kotjabasakis e Linnhoff (1987)

Trocador	Corrente	Período 1		Período 2		Período 3	
		Taxa de calor [kW]	Área [m ²]	Taxa de calor [kW]	Área [m ²]	taxa de calor [kW]	Área [m ²]
1	Q2xF2	126,60	11,75	768,04	12,86	1230,00	60,8
2	Q2xF2	1531,86	88,48	---	---	---	---
3	Q1xF2	463,14	46,31	89,83	1,44	---	---
4	Q1xF1	676,66	10,02	676,66	19,96	---	---
5	Q2xF1	---	---	---	---	207,26	10,75
A1	VxF2	338,40	10,51	1603,50	28,46	10	0,25
R1	AGRxQ1	432,24	13,50	---	---	1571,95	31,83
R2	AGRxQ2	---	---	---	---	224,08	7,71

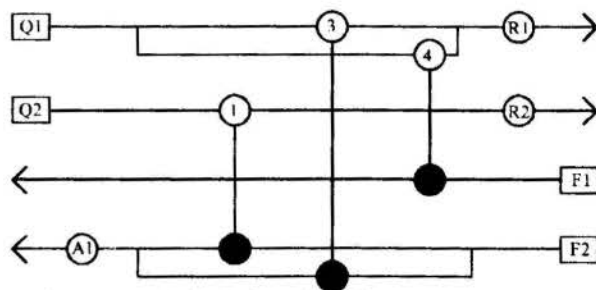


Figura 7 - Rede flexível modificada proposta para o caso Kotjabasakis e Linnhoff

Com o auxílio do simulador pode-se otimizar as áreas dos trocadores da rede modificada, mostrada na figura 7, tendo ocorrido uma redução de área da ordem de 20% em relação ao caso anterior. Estes resultados são mostrados na tabela 3.

Tabela 3 - Resultados obtidos para o caso Kotjabasakis e Linnhoff (1987)

Trocador	Corrente	Período 1		Período 2		Período 3	
		Taxa de calor [KW]	Área [m ²]	Taxa de calor [KW]	Área [m ²]	Taxa de calor [KW]	Área [m ²]
1	Q1xF1	676,57	20,27	676,57	17,39	207,27	5,34
2	Q2xF2	1658,46	99,07	768,04	27,92	1230,00	60,8
3	Q1xF2	452,20	15,34	90,69	1,92	---	---
A1	VxF2	349,5	10,78	1602,00	28,45	10	0,25
R1	AGRxQ1	379,8	11,34	---	---	1364,10	29,34
R2	AGRxQ2	---	---	---	---	427,91	13,68

A rede flexível proposta é, portanto, a apresentada na figura 7 e as superfícies de troca térmica são dadas na tabela 4, onde estas áreas suportam os períodos de operação impostos no problema.

Tabela 4 - Resultados da rede flexível proposta para o caso Kotjabasakis e Linnhoff (1987)

Trocador	Corrente	Área [m ²]	Taxa de Calor [KW]		
			Período 1	Período 2	Período 3
1	Q1xF1	20,27	676,57	676,57	207,27
2	Q2xF2	99,07	1658,46	768,04	1230,00
3	Q1xF2	15,34	452,20	90,69	---
A1	VxF2	28,45	349,5	1602,00	10
R1	AGRxQ1	29,34	379,8	---	1364,10
R2	AGRxQ2	13,68	---	---	427,91

Análise econômica. A avaliação econômica deste caso utilizou a equação de custo apresentada no trabalho de Floudas e Grossmann (1987):

$$\text{Custo} = 4333.A^{0.6} \quad (2)$$

onde o Custo é o custo global da área de troca térmica A, para cada trocador de calor.

O resultado de custo de área instalada é **US\$ 202,971.6**, sendo este resultado comparável ao obtido por Kotjabasakis e Linnhoff para a solução 2 e pouco maiores que a solução 3. Já os custos operacionais, ou custos de utilidades, foram calculados com base nos seguintes dados, apresentados no trabalho de Kotjabasakis e Linnhoff:

- Custo do vapor (300 °C) = 171.428×10^{-4} US\$/kWh;
- Custo da água de refrigeração (30 a 50 °C) = 60.576×10^{-4} US\$/kWh

A tabela 5 mostra os resultados do custo de utilidades utilizando estes dados. Os resultados são comparáveis aos resultados obtidos por Kotjabasakis e Linnhoff, indicando a consistência do método utilizado.

Tabela 5 - Custo de utilidades nos períodos de operação

Trocador	Custo de utilidades [US\$/h]		
	Período 1	Período 2	Período 3
A1 (aquecedor)	5,99	27,46	0,17
R1 (resfriador)	2,30	-----	8,26
R2 (resfriador)	-----	-----	2,59
Total	8,29	27,46	11,02

CONCLUSÕES

A aplicação da análise "pinch" garantiu o mínimo consumo de utilidades para as redes geradas para cada período, partindo portanto de condições ótimas de recuperação energética. Os estudos de análise de topologia, baseados nas heurísticas propostas no presente trabalho, mostraram-se satisfatórios, sendo criada uma rede com poucos trocadores, a qual sofreu pequenas modificações nas etapas posteriores. Na análise de área, feita com o simulador, foi possível otimizar as áreas de troca térmica através de várias execuções do programa de simulação, desenvolvido no presente trabalho. Esta metodologia

apresentou resultados satisfatórios, quando comparados ao apresentados na literatura, mostrando que a avaliação sistemática quando utilizada em conjunto com a simulação de redes de trocadores de calor produz redes flexíveis eficientes.

BIBLIOGRAFIA

Floudas, C. A. e Grossmann, I. E., 1986, "Synthesis of flexible heat exchanger networks for multiperiod operation", *Comp. Chem. Engng.*, v. 10, n. 2, p. 153-168.

Floudas, C. A. e Grossmann, I. E., 1987, "Automatic generation of multiperiod heat exchanger network configuration", *Comp. Chem. Engng.*, v. 11, n. 2, p. 123-142.

Kotjabasakis, E., 1988, "Design of heat exchanger networks", Ph. D. Thesis, The University of Manchester Institute of Science and Technology, Manchester, U. K.

Kotjabasakis, E. e Linnhoff, B., 1986, "Sensitivity tables for the design of flexible process (1)- How much contingency in heat exchanger networks is cost-effective?", *Chem. Eng. Res. Des.*, v. 64, p. 197-211, May.

Kotjabasakis, E. e Linnhoff, B., 1987, "Flexible heat exchanger networks design: comments on the problem definition and on suitable solution techniques", *ICHEME Symposium Series*, n. 105, p. 1-17.

Linnhoff, B. e Hindmarsh, E., 1983, "The pinch design method for heat exchanger networks", *Chem. Eng. Sci.*, v. 38, n. 5, p. 745-763.

Linnhoff, B. e Kotjabasakis, E., 1986, "Downstream paths for operable process design", *Chem. Eng. Prog.*, p. 23-28, May.

Marselle, D. F., Morari, M. e Rudd, D. F., 1982, "Design of resilient processing plants - II Design and control of energy management systems", *Chem. Eng. Sci.*, v. 37, n. 2, p. 259-270.

ABSTRACT

In many situations, changes on the operational conditions of chemical process affects directly the heat exchange network (HEN). However, few studies have been conducted on flexible networks. In this work, a synthesis methodology of flexible network is presented, based on pinch analysis and on the systematic rate of the net, considering the topology analysis and the calculation of the area and energy of the heat exchangers.

FRICTION FACTOR IN ANNULAR CONDUITS WITH TUBULAR FINNS



José R. Sodré and José A. R. Parise
PUC-Rio, Department of Mechanical Engineering
Rua Marquês de São Vicente, 225 - Gávea
22453-900 - Rio de Janeiro - RJ

SUMMARY

The friction factor for turbulent fully developed flow of air at steady state conditions through an annular conduit with tubular fins has been determined experimentally. The tubular fins consisted of tubes inserted in the annular gap to increment heat transfer. The finned annular section was built to simulate the heat exchangers (cooler and heater) of a Stirling engine. The tests were made in an annular section with a radius ratio of 1.083, covering Reynolds numbers between 4000 and 20000. The results have shown that the utilization of annular fins increased the loss by friction by a factor of 7 to 12, within the range studied.

INTRODUCTION

Finned annular sections has been studied previously by other authors. Flat fins placed along the internal pipe diameter of the annular conduit, longitudinal to the flow direction, are well investigated (Patankar et al., 1979, Braga, 1987). However, a work considering annular conduit with tubular fins has not been found in the literature. Tubular fins consist of circular pipes placed along the perimeter of the annular section, which external diameter coincide with the annular gap (Fig. 1). This type of fin has been used in the cooler and heater of the Stirling engine described by Bartolini and Naso (1984), to increment heat exchange.

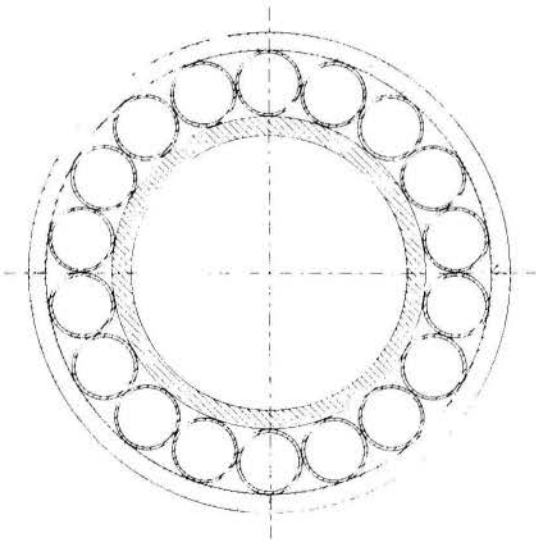


Figure 1- Annular section with tubular fins.

In this work, the friction factor has been studied for turbulent fully developed flow of air in an annular conduit with tubular fins. Experiments have been carried out in a test section built to simulate the heat exchangers of a Stirling engine (heater and cooler), to determine the pressure loss along the finned region. The results are, thus, expected to

be of direct application to the mentioned engine, and to furnish information for future analysis on the performance of this type of fin.

EXPERIMENTS

The test section used in the experiments, built to simulate the heat exchangers (cooler and heater) and the regenerator of a Stirling engine, was connected to an air circuit, shown schematically in Fig. 2. The air circuit comprised an air filter, a silencer, a compressor, two valves for flow control, an orifice plate, plenum chambers, dampening chamber and straighteners. Air was blown by a Roots compressor, driven by an electric motor. The flow amount was controlled by two butterfly valves, one of them restricting the flow to by-pass, and the other, to the test section. The flow amount to the test section was measured by an orifice plate, installed according to specifications of ASME (1971). The pressure drop in the orifice plate was read by a Dwyer well-type inclined manometer or by a Dwyer U-tube water column manometer, with resolutions of 0.5mm and 2mm, respectively. The inclined manometer was used for low flows. The tube used in the air circuit had a diameter of 106.75mm \pm 0.05mm ID. A silencer was installed between the filter and the compressor, to reduce noise. A plenum chamber and a dampening chamber were located after the compressor, to eliminate pulsation effects. A flow straightener was used after the flow control valve, before the developing length to the orifice plate. Another straightener was used between a second plenum chamber and the test section.

Copper-constantan ATP/H-TEK T type thermocouples were used to measure the temperature of the air flowing in the orifice plate and in the test section. The readings from the thermocouples were registered by a voltmeter, with resolution of 0.01mV. Ambient air temperature was read by a mercury-in-glass Incotherm thermometer, with resolution of 0.1°C. Atmospheric pressure was taken by a Fisher Scientific mercury-column barometer, with resolution of 0.1mmHg. Room air humidity was measured by a Henni-René Graf thermohygrometer, with resolution of 2%.

The test section had a single internal pipe and external pipes with different diameters for the cooler, regenerator

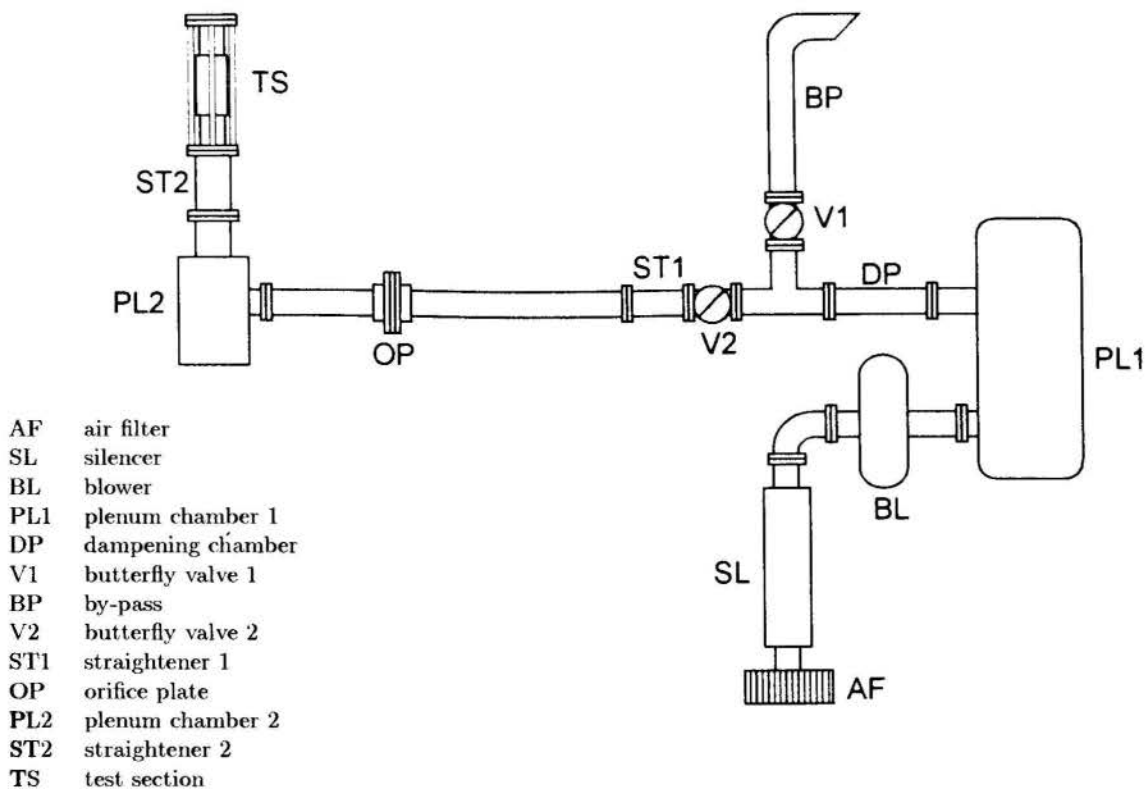


Figure 2- Schematic of the air circuit.

and heater locations (Fig. 3). That was done to reproduce the radius ratios of the heat exchangers and regenerator of the Stirling engine, as quoted by Bartolini and Naso (1984). The cooler and the heater were located in the extremes of the test section, with the regenerator in the middle. That was in accordance with the project of the Stirling engine. The internal pipe of the test section had a diameter of $71.21\text{mm} \pm 0.01\text{mm OD}$, the diameter of the external pipe of the heater was $76.63\text{mm} \pm 0.03\text{mm ID}$, and the external pipe diameter of the cooler was $77.56\text{mm} \pm 0.02\text{mm ID}$. With these pipes, radius ratios of 1.076 and 1.089 were obtained for the heater and cooler, respectively, reproducing the Stirling engine described by Bartolini and Naso (1984). The section of the heater had a total length of 180mm, and seven locations of pressure reading were spaced in intervals of $30\text{mm} \pm 0.3\text{mm}$. The length of the cooler was 210mm, with eight pressure reading locations spaced as in the heater. To obtain an averaged pressure, each location of reading had four taps, distant 90° from each other along the perimeter (Fig. 4). The pressure taps were built with holes of 0.8mm. A multi-point valve was used to select the location of reading.

The pressure drop along the test section was measured with one Dwyer well-type inclined manometer, one Dwyer U-tube water column manometer, and one Dwyer U-tube mercury column manometer. The instruments had resolutions of 0.2mm, 1mm, and 1mm, respectively. For the tests without fins, the readings from the first tap in the entrance of the cooler and the heater were neglected in the evaluation of the pressure drop, to assure that the readings considered were not affected by the changes in the flowing

area. The changes in the flowing area are characterized by the tiny annular area of the cooler and the heater, to the larger cross-sectional area in the regenerator, and the curved regions in the extremes of the section (see Fig. 3). The fully developed condition was quickly reached, as demonstrated by the uniform pressure distribution in Figs. 5 and 6.

For the tests with finned region, pressure readings were made in three locations at the inlet and in two locations in the outlet, as shown in Fig. 7. It can be seen the intensity of drop in pressure after the flow enters the finned region, and the rise in pressure at the exit of the region, due to an abrupt expansion. The pressure drop was determined from the readings of the second tap before and the second tap after the finned region. The taps located right at the entrance and at the exit of the finned regions were under effects of flow contraction and expansion, respectively.

The fins were plastic tubes (nylon) of external diameter $3.00\text{mm} \pm 0.05\text{mm}$, and internal diameter $2.00\text{mm} \pm 0.05\text{mm}$. The fins were fitted in the cooler only, as the gap of the heater were too small (2.71mm). The original gap in the cooler was 3.175mm, and had to be reduced to the diameter of the fins (3.00mm). To solve it, the external diameter of the internal pipe of the annular section was augmented, by sticking two layers of adhesive tape on it, which thickness was 0.1mm. It was verified that the inclusion of the tape did not alter the friction factor of the bare section. Seventy eight tubular fins were fitted in the section.

The apparatus was constructed in the laboratories of PUC-Rio, where all the experiments were performed. For the tests without fins, the estimated uncertainties associated to the determination of the mass flow rate and Reynolds

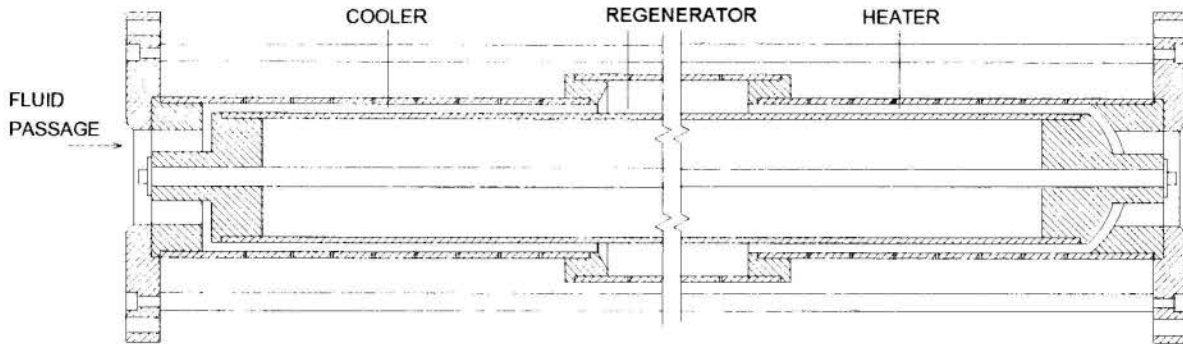


Figure 3- Longitudinal view of the test section.

number were $\pm 1.4\%$ and $\pm 1.9\%$, for the cooler and heater, respectively. The uncertainty associated to the friction factor for the cooler was $\pm 5.0\%$, and for the heater, $\pm 4.5\%$. The total uncertainty related to the determination of the friction factor from Eq. (1) was estimated in $\pm 9.3\%$ and $\pm 7.6\%$, for the cooler and heater, respectively. The uncertainties for the mass flow rate, Reynolds number and friction factor for the finned section were $\pm 1.4\%$, $\pm 5.2\%$ and $\pm 7.3\%$. The total uncertainty associated to the determination of the friction factor through Eq. (10) was estimated in $\pm 11.3\%$. The uncertainties were calculated according to the method proposed by Kline and McClintock (1953).

The procedure adopted in the execution of the experiments involved a regular check of the ambient air condition for each test run. Atmospheric pressure, room air temperature and humidity were always registered. Soon after a new flow was set through the butterfly valves, the steady state condition was obtained. The readings from the instruments were taken manually, and each test run took approximately 5 min. Both flow directions, cooler-regenerator-heater and heater-regenerator-cooler, were tested.

The measured quantities during the experiments were: atmospheric pressure, ambient air temperature, room air humidity, air temperature at the orifice plate inlet, air temperature at the test section entrance, pressure difference across the orifice plate, pressure difference between the test section exit and the atmosphere, pressure difference through the test section, pressure difference between the orifice plate inlet and the test section entrance, and pressure difference between the compressor outlet and the test section entrance. The preliminary data were converted by a data reduction computer program, written in BASIC language. The output from the program included the corresponding mass flow rate, Reynolds number and friction factor.

DATA REDUCTION

In the analysis applied for data reduction, the fluid is considered to be at a steady state flow regime, and the boundary layer is fully developed. Spatial dependences of fluid properties in the radial direction are not taken into account. All fluid properties are written as an average value in time and space, except when indicated.

Bare Section. The pressure drop due to friction of the flowing fluid with the walls of the annular conduit along a length L , ΔP_b , is given by the expression from Darcy-Weissbach,

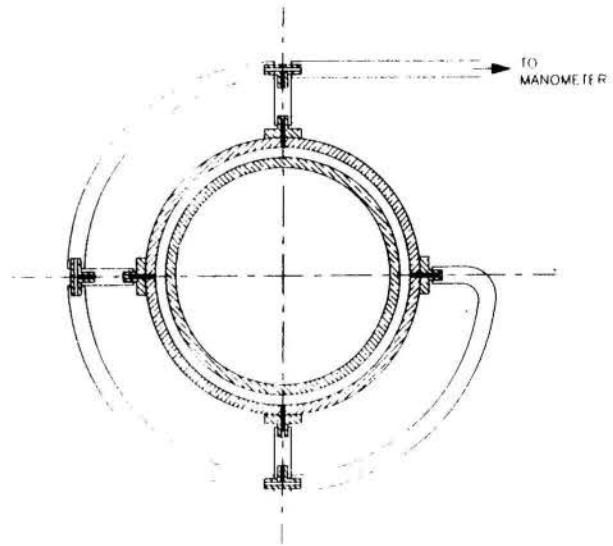


Figure 4- Pressure taps distribution in a section of reading.

$$\Delta P_b = f_b \frac{L}{D_h} \bar{\rho} \frac{\bar{v}^2}{2}, \quad (1)$$

where $\bar{\rho}$ is the fluid density. The hydraulic diameter of the annular section, D_h , is so described,

$$D_h = D_e - D_i, \quad (2)$$

where D_e and D_i are the external and internal diameters of the annular section, respectively. The average velocity of approach, \bar{v} , is so given,

$$\bar{v} = \frac{\dot{m}}{\bar{\rho} A_b}, \quad (3)$$

where \dot{m} is the total mass flow rate, and A_b is the cross-sectional area of the annular conduit. The friction factor for the bare section, f_b , can be written from Eq. (1),

$$f_b = \frac{\Delta P_b}{\frac{L}{D_h} \bar{\rho} \frac{\bar{v}^2}{2}} \quad (4)$$

and can be represented in terms of Reynolds number,

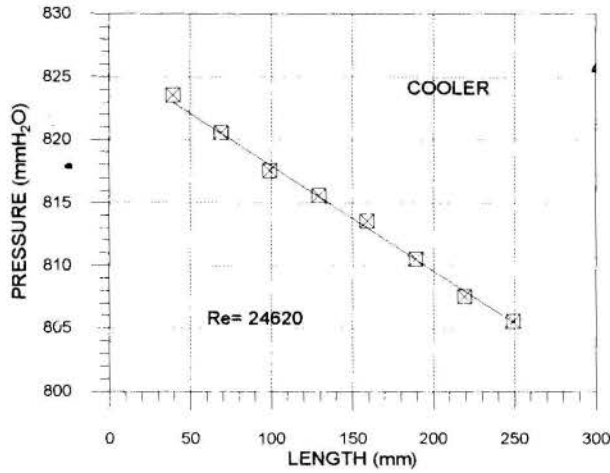


Figure 5- Pressure distribution in the bare annular region.

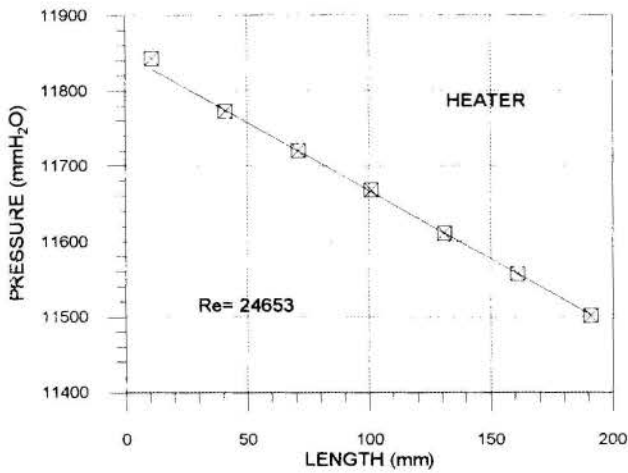


Figure 6- Pressure distribution in the bare annular region.

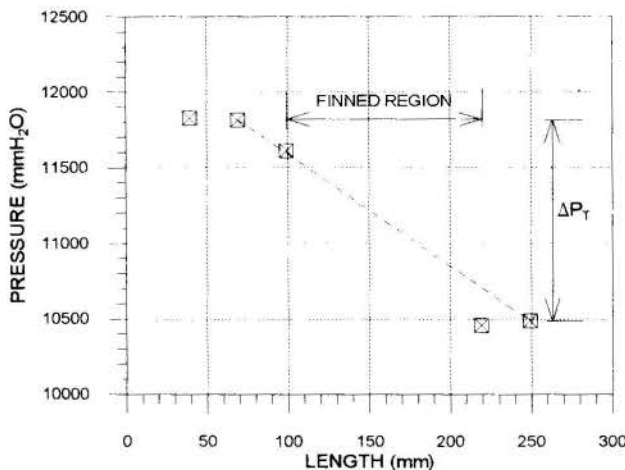


Figure 7- Pressure distribution in the finned annular region.

$$f_b = a_1 Re_1^{b_1} \quad (5)$$

where a_1 and b_1 are constant coefficients determined experimentally. The Reynolds number, Re , is so written,

$$Re = \frac{\bar{\rho} v D_h}{\bar{\mu}} \quad (6)$$

where $\bar{\mu}$ is the viscosity of the fluid.

There are additional pressure losses which arise from the flow and test section characteristics. According to Kays and London (1964), alterations in the fluid density due to variations of pressure and temperature along the section generate a pressure drop, ΔP_d , which is thus calculated,

$$\Delta P_d = \left(\frac{\dot{m}}{A_b} \right)^2 \left(\frac{1}{\rho_o} - \frac{1}{\rho_i} \right) \quad (7)$$

where ρ_i and ρ_o are the respective fluid densities calculated at the entrance and at the exit of the length considered.

If the flow is upwards on the vertical, there is a pressure drop due to the elevation, ΔP_h (Kays and London, 1964),

$$\Delta P_h = \bar{\rho} g L \quad (8)$$

where g is the free-fall acceleration.

So, for the bare section, the total pressure drop, ΔP_T , is so given,

$$\Delta P_T = \Delta P_b + \Delta P_d + \Delta P_h \quad (9)$$

Re-writing Eq. (9), the pressure drop due to friction in the bare annular section is expressed,

$$\Delta P_b = \Delta P_T - (\Delta P_d + \Delta P_h) \quad (10)$$

ΔP_T is the measured pressure; ΔP_d and ΔP_h are evaluated from Eqs. (7) and (8). With the value of ΔP_b from Eq. (10), f_b is obtained in Eq. (4) and is plotted against Reynolds number, determining the values of coefficients a_1 and b_1 [Eq. (5)]. The density and the viscosity of the fluid are calculated as function of pressure, temperature and humidity.

Finned Section. The presence of fins generates an additional pressure drop, ΔP_f , which is thus calculated,

$$\Delta P_f = n K_f \bar{\rho} \frac{\bar{v}^2}{2} \quad (11)$$

where n is the number of fins, and K_f is the pressure loss coefficient associated to a row of fins.

The total pressure drop by friction through the finned annular region, ΔP_{ft} , is the sum of the pressure drop due to friction with the walls of the annular conduit, plus the additional pressure drop due to the presence of fins,

$$\Delta P_{ft} = \Delta P_b + \Delta P_f \quad (12)$$

ΔP_{ft} can also be expressed by Darcy-Weissbach equation,

$$\Delta P_{ft} = f_f \frac{L}{D_h} \bar{\rho} \frac{\bar{v}^2}{2} \quad (13)$$

where f_f is the friction factor for the finned region, defined by the sum,

$$f_f = f_b + K_f \frac{D_h}{L} \quad (14)$$

The friction factor f_f can be explicit from Eq.(13),

$$f_f = \frac{\Delta P_{ft}}{L_e \frac{\rho v^2}{2}}, \quad (15)$$

and can also be represented in terms of Reynolds number,

$$f_f = a_2 Re_2^{b_2}, \quad (16)$$

where a_2 and b_2 are constant coefficients determined experimentally.

The thickness of the fins reduces the free-flow cross sectional area and, as a consequence, the flow is contracted at the entrance of the finned region and expanded at the exit, generating additional losses. If the pressure taps are located at the entrance and at the exit of the finned region, these additional pressure drops must be considered. According to Kays and London (1964), the pressure drop due to contraction of the flow, ΔP_c , is so described,

$$\Delta P_c = \left(\frac{\dot{m}}{A_f}\right)^2 \frac{1}{\rho_i} \left[1 - \left(\frac{A_f}{A_b}\right)^2 + K_c\right] \quad (17)$$

A_f is the minimum flow area in the finned region, given by,

$$A_f = A_b - n\pi \frac{d_e^2 - d_i^2}{4}, \quad (18)$$

where d_e and d_i are the respective tubular fin external and internal diameters.

Tew (1978) proposed the following expression for the contraction coefficient K_c , tested against the experimental data on different geometries by Kays and London (1964),

$$K_c = 0.5 - 0.4 \frac{A_f}{A_b}. \quad (19)$$

The pressure drop due to expansion of the flow is calculated in a similar way (Kays and London, 1964),

$$\Delta P_e = \left(\frac{\dot{m}}{A_f}\right)^2 \frac{1}{\rho_o} \left[1 - \left(\frac{A_f}{A_b}\right)^2 + K_o\right]. \quad (20)$$

The expansion coefficient, K_o , is given by the following expression (Tew, 1978),

$$K_o = 1 - 2.0928 \frac{A_f}{A_b} + 0.996 \left(\frac{A_f}{A_b}\right)^2. \quad (21)$$

Thus, effects of flow entrance and exit in the finned region are taken into account by ΔP_c and ΔP_e . These effects should not influence the friction factor f_f , as it is based on ΔP_{ft} only.

The overall pressure drop measured between the entrance and the exit of the finned region, ΔP_T , is given by the parcels,

$$\Delta P_T = \Delta P_{ft} + \Delta P_d + \Delta P_h + \Delta P_c + \Delta P_e. \quad (22)$$

Re-writing Eq. (22) to express ΔP_{ft} , results,

$$\Delta P_{ft} = \Delta P_T - (\Delta P_d + \Delta P_h + \Delta P_c + \Delta P_e). \quad (22)$$

ΔP_T is measured experimentally; ΔP_d , ΔP_h , ΔP_c and ΔP_e are calculated through Eqs. (7), (8), (17) and (20). From the value determined for ΔP_{ft} by Eq. (22), f_f is evaluated from Eq. (15) and is plotted against Reynolds number in Eq. (16), establishing the constants a_2 and b_2 . As for the bare section, Reynolds number is also based on the velocity of approach to the finned region [Eq. (6)].

RESULTS AND DISCUSSION

The friction factor for the bare sections of the cooler and heater are displayed in Figs. 8 and 9. The data shown were obtained for tests made with both flow directions, cooler-regenerator-heater and heater-regenerator-cooler. Covering Reynolds numbers between 4000 and 27000, the application of linear regression to the data resulted in the following curves:

$$\text{Cooler : } f_b = 0.190 Re^{-0.183}, \quad (23)$$

$$\text{Heater : } f_b = 0.234 Re^{-0.204}. \quad (24)$$

Chauvenet's criterion has been used to eliminate inconsistent data (Holman, 1994). Though the coefficients are not the same, the maximum difference between the curves in the range is 3.5%, for Reynolds equal to 4000.

Although numerous empirical works on annular sections are found in the literature, larger radius ratios than the ones dealt with in the present work were always used. Thus, comparisons have been made with authors who treated the problem analytically, proposing methods to cover any radius ratio. Friction factor expressions for flow through annulus proposed by Malák et al. (1975), Jones and Leung (1981) and Araújo (1989) are plotted in Figs. 8 and 9. Good agreement is found throughout the range studied between the present work and the ones from the other authors. The maximum discrepancy is found in the lower limit of Reynolds, near the transition region.

Figure 10 shows the friction factor for the finned cooler. Again, the data was obtained for flow in both directions, covering Reynolds numbers between 4000 and 20000. Linear regression applied to the data yielded the expression below,

$$f_f = 32.713 Re^{-0.501}. \quad (25)$$

Chauvenet's criterion has also been applied to eliminate inconsistent data. Comparisons with results by other authors have not been made, as studies on similar finned sections have not been found in the literature. The friction factor in the finned annulus is about 7 to 12 times larger than in the bare section.

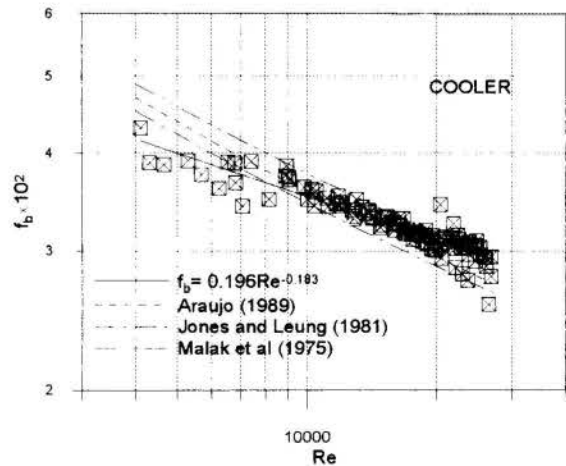


Figure 8- Friction factor in the bare annular region.

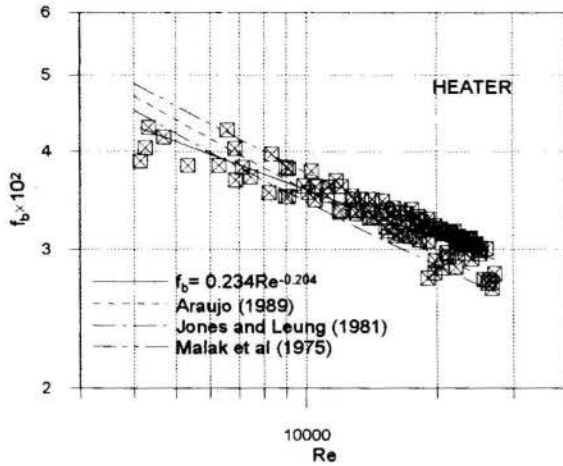


Figure 9- Friction factor in the bare annular region.

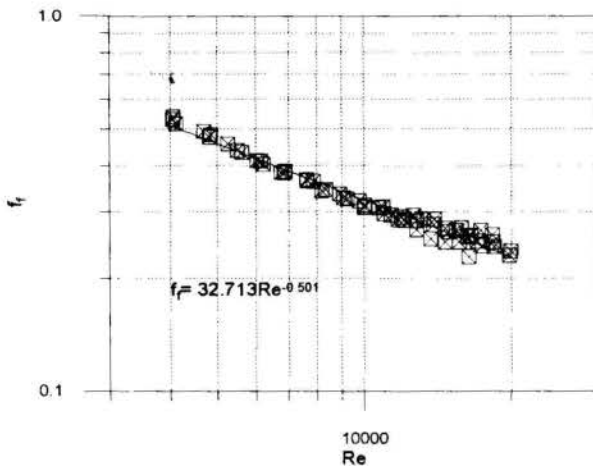


Figure 10- Friction factor in the finned annular region.

CONCLUSION

Experiments carried out in an annular section, simulating the heat exchangers (cooler and heater) of a Stirling engine, have shown that the introduction of tubular fins increases the pressure loss by friction by a factor of seven to twelve times. The results were obtained for an annular section of radius ratio 1.083, ratio of the fin thickness to the hydraulic diameter of the annular section of 0.084, and Reynolds numbers between 4000 and 20000.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank the Brazilian Government's Science and Technology body, CNPq, for the financial support to this project.

REFERENCES

Araújo, P. M. S., 1989, "A Semi-analytical Approach to Turbulent Flow through Concentric Annuli", *Heat and Technology*, vol. 7, n. 3-4, pp. 45-56.

ASME, 1971, "Fluid Meters, their Theory and Application", Report from the Research Committee on Fluid Meters, 6th ed..

Bartolini, C. M., and Naso, V., 1984, "Theoretical Predictions of the Performance of Stirling Engines Metallic Regenerators", The 2nd Int. Conference on Stirling Engines, Shanghai.

Braga, C.V.M., 1987, "Thermo-Hydraulic Analysis of Bare and Finned Annular Sections", D.Sc. Thesis, PUC-Rio. (In Portuguese)

Holman, J. P., 1994, "Experimental Method for Engineers", McGraw-Hill Book Co., sixth ed..

Jones, O. C., Jr., and Leung, J. M. C., 1981, "An Improvement in the Calculation of Turbulent Friction in Smooth Concentric Annuli", *J. of Fluids Engineering*, vol. 103, pp. 615-623.

Kays, W.M., and London, A.L., 1964, "Compact Heat Exchangers", McGraw-Hill Book Company.

Kline, S. J., and McClintock, F. A., 1953, "Describing Uncertainties in Single Sample Experiments", *Mech. Eng.*, pp. 3-8.

Malák, J., Hejna, J., and Schmid, J., 1975, "Pressure Losses and Heat Transfer in Non-circular Channels with Hydraulically Smooth Walls", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 18, pp. 139-149.

Patankar, S.V., Ivanovic, M., and Sparrow, E. M., 1979, "Analysis of Turbulent Flow and Heat Transfer in Internally Finned Tubes and Annuli", *Journal of Heat Transfer*, vol. 101, pp. 29-37.

Sodré, J.R., 1991, "Experimental Determination of Friction Factor for Annular Regions with Tubular Fins or Filled with Regenerative Porous Matrices", M.Sc. Dissertation, PUC-Rio. (In Portuguese)

Tew, R., 1978, "A Stirling Engine Computer Model for Performance Calculations", NASA - TM - 78884.



EXPERIMENTAL EXAMINATION OF A PROTOTYPE OF THE CAPILLARY PUMPED LOOP WITH POROUS CONDENSER



Valeri V. Vlassov, Issamu Muraoka
Space Mechanics and Control Division - DEM
National Institute for Space Research - INPE
12227-010 - São José dos Campos - SP - Brazil

SUMMARY

A new conception of capillary pumped loop design is presented. A laboratory prototype was developed and tested. The difference of the traditional approach is in condenser design. A wick structure is placed in the condenser, like in the evaporator. The prototype was examined with several wick structures, made from layers of mesh. Start-up and functional tests were done. The phase distribution was observed via transparent walls. Wicked condenser presents a good perspective to provide passive control with non-condensable gas in CPL.

INTRODUCTION

Capillary pumped loop (CPL) represents a new generation of heat pipes. Basically the CPL consists of evaporator with porous media, two separate tubes for vapor and liquid, and condenser. The differences, compared to the canonical heat pipes, are basically in: a) the separation of streams, that is, liquid and vapor flow in separate channel, and b) the use of the porous structure only in evaporator. These two changes provide a much better heat transport performance to the CPL, because of considerable improving in the capillary limit and total elimination of entrainment limit. Stenger (1966) developed one of the first laboratory prototype of CPL.

Several types of CPL exist. Usually a liquid storage reservoir is connected to the liquid line, for control purpose. The reservoir compensates the liquid volume change because of movement of liquid/vapor interface in the tube-type condenser. Also this device supplies the liquid to the evaporator during start-up.

European approach includes active controlled reservoir, with heater and cooling system. It solves all problem of liquid conditions at evaporator inlet, but adds complexity to the system. One of prototype was tested successfully (Bazzo and Colle, 1995).

CPLs without reservoir were developed in Russia by Maidanik and Goncharov (1991). The test results showed perspective of this design. The sintered powder wick with very fine porous, used in these prototypes, provides very high specific performance.

Traditionally the cylindrical shape of evaporator is applied. The flat type evaporator is more suitable for application. One of the this CPL type were developed in Japan (Furukawa, 1987).

The CPLs are very attractive for satellite thermal control. They have much higher heat transport characteristic and they are not so sensitive to body force fluctuations (caused, for example, by orbital maneuvers of satellite). Also CPLs have more flexibility to adjust in the satellite lay-out than heat pipes. The vapor or liquid line can be bent as electrical cable, due to no existence of wick inside them. In fact, few flight tests of CPL were realized up to now and the CPLs are under the investigation at the present.

From other hand, the CPL has very poor self-control capacity. Even the active controlled reservoir provides a narrow

range of control. One of promising idea is to apply the non-condensable gas technique to CPL. This technique is widely applied to heat pipes.

This paper presents a qualitative analysis of an experimental investigation of a capillary pumped loop with wicked condenser. This development is the first step to use non-condensable gas as CPL control technique. In addition, the porous structure in the condenser can fix the vapor/liquid interface and prevent some dynamic instabilities. Such instabilities were observed by several investigators, when the condensation occurs inside the smooth tubes.

DESIGN OF CONCEPTUAL MODEL OF CPL

In this development, the evaporator and the condenser have the similar configuration, as shown in Figure 1. Externally, they have the shape of a disk of 79 mm diameter and 36 mm high. The vapor and liquid line are plastic tubes, with 4.2 mm internal diameter and 220 mm long. Wicks are made of multilayers of brass mesh screen number 100, pressed together by the base plates. A skin heater, connected to the grooved base plate, simulates heat input in the evaporator. The base plate transfer the heat to the wick through the grooved side. In the condenser, a controlled water system is used for heat removal. The water system cools the base plate, that is in contact with the wick. The cases and the tubes are transparent and they allow the observation of the phase distribution (liquid and vapor) inside the CPL. The cases are in polyester resin and tubes are in PVC.

In the evaporator, the two top layers of the wick were made from fiber-glass fabric, to improve the thermal conductivity of the wick.

The working fluid is ethanol.

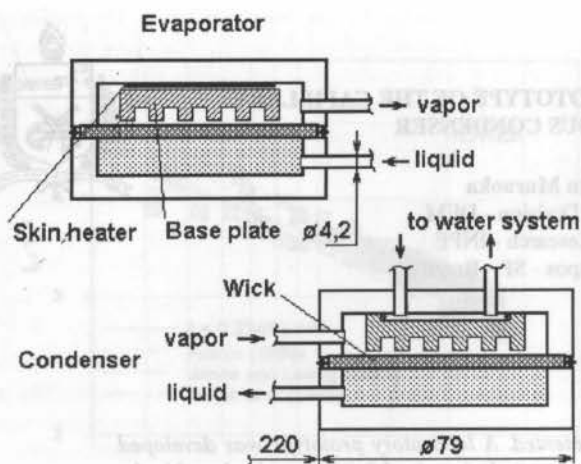


Fig. 1. The CPL design

TEST SET-UP

The following test lay-out was used to perform the experiment. A vacuum system, composed with mechanical and diffusion pumps, is used to evacuate the CPL before filling. Two pressure transducers registered the pressure in pipe line during the evacuation. Two digital thermometers show the temperature of the evaporator base plate and the temperature of the water in the cooling system, using T type thermocouple. A stabilized power source is used to supply the skin heater. The scheme is presented in the Figure 2.

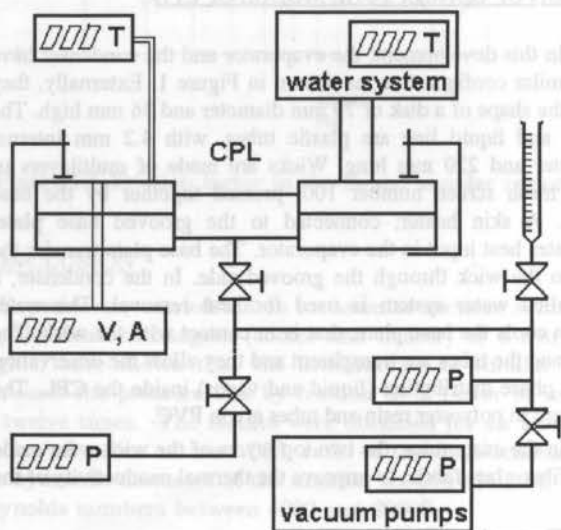


Fig. 2. Lay-out of test set-up

The cooling system is able to support the temperature of circulated water in the range of 8°C to 70°C with the precision of $\pm 0,5^\circ\text{C}$. The flow rate is up to 7 liters per minute.

Preparation process includes cleaning of all components of CPL with detergent, distilled water and ethanol. This simplified technology cannot avoid the formation of non-condensable gases

during the operation, but the wicked design of condenser are not very sensitive to this phenomenon.

Before filling the system was evacuated up to $6,0 \cdot 10^{-3}$ torr during 12 hours. Calculated amount of charge was 84 cm^3 , but visually the system seems to be filled with 76 cm^3 . During filling process some vapor bubbles in liquid line were observed.

TESTS

Transparent containers and tubes allow to observe phase distribution during tests, but they produce high rate of contamination with non-condensable gas. Thus, all tests were limited with duration of about 6 hours after filling. After every test the work liquid is flushed out and system is evacuated for next filling. The photo in Figure 3 shows the CPL under testing.

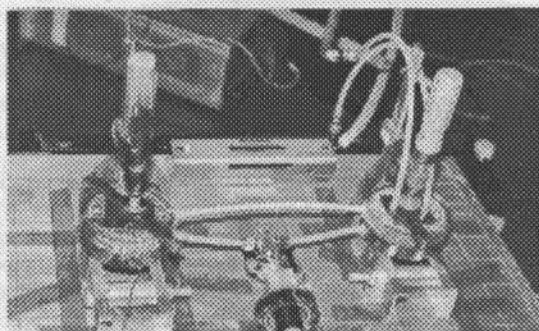


Fig. 3. The CPL under testing

The purpose of the first test was to study the phase distribution in the elements of CPL under different conditions. The following tests were performed.

Start-up. One of the main problems of CPL is to put it in proper mode of operation. This problem is more critical in the CPLs than in the heat pipes, due to unpredictable initial phase distribution inside the CPL. No established way of start-up exists at the present. Several investigation have been done in this subject. It is possible to supply the evaporator with the liquid initially stored in the reservoir (Butler, 1991); another way is to evaporate the liquid remained in the vapor line with special heater (Ku, 1996); or to use a special heat profiles at the beginning of operation, as used in some LHP (Meyer, 1993). Another option to have a successful start-up is to design the CPL in a way to guarantee a proper phase distribution, using the capillary forces. The last approach was adopted in the present development of CPL.

In this case, the proper phase distribution means to have liquid and vapor phase totally separated, liquid at bottom side and vapor at the upper side of CPL. It seems to be trivial but if some arrangements are not provided, liquid and vapor may appear mixed in any part of the CPL. Considering a qualitative analysis, to avoid vapor bubble at the bottom side of the wick, it is necessary that all spaces in this part of CPL were smaller than the space in the base plate groove. This condition provides a larger capillary force at the bottom side of the CPL than that at the interface liquid/vapor (at level of base plate grooves). So, all spaces at bottom side of evaporator and condenser were filled with mesh screen. Also a piece of mesh was inserted in the liquid tube.

The Figure 4 presents schematically the phase distribution before and after start-up. It shows the change in the level of liquid/vapor interface during the start-up. Initially, the evaporator was slightly overfilled by temporary elevation of the condenser. During the heat input, the excess of liquid, at the evaporator, was successfully evaporated, transported through the vapor line, and condensed at the base plate of the condenser.

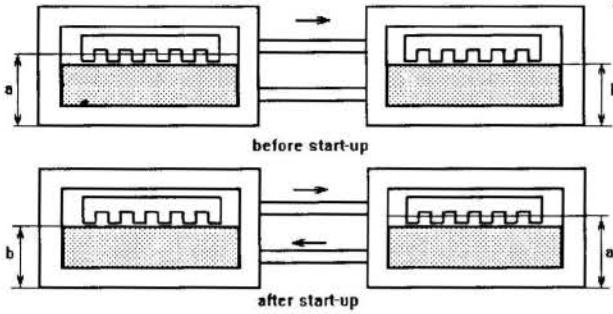


Fig. 4. Liquid levels in the CPL before and after start-up

The power on skin heater during start-up was constant, 22W. The evaporator base plate temperature was increased from initial value of 22°C up to 60°C during 15 minutes of transient. The fiber-glass layers in the evaporator wick prevents bubble penetration in bulk of mesh screen wick.

Wick thermal conductance. Influence of thermal conductance of wick in the evaporator was studied experimentally. For this test distilled water was used as a working fluid. Different design was used for both evaporator and condenser. Five layers of brass mesh screen were used as wick in the evaporator and the condenser. These layers were placed between two symmetric grooved base plates. No thermal insulation layer were put in the wick structure.

During the start-up, the heat dissipated at the upper side of the evaporator were conducted through the wick, heating the liquid at bottom side of the evaporator. It caused the vapor formation under the layers of mesh, that interrupted the liquid supply to the wick, causing start-up failure. The Figure 5. demonstrates stages of the start-up in the evaporator schematically.

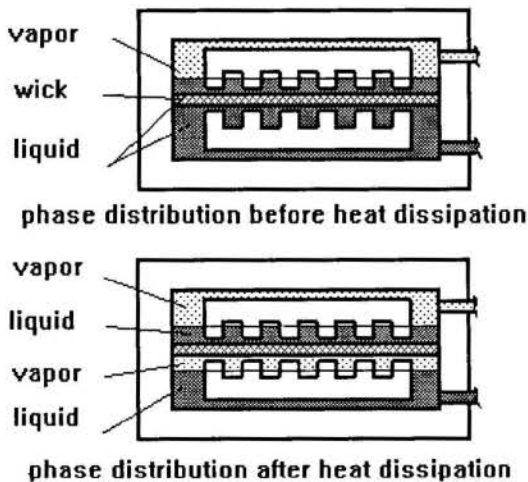


Fig. 5. Start-up failure due to formation of vapor under the wick of evaporator

Duration of the start-up was 20 minutes, with heat dissipation of 15 W.

This test was repeated for another configuration without wick in the condenser. The results were the same. The conclusion is that the wick structure in the condenser does not give any influence on the start-up failure. The main factors are the wick thermal conductance and rate of subcooling of liquid at the inlet of the evaporator.

Priming ability. Any design of internal configuration of the CPL has to meet the following requirements:

- proper phase distribution before start-up;
- conditions to prevent bubble formation in the liquid line;
- re-priming after dry-out.

The conditions for initial proper phase distribution, for this prototype, may be extracted from the balance of capillary forces between the base plate grooves and the liquid line. The involved parameters are shown in Figure 6.

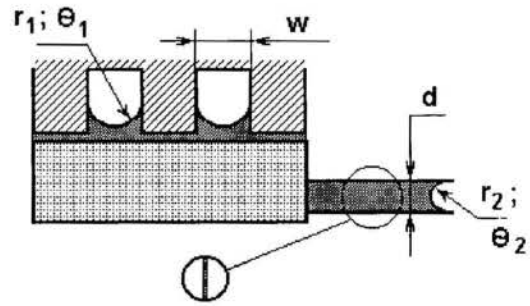


Fig. 6. Parameters involved in the determination of initial phase distribution before start-up

The capillary forces will avoid the formation of vapor bubble in the liquid line if the following expression was true:

$$\frac{2\sigma \cos\theta_1}{w} < \frac{4\sigma \cos\theta_2}{d} \quad (1)$$

where: σ is the surface tension of the liquid; θ_1 and θ_2 are the wetting angle at the groove and the liquid tube respectively; W and d are dimensions presented in Figure 6.

Although calculations were done, the experiments with filling showed that this expression was not totally complied for the prototype. The reason seems to be a very optimistic evaluation of wetting ability of plastic tubes. Actually the ratio $(\cos\theta_2/\cos\theta_1)$ is far less from 1. Inserting the piece of brass mesh in the tube has improved the design, but anyway, sometime bubbles still were observed in the liquid tube.

During the CPL operation, the prevention of bubble formation in the liquid line is also very important. The prevention is done using the subcooling of the liquid after condensation. The subcooling acts against the disjoint pressure, that may break the liquid continuity. The disjoint pressure is higher in wicked condenser than in ordinary tube-type condenser and depends on the amount of charge. Figure 7 illustrates these conditions.

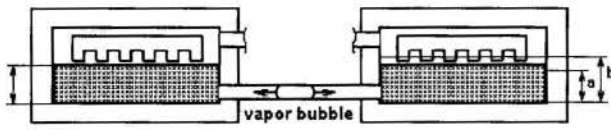


Fig. 7. Liquid levels in the condenser (a,b) for under and overfilling conditions

Slight overfilling is more preferable than insufficient filling. This rule is the same for the ordinary heat pipes. In the case of overfilling (level *b* in Figure 7, where the interface liquid/vapor is in groove), the disjoint pressure and the necessary subcooling can be expressed as following:

$$\Delta P = \frac{2\sigma \cos\theta}{w} \quad (2)$$

$$\Delta T_1 > \frac{T}{\rho_v \lambda} \Delta P \quad (3)$$

where: ΔP is the disjoint pressure; σ is the surface tension of the liquid; θ is the wetting angle of the liquid and groove surface; ΔT_1 is the necessary subcooling for overfilling condition; T is the temperature of the liquid near the groove; ρ_v is the density of the vapor; λ is the latent heat of the fluid.

For insufficient filling (level *a* in Figure 7, where the interface liquid/vapor is in wick), the necessary subcooling ΔT_2 is higher, and it is given by the following expression:

$$\Delta T_2 > \frac{2T\sigma \cos\theta}{\lambda \rho_v r_p} \quad (4)$$

where r_p is an effective radius of pore in the condenser wick. Other variables are the same of those presented in the Equations (2) and (3)

From these relationships the following conclusions for design may be extracted:

- it is better to use a coarse mesh in the condenser;
- it is necessary to provide conditions in the condenser for subcooling of liquid.

The present design of CPL allows to observe the bubble formation at any point of liquid line, but does not provide necessary conditions for subcooling. To provide it, the cooled base plate has to be placed at the bottom side of the condenser, connected with liquid line. For this type of lay-out a low conductivity wick is more preferable than high conductivity wick. The same requirement is applicable for evaporator wick.

Re-priming conditions. Overheating causes the dry-out of the evaporator. It is possible to classify this phenomenon according to the rate of overheating, that determines the time for re-priming. Small overheating causes partially drying of the wick structure of the evaporator. The operation is possible with partially dried wick, even if it is permanent. In CPL, vapor phase does not interrupt the liquid flow, on contrary of dry-out in heat pipes. Performance of CPL with partially dried wick is declined due to additional hydraulic resistance of vapor flow in the wick bulk.

Complete dry-out occurs when the vapor penetrates the evaporator wick and enters in the liquid line. The conditions for repriming after this type of dry-out are the same of the priming ability, described above. Restore time depends on the time constant of evaporator structure: base plate - wick - container. This is the time necessary to return the temperature to the nominal saturation level, after switch off the heat dissipation.

The most severe type of dry-out is characterized by appearance of liquid phase in vapor tube from the side of condenser. For this case, the repriming conditions are provided by the capillary asymmetry between vapor and liquid tube-lines. In the present design, this asymmetry is ensured by inserting a wick piece into the liquid tube. The rate of the asymmetry R_{cap} can be estimated by the following expression:

$$R_{cap} = \frac{r_v \cos\theta_l}{r_l \cos\theta_v} \quad (5)$$

where r_v and r_l are the equivalent capillary radius of the vapor and liquid tubes, respectively, and θ_v and θ_l are the wetting angle in the vapor and liquid tubes respectively. The predicted rate of the asymmetry for the present design is $R_{cap} \approx 4-5$.

Normal operation mode. The CPL was tested for the conditions of constant heat input $Q=18W$ and the temperature of cooled water $T_w=60^\circ C$. The system showed the following integral characteristics: a) density of heat flux $q=0.7 W/cm^2$ with the maximum $q=1.3 W/cm^2$; b) the measured temperature difference between evaporator base plate and the temperature of cooling system water was $13^\circ C$; c) the specific heat transport factor was $0.37 Wm^2/C$; d) the overall heat transfer coefficient was $h_t=680 W/Cm^2$ (it was not possible to measured film coefficients for the evaporator and condenser separately, due to few points of temperature measurement).

The adverse and favorable inclinations were examined. The difference of level of $\pm 10mm$, between evaporator and condenser, did not give any visible effects. Also the time transport delay was estimated at the conditions of average temperature in the CPL of $60^\circ C$ and input power of $10W$. The following values were calculated: for vapor phase - 2 s, for liquid phase - 88 min. So big difference allows to classify the transient processes in the CPL in two category: rapid processes and infra-slow ones. This phenomenon has to be reflected in the mathematical model of the CPL.

Figure 8 shows the magnitude of the pressure losses, calculated on the base of value of mass flow rate, extracted from experimental data for the case of heat power of $18W$. Kinetic coefficient of evaporation, to calculate the pressure drop of phase transition dP_{ph} , has been accepted as for the ideal case, $f=1$. The chart of Figure 8 presents the pressure losses in the vapor (dP_{vap}) and liquid (dP_{liq}) line, in the wicks (dp wicks), and the pressure drop of the phase transition (dP_{vap}).

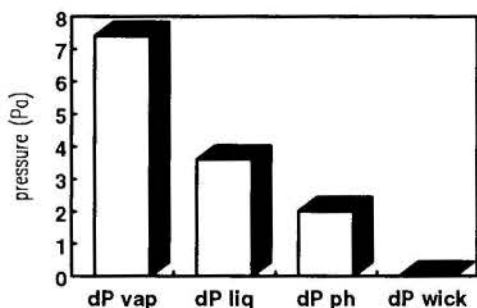


Fig. 8. Evaluation of pressure losses in the elements of the CPL.

This chart shows that the hydraulic resistance of the wick is negligible compared with the total resistance of the loop. Thus, this coarse mesh of number 100 can be applied to any condenser. Also it is recommendable to use a fine pore wick structure at the evaporator, to give a high pressure head to pump working fluid, since it does not give sensible contribution to hydraulic losses.

CONCLUSION

This experimental examination of the conceptual model of CPL confirms possibility to develop a high performance heat transport system with wicked condenser. Fixing a vapor/liquid interface with the porous structure in the condenser gives several advantages, compared to the traditional tube type condenser design. It avoids any dynamic instability related to movement of vapor/liquid interface. Also it is not so sensitive to non-condensable gas generation problem, and presents a good conditions for testing under 1-g environment. Finally, this design gives the possibility to use non-condensable gas technique for passive self-control.

On the other hand, more restricted conditions to prevent vapor bubble formation has to be provided. It could be accomplished by the scheme of CPL presented in the Figure 9.

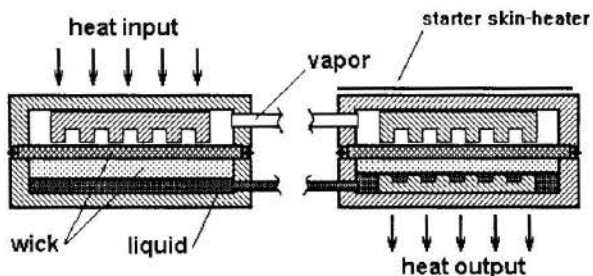


Fig. 9. Design of the CPL with conditions for subcooling.

This lay-out is very attractive to use in satellites due to the design flexibility. Flat evaporator and flat condenser with combination of flexible tube lines are capable to be adjusted to a wide range of lay-out of equipment and space radiators. To simplify the start-up, a starter skin heater can be applied on the top side of the condenser, as shown on the picture. Further researches have to be done to estimate the necessity of application of this type of starter, as well as, the use of a liquid reservoir or a compensation cavity.

REFERENCES

Bazzo, E., Colle, S., 1995, "Bombas capilares aplicadas a circuitos de transferência de calor de dupla-fase". *XIII Congresso Brasileiro e II Congresso Ibero Americano de Engenharia Mecânica*, Belo Horizonte, Brazil, December 12-15.

Dickey, J.T., and Peterson, G.P., 1993, "An Experimental and Analytical Investigation of the Operational Characteristics of a Capillary Pumped Loop", AIAA Paper 93-2746.

Furukawa, M. et al., 1987, "Development of Capillary Pump Loop for Space Application". *Proceedings, 6th International Heat Pipe Conference*. Grenoble, France, May 25-29.

Maidanik, Y.F., et al., 1992, "Thermoregulation of loops with capillary pumping for space use". *Proceedings, 22nd International Conference on Environmental Systems*, Seattle, Washington, July 13-16.

Maidanik, Y.F., Fershtater, Y.G., Goncharov, K.A., 1991, "Capillary Pump Loop for the Systems of Thermal Regulation of Spacecraft". *Proceedings, 4th European Symposium on Space Environmental and Control System*, Florence, Italy, October 21-24.

Peterson, G.P., 1983, "Two phase thermal control systems for spacecraft instrumentation", *AIAA 18th Thermophysics Conference*, Montreal, Canada, June 1-3.

Stenger, F.J., 1966, "Experimental Feasibility Study of Water-Filled Capillary Pumped Heat Transfer Loops", Technical Report NASA X-1310.

Wirsch, P.J. and Thomas S.K., 1996, "Performance Characteristics of a Stainless Steel/Ammonia Loop Heat Pipe", *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 10, pp. 326-333.

Wulz, H.G., Mayinger, F., 1992, "Heat and fluid transport in an evaporative capillary pump", *International Journal of Energy Research*, Vol.16, pp. 879-896.

Ku, J. "Performance tests of CAPL2 starter pump cold plates", *31st AIAA Thermophysics Conference*, New Orleans, LA, June 17-20, 1996.

Meyer, R.; et al. "Investigation of the heat transfer performance of a capillary pumped ammonia loop under gravity", *23rd International Conference on Environmental System*, Colorado Springs, Colorado, July 12-15, 1993.

Butler, D. And Hoang, T. "The enhanced capillary pumped loop flight experiment: a prototype of the EOS platform thermal control system" *26th AIAA Thermophysics Conference*, Honolulu, Hawaii, June 24-26, 1991.



COMPORTAMENTO TÉRMICO DE BOMBAS CAPILARES DE RANHURAS CIRCUNFERENCIAIS

Edson Bazzo, Júlio César Passos e Sergio Colle
Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Santa Catarina
88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil



RESUMO

O comportamento térmico de bombas capilares aplicadas a circuitos de transferência de calor de dupla-fase é aqui analisado. De acordo com resultados experimentais, há boa concordância dos valores medidos com os valores de potência máxima estimada com base no limite capilar. Uma análise complementar baseada na teoria de ebulição nucleada é especialmente conduzida, confrontando-se resultados experimentais com resultados teóricos obtidos de correlações empíricas disponíveis na bibliografia especializada.

INTRODUÇÃO

Os circuitos de bombas capilares foram originariamente projetados para atender aplicações espaciais e têm por objetivo principal gerenciar termicamente painéis de componentes eletrônicos, transportando calor por longas distâncias para ambientes sob temperaturas mais baixas. São sistemas bifásicos de transporte de calor, constituídos por evaporadores, condensadores, um reservatório para controle da temperatura de operação e por tubulações para transporte do líquido e do vapor. Um único evaporador pode ser constituído por uma ou mais bombas capilares, as quais são responsáveis pela circulação do fluido de trabalho. Em geral amônia ou Freon 11 tem sido usado como fluido de trabalho. Ao contrário de circuitos convencionais, não há a necessidade de bombas mecânicas. O fluido é movimentado unicamente por ação capilar.

A maioria dos evaporadores testados até a presente data tem usado bombas capilares constituídas por material poroso de polietileno e tubos de alumínio extrudados com ranhuras axiais de secção trapezoidal na sua superfície interna (Ku, 1993). No presente trabalho, ênfase especial é dada a bombas capilares de ranhuras circunferenciais, bombas essas testadas com sucesso no laboratório do IKE-Universidade de Stuttgart da Alemanha e com resultados parciais já publicados por Bazzo et al (1994a).

Para ambos os casos, inúmeros testes têm sido conduzidos a nível de laboratório, comprovando o bom desempenho das bombas capilares e demonstrando a habilidade do circuito para operar sob diferentes cargas térmicas. Alguns problemas de ordem técnica, no entanto, ainda precisam ser resolvidos de modo a poder realmente qualificar bombas capilares para uso espacial. Por exemplo, comportamento térmico do circuito em início de operação, a presença de gases não condensáveis, capacidade de reativação de bombas capilares em situação de colapso ou, até mesmo, a confiabilidade do sistema de operar em condições normais por tempo indeterminado são todos itens que precisam ser investigados.

Um circuito de bomba capilar não pode desempenhar suas funções previamente especificadas em projeto até que a operação seja efetivamente iniciada com sucesso. De fato, especificamente para o caso de estruturas porosas, em diversas situações tem ocorrido problemas com o deslocamento inicial de líquido de volta ao reservatório, na maioria dos casos conduzindo o sistema ao colapso. Análises detalhadas relacionadas a este problema têm

sido relatadas por Cullimore (1991) e por Antoniuk and Pohner (1993), com apresentação de alguns resultados experimentais, demonstrando a viabilidade técnica de dispositivos complementares, devidamente projetados, destinados à remoção de líquido da linha de vapor, antes de dar a partida ao sistema. Com relativo sucesso, bombas capilares de partida vêm sendo instaladas no circuito de modo a auxiliar o trabalho de movimentação do líquido existente na linha de vapor antes que calor seja efetivamente aplicado nos evaporadores (Ku et al, 1989). De qualquer modo, persistem dúvidas ainda com relação a tais dispositivos, para controle da quantidade de líquido no interior do circuito e pesquisas prosseguem até que, de fato, se tenha um sistema confiável e que circuitos de bombas capilares possam ser operados com absoluto sucesso.

A opção por bombas capilares de ranhuras circunferenciais abre novo caminho, no sentido de contornar problemas detectados e ainda não resolvidos em bombas capilares constituídas por estruturas porosas planas ou tubulares. No presente trabalho, tomando-se por base resultados experimentais obtidos em laboratório, ênfase especial será dada ao comportamento térmico das bombas capilares, buscando-se uma melhor interpretação para os mecanismos de transferência de calor que ocorrem durante a partida e em condições de regime permanente no circuito de bomba capilar.

Para que se tenha completo domínio sobre o comportamento térmico do circuito é conveniente que se considere todas as possibilidades de colapso da bomba capilar. A exemplo de tubos de calor, é interessante que se investigue a possibilidade de colapso não apenas pelo limite capilar, mas também pelo lado do limite sônico, limite por arraste e limite por ebulição. O valor de potência máxima pode de fato representar a ocorrência do limite capilar. Por esse lado, resultados já foram apresentados por Bazzo et al (1995), utilizando modelo matemático especialmente desenvolvido para bombas capilares de ranhuras circunferenciais. Os resultados encontrados apontam para valores de potência máxima calculados na mesma ordem de grandeza dos valores medidos em laboratório. Por outro lado, cálculos preliminares apontam para valores significativamente altos nos casos de limite sônico e limite por arraste no interior da bomba capilar (Dunn and Reay, 1994). Isto é, nesse caso em particular, utilizando amônia ou Freon 11 como fluido de trabalho, não haverá problemas relacionados com a velocidade sônica do vapor ou com o arrancamento de gotas de líquido do interior da ranhura circunferencial. Entretanto, o mesmo não se pode afirmar para o

caso de limite por ebulição. No presente trabalho, com o objetivo de estudar este assunto, resultados experimentais são confrontados com resultados teóricos obtidos com modelos e correlações empíricas válidas para o regime de ebulição nucleada disponíveis na literatura especializada. Sendo o controle térmico de satélites a principal motivação para o emprego de circuitos de bombas capilares, é importante lembrar que em condições de microgravidade as bolhas de vapor se apresentam com dimensões bem superiores àquelas encontradas em condições de gravidade normal (Straub et al, 1990), resultando em um maior confinamento do processo de ebulição e aumentando os riscos de bloqueio da circulação do líquido na ranhura circunferencial. Resultados experimentais sob gravidade normal, apresentados por Fujita et al (1988) para ebulição nucleada em espaços confinados, indicam que os valores de densidade de fluxo crítico diminuem quando o confinamento aumenta. Em condições de microgravidade, é válido esperar-se que haverá a mesma tendência, implicando numa faixa mais estreita para o sistema operar com ebulição nucleada, antes de chegar ao limite de ebulição. O funcionamento da bomba capilar depende do escoamento do líquido pela ranhura. Portanto, espera-se que ocorra vaporização sem a formação de bolhas, exigindo que a mudança de fase líquido-vapor realmente ocorra na superfície do menisco, envolvendo condução de calor através do líquido na direção radial. Tal mecanismo é chamado por Chi (1976) de *evaporação condutiva*.

CARACTERIZAÇÃO DA BOMBA CAPILAR

Os trabalhos experimentais foram conduzidos no circuito de bomba capilar instalado no laboratório do IKE-Institut für Kernenergetik und Energiesysteme da Universidade de Stuttgart, com apoio do CNPq (Brasil) e do KFA-Forschungszentrum Jülich da Alemanha. Bombas capilares de ranhuras circunferenciais de fabricação da empresa ERNO-Raumfahrttechnik foram utilizadas no evaporador. Freon 11 foi adotado como fluido de trabalho.

Caracterização. A estrutura interna da bomba capilar é mostrada na Figura 1. Ranhuras internas são usinadas na parede interna de um tubo de alumínio (ϕ 19 mm), com espaçamento de 215 μ m. Um perfil em T invertido é inserido no interior do tubo, separando um canal para a alimentação do líquido e outros dois para a saída do vapor. Desta forma, líquido se desloca por ação capilar ao longo das ranhuras onde ocorre a formação de vapor. O comprimento ativo da bomba capilar é de 500 mm.

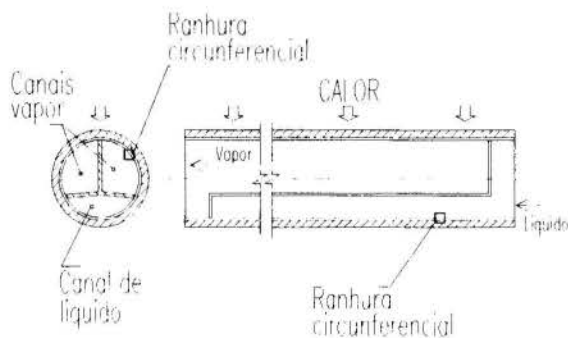


Figura 1 - Configuração interna da bomba capilar, mostrada em corte transversal e em corte longitudinal.

Na Figura 2 são indicadas as posições das resistências

elétricas e respectivos blocos de alumínio utilizados em laboratório para promover o aquecimento da bomba capilar. De acordo com a Figura 2, T_7 e T_8 correspondem aos termopares instalados na interface entre bomba capilar e blocos de alumínio, T_{16} e T_{17} correspondem aos termopares instalados na entrada e na saída da bomba capilar, respectivamente, T_{15} corresponde ao termopar instalado na parte inferior do canal de líquido. T_{1q} representa a temperatura do líquido na entrada do evaporador e T_v representa a temperatura de vapor saturado medida na linha de vapor.

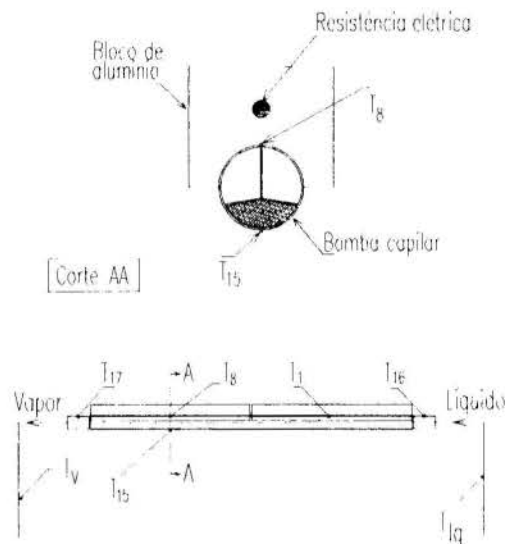


Figura 2 - Modo de aquecimento e localização dos termopares ao longo da bomba capilar.

Para caracterização da bomba capilar, uma série de amostras foi preparada em laboratório e levada para análise micrográfica das ranhuras circunferenciais no microscópio eletrônico de varredura, modelo Philips XL30, do Laboratório de Materiais da UFSC. De acordo com a análise micrográfica, foram calculados valores correspondentes a:

$$\begin{aligned}
 b &= 33 \pm 7 \mu\text{m} \\
 t &= 310 \pm 59 \mu\text{m} \\
 \beta &= 0,6 \pm 0,4^\circ \\
 r_c &= 27,1 \pm 8,3 \mu\text{m} \\
 r_i &= 7,925 \times 10^3 \pm 16 \mu\text{m}
 \end{aligned}$$

onde b representa a largura entre paredes no topo da ranhura, t representa a profundidade, β representa a metade do ângulo de abertura, r_c representa o raio efetivo de capilaridade da ranhura e r_i representa o raio interno do tubo. Uma amostra correspondente à análise micrográfica da parede interna da bomba capilar é apresentada na Figura 3, mostrando claramente o enchimento de líquido nas ranhuras circunferenciais. A capacidade de bombeamento da bomba capilar depende da geometria dessas ranhuras, determinada através da equação

$$p_{cm} = \frac{2 \cdot \sigma}{r_c} \quad (1)$$

onde p_{cm} representa a pressão máxima de bombeamento capilar e σ representa a tensão superficial do fluido térmico. Para Freon 11 obtém-se $p_{cm} = 1328 \pm 405$ Pa.

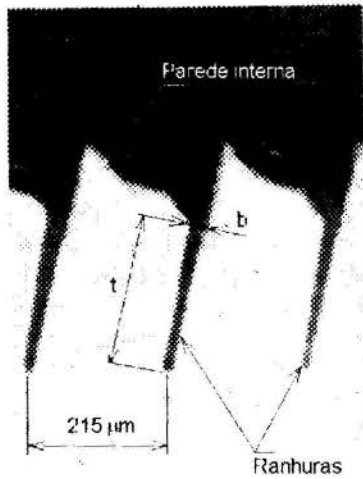


Figura 3 - Microfotografia da parede interna da bomba capilar.

Procedimento experimental. O procedimento experimental adotado para partida das bombas capilares tem sido inundar o circuito com líquido, elevando-se a temperatura do reservatório antes de ativar as resistências elétricas no evaporador. De fato, em termos práticos é importante eliminar qualquer possibilidade de existência de vapor na entrada das bombas capilares. Essa condição é alcançada aquecendo-se o líquido dentro do reservatório até que se estabeleça a temperatura de saturação prevista para operação do circuito. A pressão no interior do reservatório sobe, forçando o deslocamento de líquido para o interior do circuito. Em operação normal, para que se mantenha a temperatura de operação pré-estabelecida, a quantidade de líquido no interior do circuito será regulada pelo reservatório, de acordo com a potência aplicada no evaporador e de acordo com a temperatura ambiente estabelecida no condensador. Nos testes de laboratório, um criostato foi utilizado de modo a manter constante a temperatura do reservatório. Por esse caminho, diversos testes foram conduzidos para temperatura de operação da ordem de 27 °C (300 K).

COMPORTAMENTO TÉRMICO

O comportamento térmico típico de bombas capilares é aqui analisado, tomando-se por base os resultados experimentais obtidos em laboratório. São analisadas as etapas relacionadas com a partida e com o limite de operação da bomba capilar. Em particular, utilizando correlações empíricas disponíveis na bibliografia especializada, são também analisadas as condições para que ocorra nucleação e limite de ebulição no interior da ranhura capilar.

Comportamento Térmico na Partida da Bomba Capilar. Na Figura 4 são apresentadas as curvas correspondentes ao início de operação do circuito de bomba capilar. Inicialmente o circuito é mantido em repouso por 33 minutos para que se tenha realmente atingida a condição de equilíbrio pré-estabelecida de temperatura e pressão no reservatório. Em seguida, calor correspondente a 200 W é aplicado na bomba capilar. Nos 10 minutos subsequentes ocorre acentuada alteração em todas as temperaturas medidas, praticamente caracterizando neste curto intervalo de tempo todo

o comportamento térmico da bomba capilar em início de operação. Maior alteração ocorre com a temperatura T_1 , para valores da ordem de 47 °C, o que corresponde a 15 °C acima do pico observado em T_v . Picos maiores ou menores de temperatura estão relacionadas ao esforço inicial de deslocar o excesso de líquido de volta ao reservatório. Picos menores são esperados em caso de pequenas quantidades de líquido presente nos canais de vapor da bomba capilar. Naturalmente a pressão interna não permanece constante. Analisando a Figura 4, pode-se observar que a pressão interna do circuito sofre um aumento significativo no momento em que a temperatura de parede, T_1 , atinge seu valor máximo. Para que se estabeleça a condição de equilíbrio, é necessário que a pressão aumente até o limite suficiente para deslocar o líquido presente nos canais de vapor de volta ao reservatório. A pressão absoluta foi medida com o auxílio de um sensor instalado na linha de líquido. Em condições de regime permanente, cálculos demonstram que valores de temperatura correspondentes à pressão de saturação praticamente coincidem com os valores medidos de T_v . Há uma pequena defasagem entre os dois picos mostrados na Figura 4, que corresponde ao tempo requerido para que vapor se desloque do interior da bomba capilar até à saída do evaporador e tempo requerido para que a informação seja transferida do vapor para o termopar instalado na parede externa do tubo. A queda de temperatura de parede indica que líquido frio volta a ocupar o espaço deixado pelo vapor, comprovando o efeito de bombeamento capilar das ranhuras circunferenciais. Agora, já em processo contínuo de vaporização, o circuito tende à condição de regime permanente. Na medida em que mais vapor vai se formando no interior da bomba capilar, mais calor vai sendo removido do condensador, alterando o inventário de líquido no interior do circuito, até que se confirme a condição de regime permanente. O circuito atinge a condição de regime permanente no momento em que todas as temperaturas se mantêm estáveis.

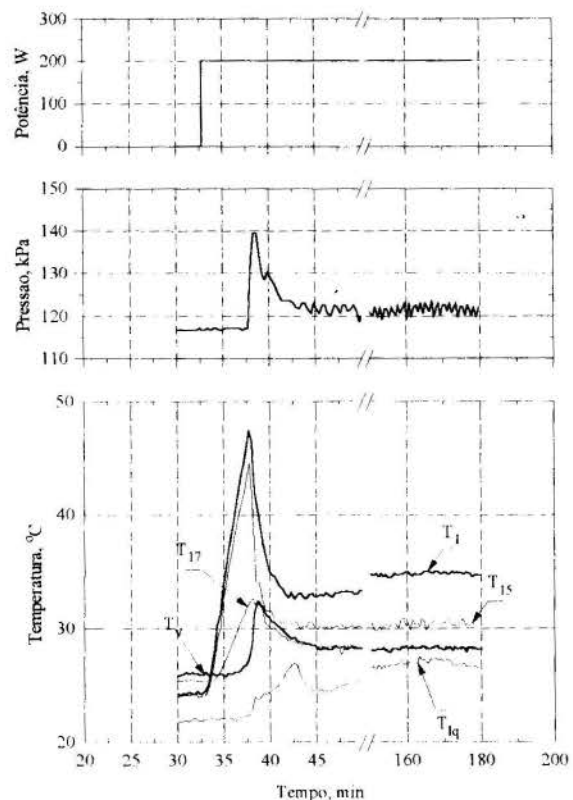


Figura 4 - Variação da pressão absoluta e temperaturas medidas em início de operação, para potência de 200 W.

Pode-se observar um sensível aumento da temperatura T_{15} no início de operação. Embora indesejado, esse aumento é inevitável, pois o tubo é feito de material altamente condutor, favorecendo a fuga de calor para o canal de líquido. Mesmo em condições de regime permanente, T_{15} tende a se manter sempre acima da temperatura de saturação do vapor, indicando permanente troca de calor também no canal de líquido. Consequentemente pode ocorrer evaporação já no canal de alimentação, podendo contribuir para que ocorra colapso, antes mesmo de atingida a condição limite da bomba capilar. De qualquer modo isso não tem ocorrido sob condições favoráveis de baixa perda de carga na linha de líquido, entre condensador e evaporador. O circuito tem demonstrado sua capacidade de operar até seu limite máximo de transporte de calor, apesar de o líquido na entrada do evaporador apresentar mesma temperatura do vapor. Para Freon 11, a potência máxima foi medida em torno de 280 W.

No momento em que líquido retorna ao reservatório, caem as temperaturas medidas no interior da bomba capilar e cresce a temperatura medida na entrada do evaporador, T_{1q} . O crescimento observado de T_{1q} parece confirmar a formação de vapor no interior do canal de líquido já em início de operação. Consequentemente, a presença desse vapor força o deslocamento de líquido quente no sentido inverso de volta ao reservatório. Entretanto, tal efeito é rapidamente compensado com a chegada de líquido frio do condensador, garantindo a alimentação requerida para que o sistema adquira a condição de regime permanente.

Condições para a Nucleação. Durante a partida, até que a vaporização do líquido seja iniciada, o mecanismo de transferência de calor é de convecção natural. De acordo com valores de temperaturas mostrados na Figura 4, o superaquecimento observado na parede do tubo no intervalo de tempo entre 35 e 38 min. representado pela diferença entre T_1 e T_v , é de aproximadamente 10 °C. Pela teoria de nucleação heterogênea (Carey, 1992), o valor mínimo de superaquecimento local de parede para que uma cavidade de raio r^* seja ativada, isto é, para que o raio do embrião do vapor se iguale ao raio da cavidade, é obtido através da equação

$$\Delta T_p = T_{1q} - T_{sat} = 2\sigma \frac{T_{sat}}{\rho_v h_{lv} r^*} \quad (2)$$

onde $\rho_v \ll \rho_{lq}$, sendo ρ_v a massa específica do vapor e ρ_{lq} a massa específica do líquido. Para Freon 11 na temperatura de saturação $T_{sat} = 300$ K, tensão superficial $\sigma = 0,018$ N/m, massa específica do vapor $\rho_v = 6,9$ kg/m³ e calor latente de vaporização $h_{lv} = 181,8$ kJ/kg, obtêm-se diâmetros de embriões de vapor que variam entre 1,7 e 17,2 μ m para ΔT_p variando entre os valores de 10 e 1 °C, respectivamente. Tais valores estão abaixo dos parâmetros característicos da bomba capilar, indicando a possibilidade de se ter cavidades ativadas tanto no interior das ranhuras como no espaço entre as mesmas. Em condições de operação normal, os resultados da Figura 4 indicam um superaquecimento entre 5 e 7 °C, o que permite a ativação das cavidades. O fato de as cavidades serem ativadas não deve significar que bolhas de vapor sejam efetivamente lançadas da parede. De acordo com Carey (1992), o diâmetro de partida pode ser calculado através da equação de Fritz, abaixo.

$$d = 0,0208 \theta \left[\frac{\sigma}{g (\rho_{lq} - \rho_v)} \right]^{1/2} \quad (3)$$

onde θ representa o ângulo de contato. Para $\theta = 90^\circ$ e $\rho_{lq} = 1472$ kg/m³ obtém-se $d = 2,1$ mm, valor este superior em pelo menos uma ordem de grandeza aos valores geométricos característicos da estrutura capilar.

Limite de Operação da Bomba Capilar. As curvas mostradas na Figura 5 permitem observar o comportamento térmico da bomba capilar para potências ajustadas de 200, 260 e 300 W. Observa-se que para potência aplicada de 300 W, T_8 e T_{15} sobem abruptamente, indicando a ocorrência de secagem da parede ou de colapso da bomba capilar. Para o conjunto de testes realizados, a condição de regime permanente não foi garantida para potências maiores do que 280 W, permitindo que se assumia este valor como potência limite para este tipo de bomba capilar. Na Figura 5, T_{22} representa a temperatura no interior do reservatório, temperatura esta previamente fixada no início dos trabalhos. A temperatura T_v manteve-se praticamente constante ao longo dos testes, comprovando bom desempenho do reservatório ao gerenciar a quantidade de líquido no interior do circuito de bomba capilar.

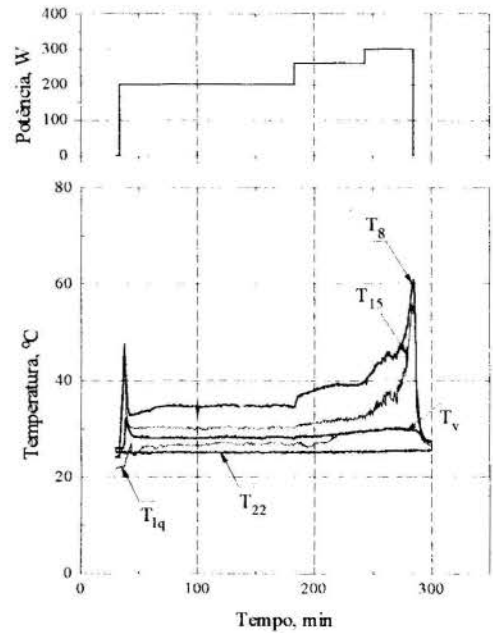


Figura 5 - Comportamento térmico da bomba capilar, para diferentes níveis de potências aplicadas.

Densidade de Fluxo Crítico. Não existe uma equação apropriada para cálculo do valor crítico da densidade de fluxo de calor no interior de uma ranhura circunferencial. Entretanto, iniciando estudos nesse sentido, admitiu-se como primeira aproximação a correlação de Monde et al (1982), determinada a partir de resultados experimentais para ebulição em vaso de líquido saturado, no espaço confinado entre duas placas planas verticais e paralelas de comprimento l_h , com espaçamentos s variando entre 0,45 e 7,0 mm. Por esse caminho,

$$q_c = \frac{0,16 \rho_v h_{lv} \left[\frac{\sigma g (\rho_{lq} - \rho_v)}{\rho_v^2} \right]^{0,25}}{1 + 6,7 \cdot 10^{-4} \left(\frac{\rho_{lq}}{\rho_v} \right)^{0,6} \left(\frac{l_h}{s} \right)} \quad (4)$$

onde, por aproximação, q_c deve representar o valor crítico da densidade de fluxo de calor para uma ranhura circunferencial de

comprimento $l_h = 2\pi r_f / 3 = 16,6$ mm (ver Bazzo et al, 1994b) e espaçamento s variável em torno dos valores limites de b (26 e 40 μm). Tal aproximação se justifica pelo fato de b ser bem menor do que a profundidade t da ranhura, conforme ilustrado na Figura 3 do presente trabalho. Nessas condições, obtêm-se valores de densidade de fluxo de calor variáveis entre 26,3 e 38,6 kW/m^2 , ou valores equivalentes de potência variáveis entre 420 e 618 W. São valores relativamente altos, superiores à potência máxima medida nos testes. Entretanto tendo em vista incertezas experimentais na medição dos parâmetros geométricos da bomba capilar e incertezas inerentes à utilização da própria Eq. (4), conclui-se que o problema do limite de ebulição mereça ser analisado em detalhe, a fim de poder comparar valores calculados com valores medidos em laboratório.

CONCLUSÕES

Os resultados aqui analisados indicam que as bombas capilares de ranhuras circunferenciais permitiram que o circuito operasse com sucesso, tanto na partida, quanto em condições de regime permanente, suportando variações bruscas de potência no evaporador. Tais resultados permitem dizer que a opção por bombas capilares de ranhuras circunferenciais poderá vir a se constituir em novo caminho para contornar problemas detectados e ainda não resolvidos em bombas capilares constituídas por estruturas porosas tubulares.

A análise baseada na teoria de nucleação heterogênea mostrou que tanto na partida quanto em condições de regime permanente, poderá haver ativação de cavidades com diâmetros mínimos variáveis entre 1,7 e 17,2 μm . Entretanto, considerando as condições termodinâmicas dos testes realizados, dificilmente haveria formação de bolhas de vapor, uma vez que o diâmetro de partida das bolhas seria de 2,1 mm, valor este significativamente superior às dimensões características da estrutura capilar da bomba.

Valores relacionados com a densidade de fluxo crítico no interior das ranhuras circunferenciais foram estimados entre 26,3 e 38,6 kW/m^2 . Entretanto, tendo em vista incertezas de ordem experimental e com a própria correlação adotada, análise complementar se faz ainda necessária, a fim de se poder comparar resultados teóricos com experimentais e, se for o caso, considerá-los em projetos futuros envolvendo bombas capilares de ranhuras circunferenciais.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio recebido do IKE-Universidade de Stuttgart e do KFA-Forschungszentrum Jülich da Alemanha.

REFERÊNCIAS

- Antoniuk, D. and Pohner, J., 1994, "Deleterious Effects on Non-condensable Gas during Capillary Pumped Loop Startup", *Proceedings, 24th International Conference on Environmental Systems and 5th European Symposium on Space Environmental Control Systems*, Friedrichshafen, paper 941408.
- Bazzo, E., Groll, M., Brost, O. and Colle, S., 1994a, "Circumferentially Grooved Heat Pipes Applied to a Capillary Pumped Two-phase Loop", *Proceedings, 24th International Conference on Environmental Systems and 5th European Symposium on Space Environmental Control Systems*, Friedrichshafen, paper 941579.

Bazzo, E., Groll, M., Brost, O. and Colle, S., 1994b, "Hydrodynamic Analysis and Capillary Limitation of Circumferentially Grooved Heat Pipe Evaporators", *Proceedings of the 4th International Heat Pipe Symposium*, Tsukuba, pp. 77-84.

Bazzo, E. e Colle, S., 1995, "Bombas Capilares Aplicadas a Circuitos de Transferência de Calor de Dupla-fase", *COBEM-CIDIM/95*, Belo Horizonte.

Carey, V.P., 1992, "Liquid-Vapor Phase Change Phenomena", *Hemisphere Publishing Corp.*, Washington, DC.

Chi, S.W., 1976, "Heat Pipe Theory and Practice", *Hemisphere Publishing Corp.*, Washington, DC.

Cullimore, B.A., 1991, "Start up Transients in Capillary Pumped Loops", *Proceedings, AIAA 26th Thermophysics Conference*, Honolulu, paper 911374.

Dunn, P.D. and Reay, D.A., 1994, "Heat Pipes", *Pergamon Press*, 4th. Edition, Oxford.

Fujita, Y., Ohta, H., Uchida, S. and Nishikawa, K., 1988, "Nucleate Boiling Heat Transfer and Critical Heat Flux in Narrow Space between Rectangular Surfaces".

Ku, J., Krolczek, E.J. and McCabe, M.E., 1989, "An Improved High Power Hybrid Capillary Pumped Loop", *Proceedings, 19th Intersociety Conference on Environmental Systems*, San Diego, paper 891566.

Ku, J., 1993, "Overview of Capillary Pumped Loop Technology", *ASME 29th National Heat Transfer Conference*, Atlanta, HTD-Vol.236.

Monde, M., Kusuda, H. and Uehara, H., 1982, "Critical Heat Flux during Natural Convective Boiling in Vertical Rectangular Channels Submerged in Saturated Liquid", *ASME Journal of Heat Transfer-Transaction*, Vol. 104, pp. 300-303.

Straub, J., Zell M. and Vogel, B., 1990, "Pool Boiling in a Reduced Gravity Field", *Proceedings, 9th International Heat Transfer Conference*, Jerusalem, pp. 91-112.

ABSTRACT

The thermal behaviour of capillary pumps applied to a two-phase heat transfer loop has been studied. According to experimental results there is good agreement between measured values and those computed by using a theoretical model in the basis of capillary limitation theory. An analysis related to a nucleation theory and boiling limitation is also presented using empirical correlations available in the current literature.



EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF VARIABLE CONDUCTANCE HEAT PIPE WITH EXTERNAL HOT UNWICKED RESERVOIR

Valeri V. Vlassov,

Division of Space Mechanics and Control - DEM
National Institute for Space Research - INPE

Luiz Carlos C. Junior,

Division of Mechanical Engineering - ME
Institute of Technology of Aeronautics - ITA
12227-010 - São José dos Campos - SP - Brazil



SUMMARY

Test results for variable conductance gas-loaded heat pipe with external location of a hot reservoir are presented. The pipe was manufactured from copper, and filled with water and nitrogen. The following tests were carried out: favorable and adverse inclination tests; priming-depriming the artery position test in gravity field; start-up test; transient and steady state performance tests. Test results of the heat pipe were compared with the performance of a similar heat pipe of constant conductance. The total thermal conductivity of heat pipe was varied effectively in compensation of variations in input and output conditions.

INTRODUCTION

Heat pipes (HPs) are frequently used in space in thermal control systems of satellites. This device is acting as a thermal super-conductor to transfer heat from a source (usually electronic equipment) to a sink (space radiator) or to redistribute heat fluxes along some elements of satellite structure to decrease temperature gradients. In ordinary heat pipes an inherent evaporation-condensation cycle ensures a very small temperature difference between opposite sides of the tube. In fact, the thermal resistance does not depend of the temperature level of evaporator zone when the heat pipe operates in a proper temperature range.

Variable conductance heat pipes (VCHPs) have reservoir of non-condensable gas which is linked to the vapor channel of the tube. When the heat load goes down, diffusion vapor-gas interface is moving into the condenser region of the tube, the gas occupies more area of heat exchange and the part of the condenser becomes inactive. Total thermal resistance of the VCHP is changed to accommodate of vapor temperature variations. As a result, the temperature of evaporator zone of a VCHP is maintained in more narrow range with compare to an ordinary HP.

Limit of control depends of the volume and type of the reservoir. There are two types of reservoirs - cold type and hot type. They are distinguished by conditions of thermal coupling with the tube. Cold type reservoir is exposed under sink conditions and the hot type - under source ones. Marcus (1972) showed, that cold type reservoir has a good transient characteristic, but quality of control is very sensitive to variations in sink temperature. Therefore, for space application it may be not very suitable, because of the condenser section of the VCHP is usually coupled with a radiator, which is exposed under extremely varied external fluxes from the Sun and the Earth.

Theoretically, the hot type reservoir provides more close control than the cold one (Marcus, 1972). At the same time it can lead to some infra-slow transient phenomena due to diffusion effects in the long length feed back tube. On the other hand, the sink conditions do not decline the performance of control, that is very important for satellite thermal control. Chi in (1976) reported about design of a VCHP with a hot reservoir inserted

into the heat pipe. An increased diameter of the pipe is needed due to the volume of reservoir is restricted by the size of the tube.

Variable conductance heat pipes of various design have been studied widely. Colle and Fagotti in 1990 developed two-dimensional diffusion front model for VCHP without reservoir. Rocha and Machado confirmed, that sharp-front model for the interface has a good agreement with experimental data, obtained for a copper-water heat pipe, loaded with air.

A variable conductance heat pipe with external location of a hot type reservoir is studied experimentally in this paper. This design does not provide restrictions on reservoir size as it is in the case of internal reservoir and therefore, promises a higher control capacity.

DESIGN OF VARIABLE CONDUCTANCE HEAT PIPE

The heat pipe consists of wicked tube, gas reservoir, feed back tube, connecting the reservoir and condenser side of the VCHP. The pipe has a special saddle to provide an interface between heat input and the wall of evaporator section. This saddle guarantees also a good thermal contact between the evaporator of heat pipe and the external unwicked reservoir. The sketch of the VCHP is presented in Fig. 1.

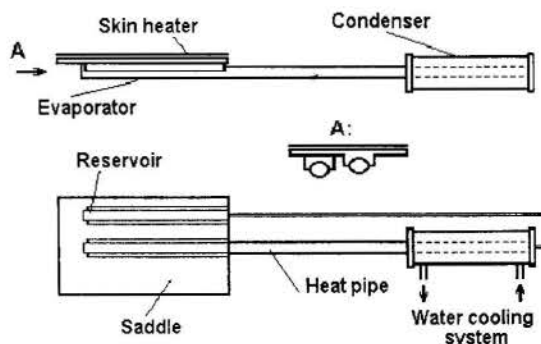


Fig. 1. The design of the VCHP with hot external reservoir.

An electrical skin heater simulates the heat input from onboard equipment. A water cooling system is used in tests to satisfy the heat output conditions. The pipe is made from copper and filled with water and nitrogen. Wick is two-layers brass mesh of number 100, just rolled up and inserted into the tube. The wick has an artery of ellipse cross section, made as a part of the last layer of the mesh. The next figure shows a photo of the VCHP.

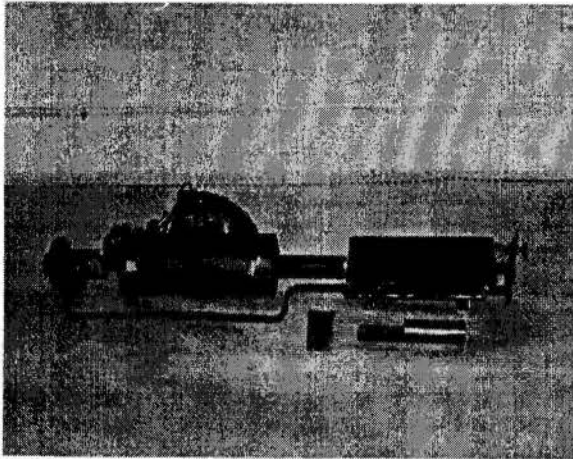


Fig. 2. View of the developed VCHP

On the photo the evaporator with the saddle and reservoir are on the right side of the tube and the condenser with a jacket for circulation of cooling water are on the left side of the tube. A valve is fitted in the feedback gas tube to simplify the filling procedure.

TEST SET-UP

Test frame consists of three parts: vacuum system, measurement system and functional one. Vacuum system serves for preparation of filling process (vacuuming, preliminary filling, flush out), for charging with working liquid and non-condensable gas. Measurement system consists of thermocouple lines, data acquisition system and micro computer. The power supply and water cooling system are used to put the VCHP in operation. Mechanical inclination device with level-meter ensures defined inclinations in two orthogonal planes.

The Figure 3 presents a scheme of this frame. Thermocouples are distributed along length of the pipe, from the lateral side of the wall with respect to artery. The depth of thermocouple installation is 1 mm. Also three thermocouples are placed on the saddle.

The thermocouples are of AT-type. Predicted summary error of thermocouples together with the data acquisition system of ECTRON type was $\pm 1.5^\circ\text{C}$. Precision of inclination device is $\pm 1.45 \cdot 10^{-4}$ rad. Level meter of horizon line adds error of $\pm 2.0 \cdot 10^{-5}$. Temperature of cooling water is varied with range of $\pm 0.5^\circ\text{C}$. Power supply equipment adds 1% to the sum error also.

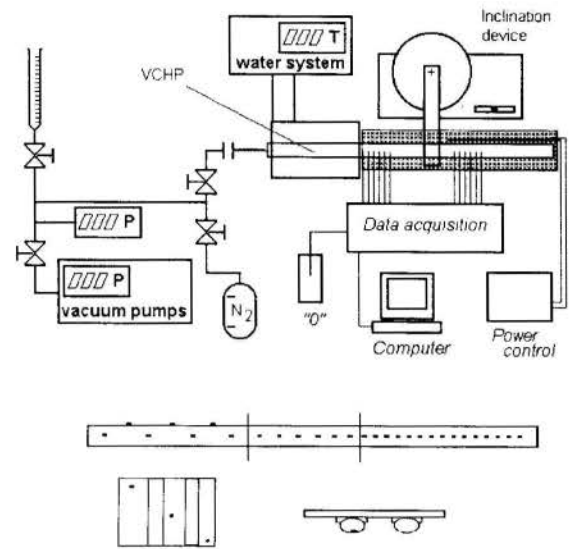


Fig. 3. Layout of the test frame and disposition of thermocouples.

Finally, overall analysis of errors gives the total uncertainty of $\pm 2.35^\circ\text{C}$.

PERFORMANCE TESTS OF INCLINATION

Test of adverse inclination (i.e. elevation of HP evaporator) gives general performance for any heat pipe of constant conductance. Tests of favorable inclination (i.e. elevation of condenser) is used to obtain performance of gravity assistance devices (for example, thermosiphones). For the present VCHP, inclination tests were provided for the two cases. Typical profiles of temperature, measured for steady-state mode along length of heat pipe, are presented on Fig. 4.

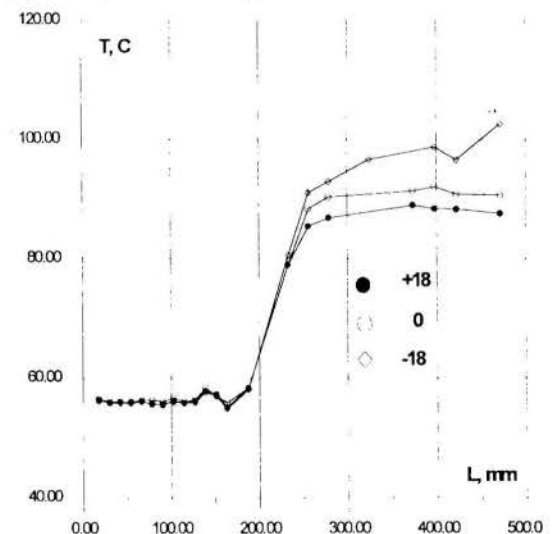


Fig. 4. Temperature profiles along the VCHP with different inclinations. Heat power is 80W. Favorable (+) and adverse (-) inclination of 18° (0.314 rad).

For estimation of heat transport capability of the VCHP, a factor of specific effective conductance k_e has been introduced. It

is defined via measured temperatures of evaporator and condenser as following.

$$k_* = \frac{QL_{eff}}{A_w \Delta T_{e-c} k_{Cu}} \quad (1)$$

$$\Delta T_{e-c} = \frac{1}{N_e} \cdot \sum_{i=1}^{N_e} T_{ei} - \frac{1}{N_c} \cdot \sum_{i=1}^{N_c} T_{ci} \quad (2)$$

Where:

- Q - transferred heat flux, W,
- L_{eff} - effective length of heat pipe, m,
- ΔT_{e-c} - average temperature difference between walls of evaporator and condenser, °C,
- A_w - area of cross-section of the VCHP, m²,
- T_i - measured temperatures for evaporator (e) and condenser (c), °C,
- N - number of thermocouples.

Physical meaning of this factor is a ratio of equivalent conductivity of a VCHP with respect to conductivity of pure copper solid tube of the same size.

The Figure 5 shows the value of the factor of specific effective conductance for inclination test for case of maximal heat power of 200W.

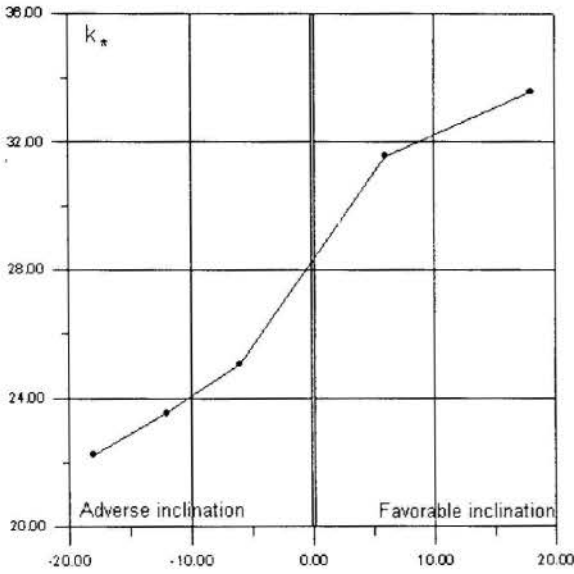


Fig. 5. Specific effective conductance of the VCHP with favorable (+) and adverse (-) inclination, in degrees, for heat power of 200W.

One can see, nature of the resulting curve for the VCHP is similar to one for ordinary heat pipe of constant conductance.

Next test was made for inclination in orthogonal spatial plane, to study an artery retention ability (Figure 6). It is necessary to comment, that for terrestrial (1-G) conditions depriming of artery does not cause considerable loss in heat transport capability with compare to 0-G conditions. In gravity, a puddle of liquid serves like an artery, in case of horizontal adjustment along length of heat pipe is reached. The difference is only in film coefficient, which is slightly declined by additional thermal resistance of the empty artery. Two extreme positions of artery are shown in Figure 6:

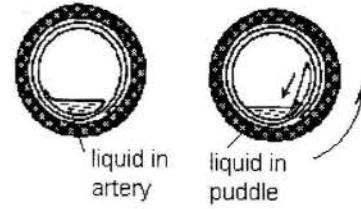


Fig. 6. Depriming of artery with inclination.

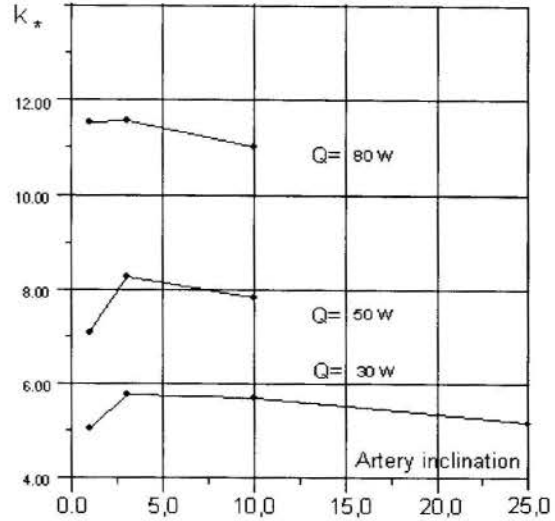


Fig. 7. Specific effective conductance of VCHP with different inclinations of artery.

The summary results of the artery inclination tests are presented on Fig. 7. It is possible to detect the maximum of heat transport capability, which reflects proper priming of artery. This maximum can help to verify the exact position of artery if it had not been marked during fabrication (the shift in 3 degrees can be observed in the figure).

CAPACITY OF CONTROL

The capacity of control depends of the volume of reservoir and can be evaluated via ratio of temperature difference changes ($\Delta T_{e-c} / \Delta T_{e-c}^{max}$) with respect to changes in heat power (Q / Q^{max}). A factor of control can be defined as following:

$$f_c = \frac{\Delta T_{e-c} Q^{max}}{\Delta T_{e-c}^{max} Q} \quad (3)$$

The less this factor, the more capacity of control a heat pipe has. For any heat conductor as well as for an ordinary heat pipe of constant conductance, this factor is $f_c=1$, but for a VCHP - $f_c < 1$. The value of the control factor for the present VCHP was obtained of $f_c=0.22$.

Figure 8 performs the temperature profiles along length of the VCHP for the case of fixed temperature of cooling water at the inlet of condenser jacket.

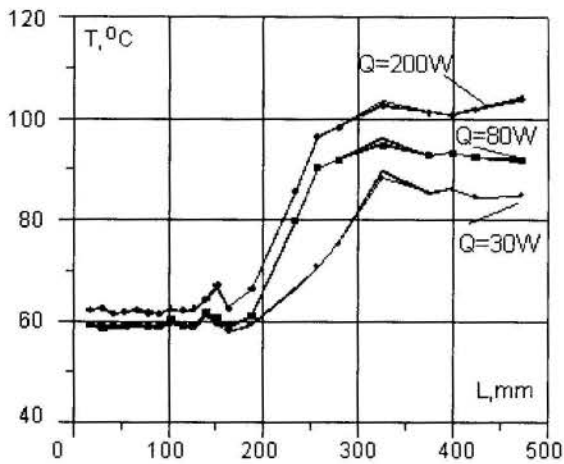


Fig. 8. Temperature profiles along of the VCHP for different levels of transferred heat power.

Measured data for ΔT_{e-c} of the VCHP and calculated data for identical heat pipe of constant conductance are presented in the table 1.

Table 1. Integral characteristic of the VCHP and an identical HP of constant conductance

Power	Temperature difference ΔT_{e-c} for VCHP	Specific effective conductance	Temperature difference ΔT_{e-c} for ordinary HP
30 W	27°C	1,1 W/°C	6,4 °C
80W	33°C	2,4 W/°C	17 °C
200W	43°C	4,7 W/°C	43 °C

One can see, the changes in ΔT_{e-c} for ordinary heat pipe are higher than for variable conductance one.

The Figure 9 shows the performance of the VCHP with the different levels of temperature of water cooling system).

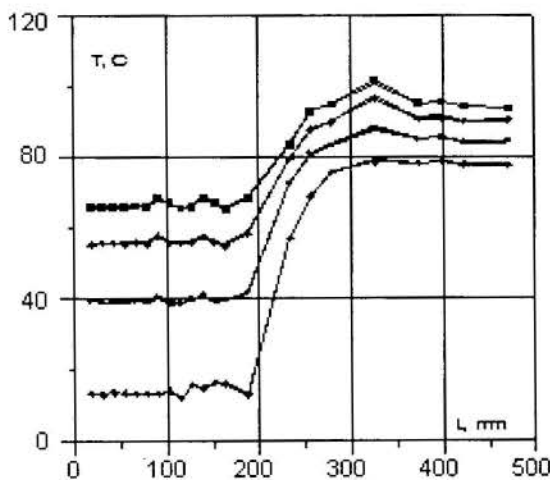


Fig. 9. Temperature profiles along the VCHP for different levels of sink temperature.

The test data confirms a tendency of thermal stability of evaporator temperature in spite of the wide variation of sink temperature.

The Figure 10 demonstrates the integral performance of the VCHP in term of total thermal resistance:

$$R_{tot} = \frac{\Delta T_{e-c}}{Q} \quad (4)$$

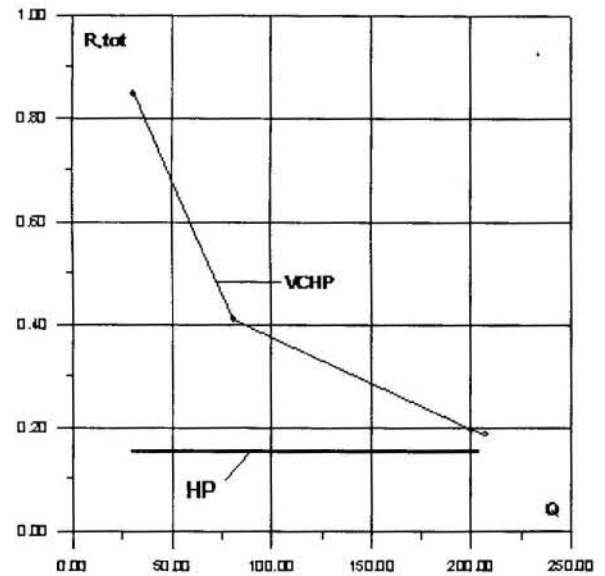


Fig. 10. Total thermal resistance ($^{\circ}\text{C}/\text{W}$) of the VCHP and identical HP versus input heat power, W.

Straight line that is parallel to horizon axis, shows R_{tot} for identical heat pipe of constant conductance. The value of R_{tot} for HP represents a limit for VCHP performance, when non-condensable gas is totally shoved in the reservoir.

START-UP

Presence of non-condensable gas usually simplifies significantly the start-up for any heat pipe. Special test was provided to verify the start-up performance of the hot reservoir VCHP. Initial temperature for the whole tube was 23°C; heat was suddenly applied to evaporator saddle with amount of 200W. As one can see in Figure 11, no problems during transient process were observed. Curves for measured temperatures of evaporator and condenser and heat power profile are shown in this graph.

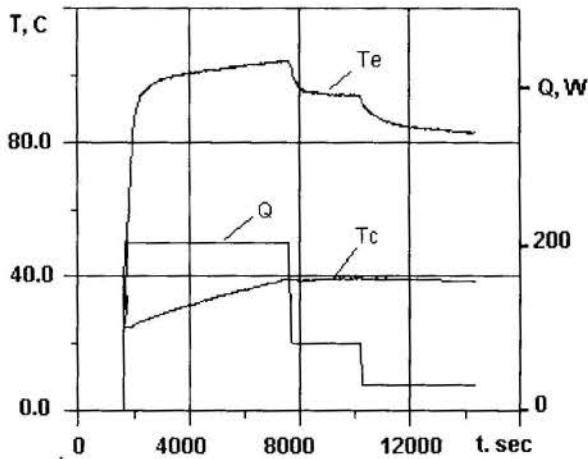


Fig. 11. Successful start-up from initially homogeneous conditions of ambient temperature ($T=23^{\circ}\text{C}$)

After stabilization of evaporator temperature, the temperature of circulated water was slowly increased from 23°C up to 40°C (in the time range from 2500 up to 7500 sec). The temperature of evaporator replied adequately. After reduction of power, evaporator temperature curve has performed an ordinary transient process.

Figure 12 illustrates the profile of velocity of temperature change for evaporator during start-up.

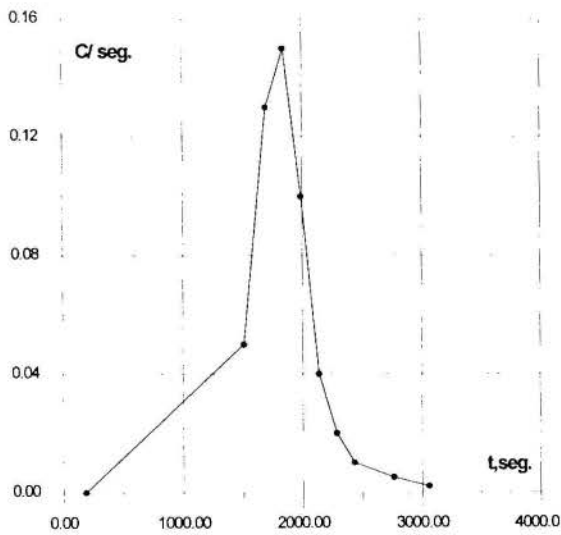


Fig. 12. Velocity of heating during start-up, $^{\circ}\text{C}/\text{sec}$

The total start-up time can be easily defined by this graph. For tested VCHP this value was about 1600 sec.

TRANSIENT PERFORMANCE

Transient performance of the VCHP was studied via observation of evaporator temperature transition with respond to sudden change in heat power. The Figure 13 illustrates typical transient process as a reaction on the step change in heat input power.

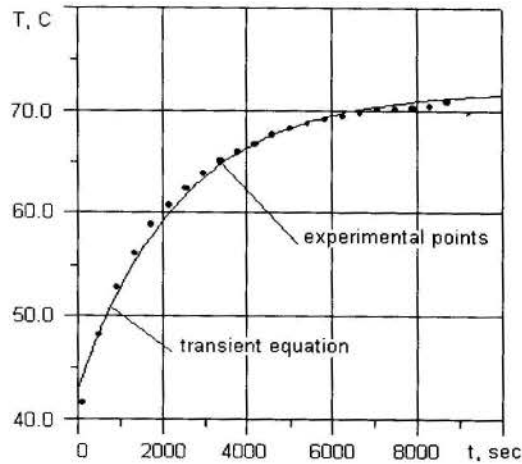


Fig. 13. Transition curve for evaporator temperature .

Numerical evaluation of transient process was defined via transient equation of general form:

$$T_{ss} - T = (T_{ss} - T_0) \exp\left(-\frac{(\tau - \tau_0)}{t}\right) \quad (5)$$

where: T_{ss} - steady-state final temperature;
 T_0 - initial temperature at the instant τ_0 ;
 t - time constant, s.

The transition curve has been adjusted to experimental points T_i with the following criterion

$$\min_y \|T - T_i\|_2 \quad (6)$$

Two parameters were identified during the adjustment: time constant and steady-state temperature: $y=(t, T_{ss})$.

The power step down transition for temperature of evaporator is shown in Figure 14. Obtained time constants by identification of parameters of transient equation for tests presented on Fig. 13 and 14 were as following: $t_1=2450$ (heating, start-up) and $t_2=1050$ (power reduction) respectively.

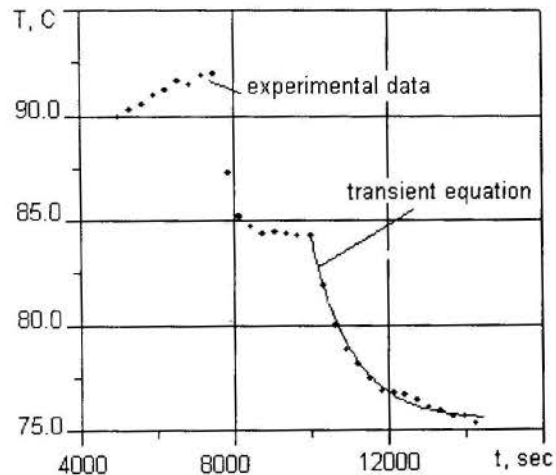


Fig. 14. Power step down transient test

The next transient process is a process of heat pipe switch-off. Transition curve for specific effective conductance is presented in the Figure 15.

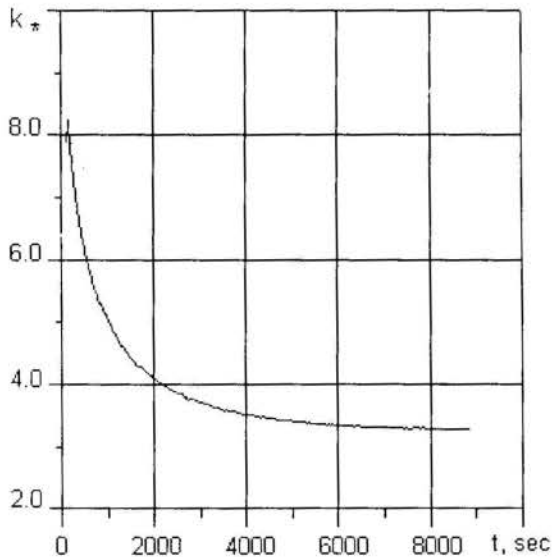


Fig. 15. Transition curve for specific effective conductance after reduction of power input.

The curve illustrates a transient process after reduction of power. Gas occupied considerable region of condenser, that caused decreasing of k_* to its limit for reduced power.

Obtained values of parameters of transition can be used to verify mathematical model of hot unwicked reservoir VCHPs.

CONCLUSION

A new version of gas-loaded variable conductance heat pipe with hot reservoir is developed. This design is more suitable for satellite thermal control and is very flexible to adjust any complex arrangement of disposition of equipment and space radiators. Separation the reservoir from the evaporator gives a possibility to combine a reservoir volume and thermal resistance of its coupling with saddle to reach a desirable level of self-control capacity.

Tests show satisfactory performance of this device. No problems with start-up were observed. External disposition of reservoir provides a long length communication with the condenser, but no visible effects of diffusion influence were detected. Further researches have to be devoted to the improving of film coefficients. It can be accomplished by sintered or grooved type of wick. Artery improves hydraulic characteristics of wick, but seems to be very sensitive to gravity forces fluctuation.

REFERENCES

Bienert, W.B., Skrabek, E.A., 1972, "Heat Pipe Design Handbook" Parts 1,2. Technical Report, Dynatherm Corp., Cockeysville, NASA-CR-134264.

Bobco, R.P., 1989, "Variable Conductance Heat Pipe Performance Analysis: Zero-to-Full Load". *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 3, No. 1, pp. 33-41.

Chi, S.W., 1976, "Heat Pipe: Theory and Practice", Hemisphere Publishing Corporation, Washington D.C..

Colle, S., Fagotti, F., 1990, "Análise da Condução Bi-dimensional em Tubos de Calor na Presença de Gás Não-condensável", Anais, 3 Encontro Nacional de Ciências Térmicas, C.R.Maliska et al., ed., DEM-UFSC, SC, Brasil, Vol.2, pp.643-648.

Dunn, P., Reay, D.A., 1976, "Heat Pipes". Pergamon Press Ltd., Oxford.

Edelstein, F., 1974, "Heat Pipe Manufacturing Study." Grumman Aerospace Corp. Rept., NASA Contract No NAS 5-23156.

El-Genk, M.S., Huang, L., Tournier, J.-M., 1995, "Transient Experiments of an Inclined Copper-Water Heat Pipe". *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 9, No. 1, pp. 109-116.

Faghri, A., 1995, "Heat Pipe Science and Technology". Taylor&Francis.

Gilmore, D.G., ed., 1994, "Satellite Thermal Control Handbook". The Aerospace Corporation Press, El Segundo, California.

Harley, G., Faghri, A., 1994, "Transient Two-Dimensional Gas-Loaded Heat Pipe Analysis". *ASME Journal Of Heat Transfer*, Vol. 116, pp. 716-723.

Ivanovskii M.N., Sorokin V.P., Yagodkin I.V. "The Physical Principles of Heat Pipes". Clarendon Press, Oxford, 1982.

Marcus, B. D., Fleischman, G.L., 1971, "Steady State and Transient Performance of Hot Reservoir Gas Controlled Heat Pipes", NASA CR 73420.

Marcus, B.D., 1972, "Theory and Design of Variable Conductance Heat Pipes", Technical Report, TRW Systems Group. NASA CR-2018.

Peterson, G.P., 1994, "An Introduction to Heat Pipes: Modeling, Testing and Applications". A Wiley-Interscience Publication, John Wiley&Sons, Inc.

Peterson, P.F., Tien, C.L., 1989, "Numerical and Analytical Solutions for Two-Dimensional Gas Distribution in Gas-Loaded Heat Pipes", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 111, pp. 598-604.

Ponnappan, R., Boehman, L.I., Mahelkey, E.T., 1990, "Diffusion-Controlled Startup of a Gas-Loaded Liquid-Metal Heat Pipe", *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 4, No. 3, pp. 332-340.

Rocha, N.R., Machado, L., 1990, "Estudo Térmico de Tubos de Calor Autocontroláveis carregados com gás não condensável", Anais, 3 Encontro Nacional de Ciências Térmicas, C.R.Maliska et al., ed., DEM-UFSC, SC, Brasil, Vol.2, pp.649-653.

Tournier, J.-M., El-Genk, M.S., 1994, "A Heat Pipe Transient Analysis Model". *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 17, No. 5, pp. 753-762.



USO DE CONVECÇÃO INDUZIDA POR TENSÃO SUPERFICIAL NO BOMBEAMENTO DE VAPORES EM SISTEMAS DE VÁCUO.



Luis Antônio Waack Bambace
Instituto de Pesquisas Espaciais-INPE
Caixa Postal 515 São José dos Campos.

RESUMO

Este artigo aborda o uso de convecção de Marangoni-Bénard no bombeamento de vapores de substâncias solúveis em um fluido especial que preenche um meio poroso não homogêneo, entre zonas de alto vácuo, e pressões de operação de bombas de anel líquido, tolerantes a vapores. A tensão superficial e o diâmetro de poros, garantem a selagem do sistema. Os indutores de convecção são as diferenças de áreas de contato fluido-meio nas zonas de porosidade fina e grossa e a variação da tensão superficial com a temperatura.

INTRODUÇÃO

Os chamados dessublimadores, cuja função é retirar vapores em um sistema de vácuo congelando-os, são largamente empregados nas indústrias alimentícia e farmacêutica bem como na separação de UF₆, e são de operação em batelada. São usados principalmente na liofilização de alimentos e remédios, quando para garantir que não haja evaporação de componentes relevantes do produto a evaporação é feita abaixo de 0°C. Ocorre, que nos dessublimadores, além da operação não poder ser contínua, a camada de neve isola a interface de troca de massa das fontes de frio, reduzindo rápida e drasticamente as taxas de deposição. Nestes também se tem problemas de obstrução ao escoamento do gás, e de se resguardar a bomba de vácuo da erosão ou da contaminação do fluido de trabalho por parte do condensado com áreas de congelamento relativamente livres de neve. Estes aspectos motivaram o estudo da solução alternativa aqui proposta. Há vários estudos na área espacial sobre tubos de calor e aplicações no crescimento de cristais no espaço da convecção de Marangoni-Bénard. Estes tópicos inspiraram o presente trabalho, onde se trata do uso de um meio poroso, com zonas de tamanho de poros distintos, cheio de um fluido auxiliar no qual o vapor a ser bombeado é solúvel, na substituição de dessublimadores em sistemas de vácuo, bombeando vapores do segmento de alto vácuo para câmaras de pressões intermediárias compatíveis com bombas de anel líquido, mais simples e tolerantes a vapores, ou simplesmente separando o vapor aproveitável do ácido fluorídrico em linhas de enriquecimento de UF₆. Neste caso com um fluido tipo Flonbin. Nas análises numéricas deste trabalho, aborda-se o uso do sistema na liofilização, onde o objetivo é eliminar a água, e o fluido de trabalho é C₈H₁₀O₄.

Há tubos de calor que são basicamente uma teia porosa e um tubo de retorno, sendo a teia responsável por levar o fluido por tensão superficial até um ponto quente onde este evapora. Suponhamos agora um sistema com duas teias de diferentes densidades de poros. Na teia fina, de maior área de contato, tem-se uma energia potencial igual a área de contato multiplicada pela tensão superficial relativa entre esta e o fluido. Na teia grossa, também. Como contudo as áreas são diferentes, a energia contida no sistema é mínima quando o fluido mais quente e geralmente menos carregado do soluto vaporizável, ocupa a teia fina. Assim, pode-se induzir uma convecção, se as fontes frias e quentes forem colocadas adequadamente no sistema, por exemplo introduzindo uma fonte fria junto a malha fina. Se o fluido de trabalho, puder chegar às superfícies de alto vácuo e pressão intermediárias em condições de temperatura e concentração de soluto adequadas, se terá zonas de evaporação e condensação do

material a ser bombeado no fluido de trabalho, que permanecerá na teia se as porosidades e pressões forem compatíveis. A análise diferencial do problema, exige modelos similares aos de escoamentos induzidos por tensão superficial em crescimento de cristais. Usou-se um programa de diferenças finitas de formulação de volume de controle de malha defasada para esta análise. A figura 1, mostra a geometria analisada.

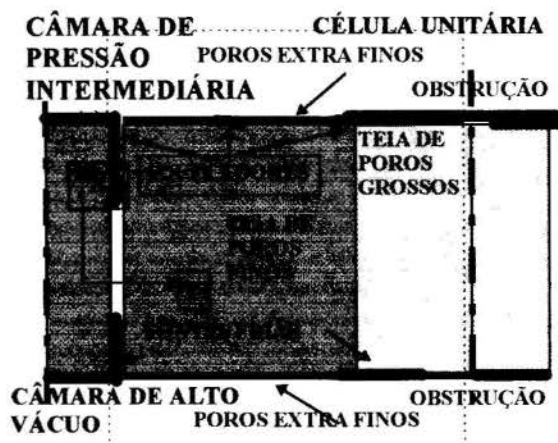


Figura 1: Célula Unitária e Geometria.

ANÁLISE TEÓRICA

Definindo-se P_1 e P_2 respectivamente como as pressões nas câmaras de vácuo parcial e alto vácuo, σ_1 como a tensão superficial da mistura do lado do vácuo parcial, σ_2 como a tensão no lado do alto vácuo, e d_1 e d_2 como os diâmetros de poros, a garantia de permanência do fluido de trabalho na teia exige (Moore, 1968):

$$P_1 - P_2 \leq 2 (\sigma_1 d_1^{-1} + \sigma_2 d_2^{-1}) \quad (1)$$

A taxa de evaporação ou condensação junto a uma superfície de troca de massa, pode ser obtida por (Moore, 1968):

$$m_1 = k_1 [p_r - p(T_i, C_i)] \quad (2)$$

onde m_1 é a taxa de deposição de massa na fronteira i , k_i o coeficiente de transferência de massa, p_i é a pressão parcial do vapor na câmara associada a fronteira i , $p(T_i, C_i)$ é a pressão de vapor do soluto, com concentração de massa C_i , e temperatura T_i , na mistura. Aplica-se a lei de Rault, na falta de dados específicos sobre a mistura, i.e. toma-se esta pressão como a do líquido puro multiplicada pela fração molar deste na solução. A pressão de vapor do líquido puro é calculada pela equação de Classius-Clapeyron:

$$(T^{-1} - T_r^{-1}) = h_{lv} W R^{-1} \ln(P_r/P) \quad (3)$$

onde W é o peso molecular, R a constante universal dos gases, h_{lv} é o calor latente de mudança de fase, o índice r se refere a condição de referência e T e P são pressão e temperatura. A carga de pressão fornecida por uma teia, foi calculada de acordo com ESA (1983) como:

$$\Delta P = 9.756 \sigma d^{-1} \quad (4)$$

onde d é o diâmetro local dos poros, e a perda de carga na teia, foi calculada (ESA 1983) como:

$$\Delta P^* = 150 \mu (1-\phi)^2 \phi^{-3} d^2 \quad (5)$$

onde ϕ é a fração de vazio da teia, e μ é a viscosidade absoluta. Os coeficientes numéricos são experimentais, para teias sinterizadas e valem para o sistema SI. Numa interface entre 2 fluidos, há uma força proporcional a diferença de tensão superficial, que é abrupta. Ao se tratar pelo método de diferenças finitas a equação da quantidade de movimento em uma teia com tensão superficial variando continuamente devido à mudanças de temperatura e concentração, é intuitivo se considerar o fluido de cada uma das células vizinhas às fronteiras de cálculo de balanços de pressão como entidades independentes, diferentes e imissíveis. Assim, aparece um termo igual ao diferencial do ΔP da equação (4) entre os pontos em que se define pressão na malha nas equações da quantidade de movimento do fluido. Adotando-se o modelo de Darcy para um meio poroso bi-dimensional, pode-se escrever conforme ESA (1983 e 1987), Bejan (1984) e Patankar (1980):

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_i^2) + \frac{\partial}{\partial y} \rho u_i u_j = \frac{\partial}{\partial x} p - 9.756 d^{-1} \frac{\partial \sigma}{\partial x} - 150 \mu u_i (1-\phi)^2 \phi^{-3} d^2 \quad (6)$$

onde u_i e u_j são as velocidades nas direções das coordenadas independentes x_i e x_j , ρ é a densidade da mistura, e μ é a viscosidade absoluta, tendo desprezado-se os termos relativos ao divergente do produto da viscosidade pelo gradiente de velocidades, e o termo de gravidade e diferença de densidade. Vale notar, que o termo em $\partial \sigma / \partial x_i$ pode ser obtido derivando-se a energia potencial armazenada pela tensão superficial com a posição via regra da cadeia. A diferença abrupta de tensão superficial da interface de 2 fluidos é, assim, substituída na equação (6) pelo diferencial da variação de tensão superficial. A equação da energia é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_i T) + \frac{\partial}{\partial y} \rho u_j T - \frac{\partial}{\partial x} (\lambda \frac{\partial T}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (\lambda \frac{\partial T}{\partial y}) = 150 (u_i^2 + u_j^2) \mu (1-\phi)^2 \phi^{-3} d^2 C_p^{-1} \quad (7)$$

onde λ é a condutividade térmica efetiva da teia e fluido, i.e. $[\lambda_f \phi + \lambda_b (1-\phi)]^{1/2} [\lambda_f^{-1} \phi + \lambda_b^{-1} (1-\phi)]^{1/2}$, onde f e b designam o fluido e material base. Dada a constante de difusão γ , e seu produto ξ

pelo coeficiente de Posnov (Prata, Colle e Puff 1988), vale para a concentração C de soluto no fluido de trabalho:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_i C) + \frac{\partial}{\partial y} \rho u_j C - \frac{\partial}{\partial x} (\gamma \frac{\partial C}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (\gamma \frac{\partial C}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial x} (\xi \frac{\partial T}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (\xi \frac{\partial T}{\partial y}) = 0 \quad (8)$$

Nos casos de interesse prático, onde se tem taxas de transpiração e velocidades de circulação muito maiores que a de transpiração, o termo de influência de temperatura na equação (8) pode ser desprezado, já que o gradiente de concentração é muito maior que o de temperatura.

As equações acima são resolvidas junto com a equação da continuidade.

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial y} \rho u_j = 0 \quad (9)$$

que é substituída pela "equação da pressão", conforme Patankar (1980). A condição de contorno da equação (2) dividida por ρ_s do soluto fornece a condição de contorno para a velocidade transversal nas zonas de troca de massa, que é nula nos eixos de simetria e fronteiras sólidas, tem-se derivada nula de C onde não ocorre troca de massa, temperatura especificada junto aos aquecedores e resfriadores, velocidade tangencial nula junto a fronteiras sólidas, e derivada desta velocidade nula nas interfaces de evaporação e eixos de simetria, e tem-se ainda para a temperatura e concentração nas interfaces de evaporação:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} - \mathbf{u}_n C_p^* \rho_s (T_\infty - T) - \rho_s h_{lv} \mathbf{u}_n + h (T - T_\infty) = 0 \quad (10)$$

$$-\gamma \frac{\partial C}{\partial n} - \xi \frac{\partial T}{\partial n} + C \mathbf{u}_n = \rho_s \mathbf{u}_{nc} \quad (11)$$

onde a coordenada vetorial \mathbf{n} , medida na direção da normal aumenta no sentido para fora, \mathbf{u}_n é positiva quando direcionada para fora, h é o coeficiente de película, h_{lv} é o calor latente, T_∞ é a temperatura do meio externo, C_p^* é o calor específico do vapor, ρ_s é a densidade do líquido soluto, e $\rho_s \mathbf{u}_{nc}$ é a taxa de troca de massa. A equação (11) impõe severas restrições ao tamanho de malha, na superfície de condensação, já que nesta condição a concentração na interface é controlada pela difusão. Esta condição, é que levou a escolha do $C_8H_{16}O_4$, como fluido de trabalho, ao invés do etileno glicol, da fase inicial do projeto, pois a constante de difusão da água neste é maior. Quando não há troca de massa, \mathbf{u}_n é nula, e a equação (10), vale para a troca de calor local.

Sendo M_B o peso molecular do solvente, μ_b sua viscosidade absoluta, e T a temperatura em Kelvin, o coeficiente de difusão da água no soluto em m^2/s , pode ser obtido (Treyball 1988), por:

$$\gamma = 551.5 \cdot 10^{-18} M_B^{1/2} T \mu_b^{-1} \quad (12)$$

A discretização das equações foi feita conforme Patankar (1980), Spalding e Pun (1977), Maliska (1993) e Weatherill e Morgan (1993). Apenas as condições de contorno de temperatura e concentração exigiram tratamento especial. Utilizou-se do algoritmo SIMPLER, na solução conjunta das equações, e devido ao alto acoplamento entre escoamento e distribuição de temperatura e concentração, utilizou-se pesos baixos, e números altos de ciclos antes de se avançar na malha. Usou-se um modelo linear de dependência de tensão superficial com a temperatura e concentração.

A discretização das condições de contorno mistas, deve receber especial atenção, tanto nas equações de troca de massa, como na de troca de calor, pois oscilações de valor e mudança de sinal da velocidade de transpiração na fase inicial da convergência podem gerar instabilidades numéricas. Para contornar

estas instabilidades toma-se uma equação de balanço igual a de domínio, para efeito de se considerar as trocas entre o domínio e a fronteira, complementada com termos de balanço específico da fronteira, relativos a calor-latente, coeficiente de película e temperatura externa, fluxo imposto e outros, para efeito de se considerar as trocas com o meio externo, ou seja:

$$h(T_n - T_\infty) - q + \rho h_{lv} u_t + 0.5 \rho C_p (u_t + |u_t|) (T_\infty - T_n) = 0.5 \rho C_p (u_d + |u_d|) (T_{n-1} - T_n) + (T_{n-1} - T_n) \lambda / (x_n - x_{n-1}) \quad (13)$$

onde T_n é a temperatura do nó de fronteira, T_{n-1} é a temperatura do nó vizinho na direção normal a fronteira, u_t é a velocidade de transpiração, positiva quando o soluto evapora, u_d a velocidade normal a superfície de evaporação, no nó de velocidade vizinho a fronteira na sua normal, sendo u_d positivo quando a velocidade aponta para a fronteira; λ o coeficiente de condutividade térmica, e x_n e x_{n-1} , as coordenadas dos nós de temperatura de fronteira e vizinho. ρ é a densidade da mistura, C_p seu calor específico, C_p^* o calor específico do vapor, e h_{lv} é o calor latente de sublimação. Quando a malha fica suficientemente fina, as duas velocidades da equação tendem uma a outra e o termo de condução $(T_{n-1} - T_n) k / (x_n - x_{n-1})$ tende ao termo real, proporcional à derivada da temperatura, e a equação (13) torna-se a condição real de contorno. Quando não há transpiração ambas as velocidades tendem a zero. Deve-se notar que o fluxo de massa a jusante, imediatamente após a linha de controle, tem a temperatura da interface, e não altera o balanço de calor, e isto é refletido na equação (13), que embute o conceito dos métodos "upwind". Para a concentração vale:

$$k_i (C_n - C_\infty) - q + 0.5 \rho C_p (u_t + |u_t|) (C_\infty - C_n) = 0.5 \rho C_p (u_d + |u_d|) (C_{n-1} - C_n) + (C_{n-1} - C_n) D / (x_n - x_{n-1}) + \xi (T_{n-1} - T_n) D / (x_n - x_{n-1}) \quad (14)$$

onde os termos tem significado similar, C_n é a concentração na fronteira, C_{n-1} a do nó vizinho, D o coeficiente de difusão, ξ o coeficiente de Posnov, num termo em geral desprezível face a ter-se $|C_{n-1} - C_n| \gg |T_{n-1} - T_n|$.

Um ponto crucial, é a questão da solução da concentração de soluto, junto as fronteiras. Como a camada limite de concentração é muito fina, o uso da equação (14) impõe limites muito severos a dimensão de malha, quando a concentração é praticamente constante no domínio, exceto na camada limite junto as fronteiras de troca de massa. Como a solução analítica da camada limite de concentração é viável, e gera uma solução muito mais simples do problema, abandonou-se o uso de (14), em favor deste tipo de solução. A equação da camada limite para a concentração pode ser escrita (Bejan 1984) como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_0^\delta (C - C_\infty) dy - V_0 (C - C_\infty) = -D \frac{\partial C}{\partial y} \quad (15)$$

Onde V_0 é a velocidade transversal a camada limite na fronteira, C a concentração local, C_∞ a concentração no domínio e u a velocidade paralela a fronteira. Como a camada limite de concentração é muito fina face as demais, pode-se supor $u \neq 0$ e independente de y , face ao fato de que nas zonas de transpiração se tem fronteira livre. O clássico perfil cúbico de camada limite $C = C_0 [1 - 1.5n + n^3/2]$, onde $n = y/\delta$ permite se obter:

$$3\delta \delta' u/8 - V_0 \delta = 1.5 D \quad (16)$$

Integrada esta equação fornece:

$$8 V_0^2 \delta / (3Du) = V_0 \delta / D - 1.5 \ln(V_0 \delta / D + 1.5) + 1.5 \ln(1.5) \quad (17)$$

Obtido δ , tem-se a taxa de difusão $-D \partial C / \partial y$ como igual a $1.5 D (C_\infty - C_0) / \delta$, onde se supôs na dedução que a fronteira fosse em $y=0$. Deve-se notar que se a velocidade for negativa, ou seja se evapora soluto, a camada limite é menor. Nas soluções numéricas, onde u e V mudam de nó para nó, tomou-se:

$$\sum_i \{ 8 V_0^2 \Delta x_i / (3Du) \} = V_0 \delta / D - 1.5 \ln(V_0 \delta / D + 1.5) + 1.5 \ln(1.5) \quad (18)$$

Onde Δx_i é o tamanho do nó i , que está a montante do considerado para cálculo da camada limite, e não tem fronteira sólida.

Para, acelerar a convergência e facilitar a garantia de continuidade de vazões na interface, resolveu-se por bissecção, uma equação de igualdade de trocas para achar qual o acréscimo de concentração de soluto que acrescentado em todo o campo, e portanto sem alterar as vazões internas, garante o balanço de massa nas fronteiras.

RESULTADOS NUMÉRICOS

A tabela 1 apresenta as coordenadas dos 3 tipos de nós usados na malha defasada: variáveis gerais, x_g e y_g , velocidade u na direção x perpendicular as fronteiras de evaporação, x_u e y_u , e velocidade v na direção y paralela a estas fronteiras, x_v e y_v . A tabela 2 se apresenta propriedades do fluido e meio poroso.

Tabela 1: Coordenadas da Malha Usada

IX / IY	x_g (mm)	y_g (mm)	x_u (mm)	y_u (mm)	x_v (mm)	y_v (mm)
1	0	0	0	0	0	0
2	1.56	1.56	2.50	1.56	1.56	2.50
3	3.43	3.43	4.56	3.43	3.43	4.56
4	5.68	5.68	7.03	5.68	5.68	7.03
5	8.38	8.38	11.00	8.38	8.38	11.00
6	11.6	11.16	13.0	11.6	11.6	13.0
7	14.3	14.3	15.4	14.3	14.3	15.4
8	16.6	16.6	17.5	16.6	16.6	17.5
9	18.4	18.4	20.0	18.4	18.4	20.0
10	20.0	20.0	n.a	20.0	20.0	n.a

Tabela 2: Propriedades do Fluido e Meio Poroso

PROPRIEDADE	VALOR
Porosidade	0,7
Densidade	1009 kg/m ³
Tensão Superficial σ	2.6E-2 N/m
$\partial \sigma / \partial T$	-1E-4 N/m/°C
$\partial \sigma / \partial C$ ($C \leftrightarrow$ concentração)	5,3E-5 N/m/kg
Viscosidade	2,8E-3 Poises
Diâmetro dos Poros Internos	0,65 mm IY > 6 / 0,25 mm IY < 6
Diâmetro dos Poros nas Fronteiras de Troca de Massa	0,1 mm

A Tabela 3, ilustra as condições de contorno nos nós externos da célula unitária da figura 1, e nesta $P_v(C, T)$ é a pressão de vapor da água dissolvida no fluido de trabalho à temperatura T e concentração C .

Tabela 3: Condições de Contorno nos Nós Extremos

Fronteira	Relação de nós	Condições de Contorno
x = 0	IY = 1, 4, 6 e 7	T=50°C, u=0, v=0, $\partial C/\partial x=0$
	IY = 8,9,10	-0.31 $\partial T/\partial x = 10(50-T)$ u=0, v=0, $\partial C/\partial x=0$
	IY = 2,3,5	-0.31 $\partial T/\partial x = 10(50-T)$, $\partial v/\partial x=0$ -D $\partial C/\partial x=2.5E-5(1000-P_s(C,T))$ $\partial C/\partial x=0$, $u \cdot \rho(C) = -D\partial C/\partial x$
x = 2 mm	IY = 2,3,4,5	-0.31 $\partial T/\partial x = 8(-50-T)$, $\partial v/\partial x=0$ -D $\partial C/\partial x=2.5E-5(104.4-P_s(C,T))$ $\partial C/\partial x=0$, $u \cdot \rho(C) = -D\partial C/\partial x$
	IY = 1,6,7,10	T=-55°C, u=0, v=0, $\partial C/\partial x=0$
	IY = 8,9	-0.31 $\partial T/\partial x = 8(-50-T)$ u=0, v=0, $\partial C/\partial x=0$
y = 0	IY = 1,2,3	T= 50°C, u=0, v=0, $\partial C/\partial x=0$
	IY = 7,8,9,10	T= -50°C, u=0, v=0, $\partial C/\partial x=0$
	IY = 4,5,6	$\partial C/\partial x=0$, $\partial T/\partial x=0$, $\partial u/\partial x=0$, v=0
y = 2 mm	IY = 2,3,4,5,6,7,8,9	$\partial C/\partial x=0$, $\partial T/\partial x=0$, $\partial u/\partial x=0$, v=0
	IY = 1, 10	vide fronteiras x=0 e x= 2mm

A Figura 2 e as tabelas 4 e 5 mostram o campo de velocidades. Pode-se observar que o fluido faz um movimento circular, no qual vai pela malha fina da face fria junto ao alto vácuo, para face quente junto as pressões relativas as bombas de anel líquido. A região de poros de grande diâmetro, por onde o fluido retorna, oferece uma resistência ao escoamento bem menor que a de poros finos, daí suas velocidades serem maiores, e se utilizar uma zona de poros grossos mais estreita. Em tese, poder-se-ia aumentar a interface de troca, porém a dificuldade de fornecer ou retirar calor limita o tamanho destas zonas, principalmente junto ao alto vácuo. Pode ser interessante contudo reduzir a zona de retorno. Em função do diâmetro de poros de 0.10 mm das regiões de interface com as zonas de alto vácuo e vácuo parcial, e da tensão superficial do fluido usado, o sistema pode resistir a uma diferença de pressão de 1040 Pascal entre os dois lados da teia.

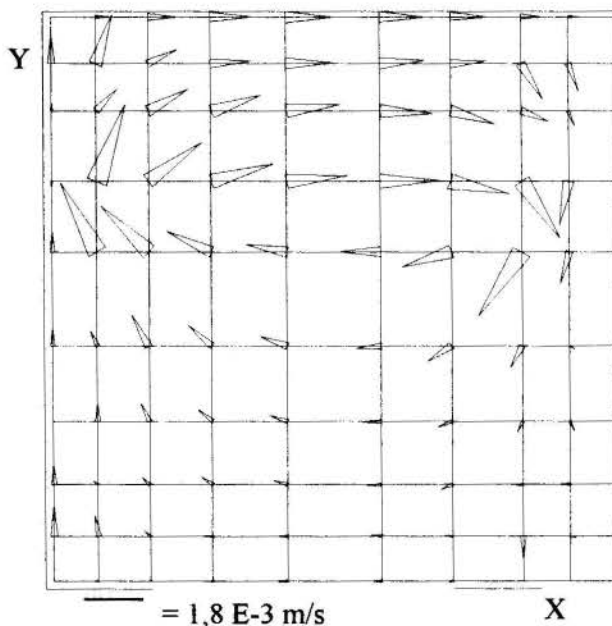


Figura 2: Campo de Velocidades

Tabela 4: Componentes na Direção X da Velocidade

IX	Velocidade na Direção X (m/s)				
	1	0 (IY - 1)	-7.46E-7	-1.00E-6	0
2	0	0	0	0	0 (IY - 10)
	-1.62E-3	1.53E-3	1.11E-3	8.35E-4	8.35E-4
3	0	-2.76E-4	-3.49E-4	-4.34E-4	-7.74E-4
	-1.69E-3	2.09E-3	1.62E-3	1.28E-3	1.28E-3
4	-3.76E-4	-3.76E-4	-4.76E-4	-6.06E-4	-9.16E-4
	-1.53E-3	2.16E-3	1.85E-3	1.57E-3	1.57E-3
5	-4.26E-4	-4.26E-4	-5.38E-4	-6.71E-4	-9.53E-4
	-1.41E-3	2.08E-3	1.89E-3	1.65E-3	1.65E-3
6	-3.44E-4	-3.44E-4	-4.68E-4	-5.88E-4	-9.05E-4
	-1.58E-3	2.09E-3	1.75E-3	1.45E-3	1.45E-3
7	-1.49E-4	-1.49E-4	-3.56E-4	-3.76E-4	-6.74E-4
	-1.79E-3	1.90E-3	1.32E-3	1.01E-3	1.01E-3
8	0	-1.04E-4	-4.16E-4	-1.19E-5	-1.12E-4
	-1.03E-3	5.51E-4	6.03E-4	5.54E-4	5.54E-4
9	0	-6.30E-7	-8.16E-7	-9.64E-7	-1.13E-6
	0	0	0	0	0

Tabela 5: Componentes na Direção Y da Velocidade

IY	Velocidade na Direção Y (m/s)				
	1	0	1.98E-4	4.03E-4	0
2	0	0	0	0	-
	3.10E-3	1.68E-3	8.10E-4	0	-
3	0	2.12E-4	4.13E-4	8.50E-4	1.44E-3
	1.63E-3	1.04E-3	5.63E-4	0	-
4	0	1.63E-4	3.22E-4	5.67E-4	8.20E-4
	6.59E-4	5.81E-4	3.61E-4	0	-
5	0	8.34E-5	1.61E-4	2.60E-4	3.31E-4
	2.00E-4	2.19E-4	1.55E-4	0	-
6	0	-2.27E-5	-3.05E-5	-6.08E-5	-9.84E-5
	6.16E-5	-5.81E-5	-4.52E-5	0	-
7	0	-1.20E-4	-1.62E-4	-3.53E-4	-6.49E-4
	-4.43E-4	-4.8E-4	-2.69E-4	0	-
8	0	-2.48E-4	-1.54E-4	-5.81E-4	-1.42E-3
	-2.57E-3	-1.10E-3	-4.76E-4	0	-
9	0	1.04E-4	-2.38E-4	-2.49E-4	-3.81E-4
	-1.59E-3	-1.04E-3	-5.45E-4	0	-
10	0	1.04E-4	-2.38E-4	-2.49E-4	-3.81E-4
	0	0	0	0	-

A tabela 6 mostra as concentrações de água nas fronteiras de troca de massa. A concentração no domínio é 87.3

Tabela 6: Concentrações de Água nos Nós

Localização	IY	Concentração
Zona com troca de Massa na Fronteira x=0	2	59.4
	3	60.2
	5	64.0
Zona com troca de Massa na Fronteira x= 2 mm	2	204
	3	155
	4	143
Demais nós	5	130
		87.3

As propriedades físicas dos materiais e fluidos, foram obtidas de Rohsenow e Hartnett (1977), ESA (1993) e Bayer A.G (1993). Os valores típicos de coeficiente de troca em modelos de dessublimadores convencionais, e dados para efeitos de comparação foram obtidos com base nos trabalhos sobre sistemas de

bandeja de Dunthorn (1968) e sobre dessublimadores de tubo anular de Ueda e Takashima (1976 e 1977),

A tabela 7 e a figura 3, mostram o campo de temperaturas, e a tabela 8 e figura 4 o campo de pressões.

Tabela 7: Temperaturas nos Nós

IX	Campo de Temperaturas (°C)				
	1	50	23.5	22.8	50
2	50	50	45.8	39.70	35
	50	27.3	27.1	30.9	29.0
3	25.4	31.0	35.6	38.2	38.2
	50	17.0	17.3	18.7	17.7
4	12.5	25.6	33.0	36.7	36.7
	4.55	4.55	6.95	7.81	5.27
5	-1.12	20.4	29.4	33.5	33.5
	-3.32	-3.32	-1.71	-2.44	-6.82
6	-12.2	15.9	25.6	29.2	29.2
	-9.70	-9.70	-8.91	-11.7	-15.9
7	-16.5	11.7	22.1	24.1	24.1
	-15.1	-15.1	-14.5	-16.9	-18.6
8	-14.2	7.02	16.0	17.6	17.6
	-55.0	-21.8	-19.7	-20.7	-19.4
9	-13.6	-4.9	7.13	7.38	-42.0
	-55	-25.7	-23.4	-25.5	-25.0
10	-20.2	-11.6	-5.11	-5.20	-55
	-55.0	-18.5	-18.0	-18.4	-18.9
	-55.0	-55.0	-18.6	-18.7	-55.0

ponto, e que também em virtude da queda da concentração de água ao longo do contato superfície de deposição-corrente bombeada, as taxas média de um dessublimador são muito menores. No instante inicial, num dessublimador axial de baixa capacidade e alta velocidade, a taxa de deposição é muito baixa, a 15 cm da entrada, e sobe com o tempo, já que quanto mais isoladas as superfícies a montante, mais vapor chega ao local. A figura 5 ilustra a evolução de um dessublimador axial tradicional, uma das duas configurações em uso hoje. Deve-se notar que a taxa referente ao sistema proposto toma como área de referência não a área de troca, mas a área total de célula.

Tabela 8: Campo de Pressões Relativo

IY	Campo de Pressões (Pascal)			
	1	147.	144.	162.
2	111.	10.9	117.	120.
	91.3	91.6	95.9	87.7
3	59.2	101.	111.5	116.
	44.5	52.9	55.3	42.9
4	12.6	92.0	105.	110.
	15.6	21.5	8.37	0(referência)
5	-24.71	83.3	97.6	103.
	-6.98	-3.56	-12.5	-31.1
6	-35.0	74.8	90.5	93.4
	-26.7	-23.1	-32.5	-38.7
7	-18.7	65.9	79.8	82.2
	-52.0	-42.1	-46.5	-40.2
8	-9.99	53.1	65.4	66.3
	-71.6	-54.9	-66.0	-61.8
	-29.8	36.1	46.7	47.1

Notar o forte efeito da evaporação e condensação nas temperaturas de fronteira

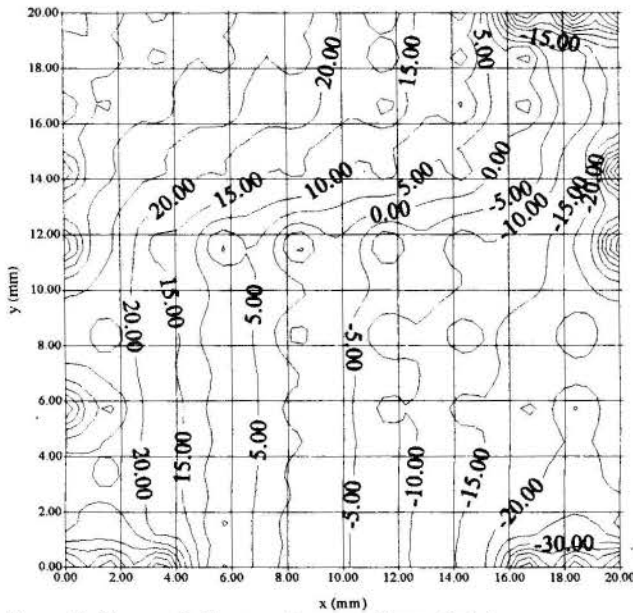


Figura 3: Campo de Temperaturas em Graus Celsius

A taxa efetiva de bombeamento do sistema, é obtida pela soma numa das fronteiras do produto da velocidade de transpiração pela área de cada nó. E o sistema estudado, é capaz de bombear, entre as pressões de 104 Pa (evaporação de água a -20°C largamente empregada em liofilização), e 1000 Pa (limite de uma bomba de anel líquido para água), de $7,03 \cdot 10^{-4}$ kg/(sm²), contra uma taxa limite de $2,6 \cdot 10^{-3}$ kg/(sm²) para a deposição no instante inicial, quando ainda não se depositou neve, junto ao bordo de entrada de um dessublimador convencional. Ocorre que após 60 minutos, cessa completamente a deposição junto a este

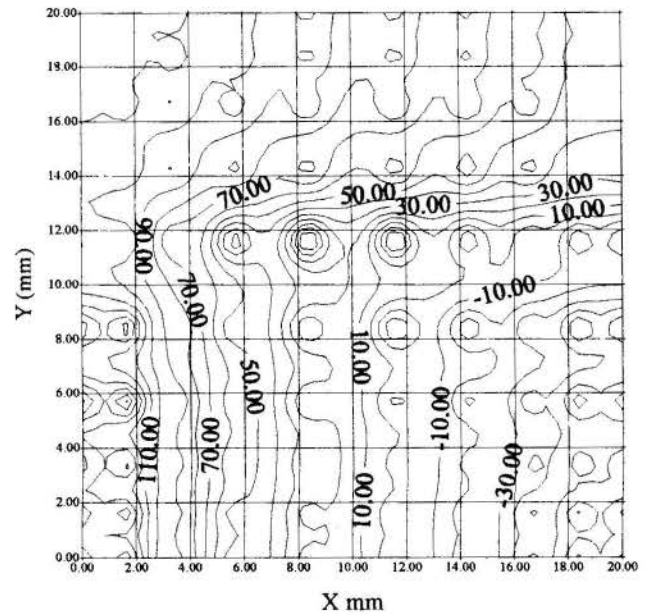


Figura 4: Campo de Pressões em Pascal

Os dados, de coeficiente de troca de calor (que já incluem a radiação linearizada), e de massa, são os valores iniciais usuais de dessublimadores axiais, cujos coeficientes de troca, costumam ser maiores que os dessublimadores de bandeja., dadas as maiores velocidades relativas entre a corrente de gás bombeado e superfícies de troca. Os valores iniciais em questão são aqueles obtidos antes da camada de neve se formar.

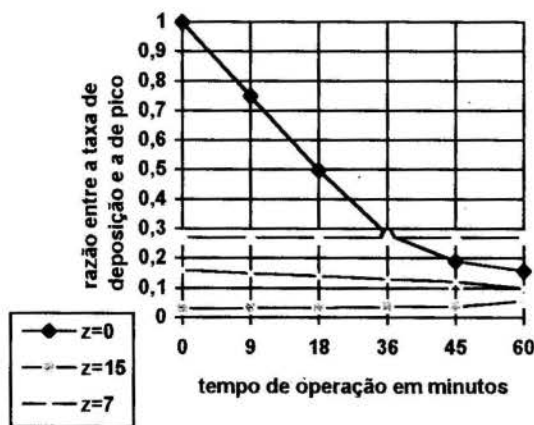


Figura 5: Evolução no Tempo das Taxas de Deposição em $z=0$, $z=7$ e $z=15$ cm num Dessublimador Convencional Axial

Pode-se ver da figura 5, que os dessublimadores tradicionais tem taxas de deposição médias, com a posição, e com o tempo muito menores que a de pico no bordo de entrada. É intuitivo que o sistema proposto, funciona melhor com taxas de deposição menores, pois diminui a necessidade de se retirar ou fornecer calor às interfaces de transpiração, o que permite até mesmo aumentar a área relativa de troca nas células unitárias destinadas a zonas pobres em vapor. Na figura 5 vê-se uma linha horizontal, referente ao nível de pico do dessublimador proposto, em 27% do pico do convencional. Vê-se que em 36 minutos, após o início da operação de um sistema convencional já se tem até no bordo de entrada taxas menores que a do sistema proposto. Espera-se que a taxa limite como função da posição, num sistema semelhante ao proposto, caia mais lentamente que no sistema convencional, justamente devido a possibilidade já citada de se aumentar a fração de área com transpiração. A figura 5 foi obtida com a metodologia proposta por Ueda e Takashima (1976 e 1977) para as pressões, temperaturas e condições de trabalho utilizadas na câmara de alto vácuo do presente estudo.

CONCLUSÕES

O presente estudo, permite afirmar-se que dessublimadores de operação contínua, baseados na circulação em um meio poroso de um fluido auxiliar, induzida por variações de porosidade e tensão superficial são tecnicamente viáveis. Além disto, tais dessublimadores podem atingir eficiências médias de troca por área e por tempo, superiores a sistemas convencionais, para vários tipos de aplicação. Deve-se notar que as velocidades de circulação do fluido na teia, são muito maiores que as velocidades de transpiração, e não são o fator limitante no desempenho do sistema, que é sim a dificuldade de se fornecer ou retirar calor nas interfaces de troca de massa, o que permite prever-se em configurações futuras desempenhos ainda melhores que o da configuração apresentada neste trabalho.

A otimização de um sistema do tipo proposto, porém, envolverá análises mais detalhadas, com um número razoável de seções, bem como a evolução das condições do gás na câmara de vácuo. Esta otimização, poderá ainda incluir elementos de troca de calor no interior do domínio, nas proximidades da superfície, para aumentar a área de troca de massa e ao mesmo tempo remover as limitações impostas pelo balanço térmico nestas áreas. Também se faz necessário um estudo mais detalhado sobre os desvios da lei de Rault nas condições operacionais prováveis do sistema, e um levantamento mais extenso de possíveis fluidos de trabalho. Em aplicações mais nobres, como liofilização de remédios (-55°C de temperatura do gás na câmara de vácuo), nas quais, face as baixas pressões reinantes, tem-se taxas muito bai-

xas de troca de massa, espera-se que sistemas similares ao proposto se imponham primeiro, pois nestes casos, a troca de calor deixa de ser problema.

REFERÊNCIAS

- Moore, W.J. 1968. "Físico Química". Editora da Universidade de São Paulo e ao Livro Técnico S.A.
- ESA, 1983. ESA "Thermal Control Reference Handbook". European Space Agency.
- Bejan, A. 1984. "Convection Heat Transfer". John Wiley & Sons. N.Y.
- Patankar, S.V. 1980. "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow". Mc Graw-Hill. N.Y
- Treybal, R.E. 1981. "Mass Transfer Operations". Mc Graw-Hill. N.Y
- Maliska, C.R. 1993. "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional" Universidade Federal de Santa Catarina. 1988.
- Spalding, D.B. Pun, W.M. 1977. "A General Computer Program for Two-Dimensional Elliptic Flows". Imperial College of Science and Technology. Mechanical Engineering Department. London.
- Rohsenow, W.M. and Hartnett, J.P. 1977. "Handbook of Heat Transfer". Mc Graw-Hill. N.Y
- Bayer.A.G 1993. "Zusammenstellung II: Kennzahlen von Lösmitteln". München. (Catálogo Comercial)
- Dunthorn, D. I. 1968. "The Design of Batch Dessublimers". Union Carbide Corporation. Nuclear Division. Oak Ridge. USA.
- Ueda, H; Takashima, Y. 1976. "The Local Growth Rate of Dessublimation on the Surface of an Annular Tube Cold Trap". *Journal of Chemical Engineering of Japan*. vol 9(2),pp 121-129.
- Ueda, H; Takashima, Y. 1977. Dessublimation of 2 Component Vapors on the Surface of an Annular Tube Cold Trap. *Journal of Chemical Engineering of Japan*. vol 10(1),pp 7-13.
- Prata, A.T; Colle,S; Puff,R. 1988. "A Parametric Analysis of Moisture Migration in Polymers". *Revista Brasileira de Ciências Mecânicas*. v 10(2),pp 133-159.
- Weatherill, N.P. Morgan, K. 1993. Recent "Developments in Computational Fluid Dynamics". Propesa. University of Whales.
- ESA. 1987. "Fluid Sciences and Materials Sciences in Space". European Space Agency . I.I.U.Walter Editor. Paris.

ABSTRACT

This paper analyses the use of the Marangoni-Bénard convection in a porous media with zones of different pore sizes and induced temperature-gradients, in the continuous pumping from a high vacuum zone to a zone with pressures compatible with liquid ring pumps of vapors that are soluble in the special fluid that fills the porous media.

MOMENTUM AND ENERGY TRANSFER IN AN INCOMPRESSIBLE FLUID FLOW THROUGH A NONSATURATED POROUS MEDIUM



Maria Laura Martins-Costa

Mechanical Engineering Department – Universidade Federal Fluminense
Rua Passo da Pátria, 156 – 24210-240 – Niterói, RJ, Brasil

Rogério M. Saldanha da Gama

Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC/CNPq
Rua Lauro Müller, 455 – 22290-160 – Rio de Janeiro, RJ, Brasil



ABSTRACT

A mixture theory approach is used to simulate the momentum and energy transfer in a one-dimensional flow of a newtonian fluid through a rigid nonsaturated porous matrix. The mixture represents a set of three overlapping continuous constituents: a solid (porous medium), a liquid (newtonian fluid) and an inert gas, included to account for the compressibility of the system as a whole. The problem is described by a set of four nonlinear partial differential equations.

INTRODUCTION

Problems that impact the energy self-sufficiency and the environmental state justify the increasing attention devoted to transport phenomena in porous media. Some practical applications like enhanced oil recovery processes, storage of nuclear waste material (in deep earth rock layers or deep ocean seabeds), contamination of soils by hazardous wastes and pollution movement motivate the interest attached to these phenomena.

In this work the Theory of Mixtures, a convenient method to describe multicomponent systems, is used to build a local model for the nonsaturated flow and heat transfer of a newtonian fluid through a rigid porous matrix. The nonsaturated porous medium is modelled as a mixture of three overlapping continuous constituents: a solid (a rigid, homogeneous and isotropic porous matrix), a liquid (an incompressible newtonian fluid) and an inert gas, assumed with zero mass density; which accounts for the compressibility of the system as a whole.

In order to account for the thermomechanical coupling among the constituents, additional terms, playing the role of momentum and energy sources, must be considered in the balance equations. The momentum and mass balance equations are solved for the fluid constituent only - since the porous matrix is rigid and at rest - while the energy balance equations must be solved for the fluid (liquid) and solid constituents. The gas constituent, included for allowing changes in the liquid fraction (or liquid concentration) needs no equation to describe its behaviour. The resulting mathematical representation consists of a set of four nonlinear partial differential equations subjected to initial data and boundary conditions.

A special numerical approach is used to simulate one-dimensional cases of interest. The hydrodynamical problem is approximated by means of the Glimm's Scheme, combined with an operator splitting technique, which accounts for the nonhomogeneous part of the

differential equations. A finite-difference implicit scheme, with staggered grids, is used to approximate the thermal problem.

GOVERNING EQUATIONS

Since the solid constituent is assumed rigid and at rest and the third constituent is a gas with negligible inertia, specific heat and thermal conductivity, the continuity and momentum equations must be considered for the fluid constituent (represented by a newtonian liquid) only. Assuming a chemically nonreacting mixture without any source of mass, the mass balance for the fluid constituent is given by (Atkin and Craine, 1976):

$$\frac{\partial \rho_F}{\partial t} + \text{div}(\rho_F \mathbf{v}_F) = 0 \quad (1)$$

in which ρ_F is the fluid constituent mass density and \mathbf{v}_F is the fluid constituent velocity in the mixture.

The balance of linear momentum is given by (Atkin and Craine, 1976):

$$\rho_F \left[\frac{\partial \mathbf{v}_F}{\partial t} + (\text{grad} \mathbf{v}_F) \mathbf{v}_F \right] = \text{div} \mathbf{T}_F + \mathbf{m}_F + \rho_F \mathbf{b}_F \quad (2)$$

where \mathbf{T}_F is the partial stress tensor acting on the fluid constituent, \mathbf{m}_F is a momentum source and \mathbf{b}_F is a specific body force.

Considering a newtonian incompressible fluid constituent, the momentum source, which accounts for the dynamical interaction (among the constituents) acting on it, according to Williams (1978) and Saldanha da Gama and Sampaio (1987) is given by:

$$\mathbf{m}_F = -\alpha \psi^2 \mathbf{v}_F - \beta \psi \text{grad} \psi \quad \alpha = \frac{\varepsilon^2 \eta}{K} \quad \beta = \frac{\varepsilon^2 \eta D}{K} \quad (3)$$

where η is the fluid viscosity (continuum viewpoint), \mathcal{D} is the diffusion coefficient and K is the specific permeability. The saturation ψ relates the fluid fraction φ to the porous medium porosity ε (a constant):

$$\psi = \frac{\rho_F}{\varepsilon\rho} \quad , \quad \text{since} \quad \varphi = \frac{\rho_F}{\rho} \quad (4)$$

where ρ is the actual density of the liquid (regarded as a single continuum).

The partial stress tensor for the fluid constituent representing a newtonian incompressible fluid, according to Williams (1978) is given by:

$$\mathbf{T}_F = -p_F \mathbf{1} + 2\mu \mathbf{D}_F \quad (5)$$

where \mathbf{D}_F is the symmetrical part of \mathbf{v}_F (fluid Constituent velocity) gradient, p_F is a partial pressure directly proportional to the square of ρ_F (Williams, 1978) and μ is related to the fluid constituent viscosity. According to Allen (1986), \mathbf{T}_F may be approximated as:

$$\mathbf{T}_F = -\varepsilon^2 \bar{p} \psi^2 \mathbf{1} \quad (6)$$

where \bar{p} is a constant pressure.

The energy balance must be considered for both constituents (Atkin and Craine, 1976):

$$\rho_F c_F \left[\frac{\partial T_F}{\partial t} + (\text{grad} T_F) \mathbf{v}_F \right] = -\text{div} \mathbf{q}_F + \mathbf{T}_F \cdot \mathbf{D}_F + q_F''' + \Pi_{FS} \quad (7)$$

$$\rho_S c_S \left(\frac{\partial T_S}{\partial t} \right) = -\text{div} \mathbf{q}_S + q_S''' - \Pi_{FS} \quad (8)$$

in which ρ_S is the solid constituent mass density, c_F and c_S are the solid and the fluid specific heats, T_F and T_S are the fluid constituent and the solid constituent temperature fields, \mathbf{q}_F and \mathbf{q}_S are the conduction heat fluxes for the fluid and the solid constituents and q_F''' and q_S''' are the fluid and solid constituents heat sources. The field Π_{FS} is a temperature dependent source, which represents the energy transfer per unit time and unit volume, from the solid constituent to the fluid constituent.

Assuming a linear dependence on the parcel of the mixture actually "occupied" by the fluid, the partial heat flux for the fluid constituent is proportional to the fluid fraction φ (Martins-Costa and Saldanha da Gama, 1996):

$$\mathbf{q}_F = -\Lambda k_F \varepsilon \psi \text{grad} T_F \quad (9)$$

in which Λ is a constant depending on the porous medium thermal properties and internal structure and k_F is the actual liquid thermal conductivity.

The partial heat flux for the solid constituent depends on the porous matrix porosity. It may be stated as (Martins-Costa and Saldanha da Gama, 1996):

$$\mathbf{q}_S = -\Lambda k_S (1 - \varepsilon) \text{grad} T_S \quad (10)$$

where k_S is the actual solid thermal conductivity.

According to Martins-Costa and Saldanha da Gama (1996), the energy source Π_{FS} , which accounts for the constituents' local temperature difference, may be expressed as:

$$\Pi_{FS} = -\Pi_{SF} = \psi R_{FS} (T_S - T_F) \quad (11)$$

where R_{FS} is an always positive factor which may depend not only on spatial position and on the mixture constituents' thermal properties but also on their velocities (Martins-Costa and Saldanha da Gama, 1996).

ONEDIMENSIONAL PHENOMENA

Assuming now that all the quantities may depend only on the time t and on the position x , and that v is the only nonvanishing component of the fluid constituent velocity \mathbf{v}_F , such that $v = \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{i}$, the governing equations may be expressed as:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\psi v) = 0 \quad (12)$$

$$\rho \varepsilon \left[\psi \frac{\partial v}{\partial t} + \psi v \frac{\partial v}{\partial x} \right] = -\frac{\partial}{\partial x} (\varepsilon^2 \psi^2 \bar{p}) - \frac{\beta \rho^2 \varepsilon^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^2) - \alpha \psi^2 v \quad (13)$$

$$\varepsilon \psi \rho c_F \left[\frac{\partial T_F}{\partial t} + v \frac{\partial T_F}{\partial x} \right] = \Lambda k_F \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial T_F}{\partial x} \right) + R_{FS} \psi (T_S - T_F) \quad (14)$$

$$\rho_S c_S \left[\frac{\partial T_S}{\partial t} \right] = \Lambda k_S (1 - \varepsilon) \frac{\partial^2 T_S}{\partial x^2} + R_{FS} \psi (T_F - T_S) \quad (15)$$

At this point it is convenient to introduce the following definition, considering a reference pressure p_0 :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\varepsilon^2 \psi^2 \bar{p}) + \frac{\beta \rho^2 \varepsilon^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^2) = \varepsilon^2 p_0 \frac{\partial}{\partial x} (\psi^2) \quad (16)$$

The set of equations (12-15) may be rewritten as:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\psi u) = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\psi u) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\psi u^2 + \psi^2) = -\gamma \psi^2 u \quad (18)$$

$$\psi \left[\frac{\partial \theta_F}{\partial \tau} + u \frac{\partial \theta_F}{\partial \xi} \right] = \frac{\Lambda k_F \varepsilon}{\varepsilon \rho c_F} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\psi \frac{\partial \theta_F}{\partial \xi} \right) + \frac{R_{FS} \psi}{\varepsilon \rho c_F} (\theta_S - \theta_F) \quad (19)$$

$$\frac{\partial \theta_S}{\partial \tau} = \frac{\Lambda k_S (1 - \varepsilon)}{\rho_S c_S} \frac{\partial^2 \theta_S}{\partial \xi^2} + \frac{R_{FS} \psi}{\rho_S c_S} (\theta_F - \theta_S) \quad (20)$$

provided that the following dimensionless quantities are defined:

$$u = v \sqrt{\frac{\rho}{\varepsilon p_0}} \quad \gamma = \frac{\alpha L}{\rho \varepsilon} \sqrt{\frac{\rho}{\varepsilon p_0}} \quad \xi = \frac{x}{L} \quad (21)$$

$$\tau = \frac{t}{L} \sqrt{\frac{\varepsilon p_0}{\rho}} \quad \theta_F = \frac{T_F}{T_0} \quad \theta_S = \frac{T_S}{T_0}$$

in which T_0 is a reference temperature and L is a characteristic length.

It is to be noticed that, in order to solve the above problem, initial data and boundary conditions for ψ , u , θ_F and θ_S are required.

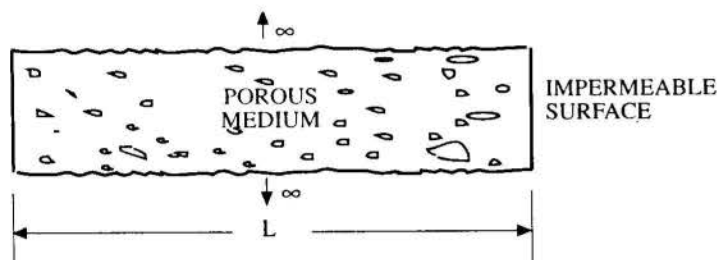


FIG 1 - Problem Scheme

NUMERICAL PROCEDURE

Starting from the fields ψ , u , θ_F and θ_S at time τ_n , the approximations for them at time τ_{n+1} are reached through the following steps:

i) Hydrodynamical problem

The following procedure is employed to advance from the time τ_n to τ_{n+1} , assuming that $F \equiv \psi$ and $G \equiv \psi u$, so that the problem below represents (17-18), subjected to a given data at $\tau = \tau_n$:

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} + \frac{\partial G}{\partial \xi} = 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{G^2}{F} + F^2 \right) = -\gamma F G \quad (22)$$

$$F = \hat{F}_n(\xi) \quad \text{at } \tau = \tau_n$$

$$G = \hat{G}_n(\xi) \quad \text{at } \tau = \tau_n$$

in which $F = \hat{F}_n(\xi, \tau)$ and $G = \hat{G}_n(\xi, \tau)$.

An approximation for the fields F and G at the time τ_{n+1} is obtained by employing an "operator splitting". The approximation is reached by solving the following problem:

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} = 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} = -\gamma F G \quad (23)$$

$$F = \hat{F}_{n+1}(\xi) \quad \text{at } \tau = \tau_n$$

$$G = \hat{G}_{n+1}(\xi) \quad \text{at } \tau = \tau_n$$

as follows:

$$F = \hat{F}_{n+1}(\xi) \approx \bar{F}_{n+1}(\xi) \quad (24)$$

$$G = \hat{G}_{n+1}(\xi) \approx \bar{G}_{n+1}(\xi) \exp(-\gamma \bar{F}_{n+1}(\xi) \Delta \tau)$$

calculated at $\tau = \tau_{n+1}$, where $\Delta \tau = \tau_{n+1} - \tau_n$.

The fields \bar{F}_{n+1} and \bar{G}_{n+1} used as initial data in (23) are obtained from the homogeneous problem:

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} + \frac{\partial G}{\partial \xi} = 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{G^2}{F} + F^2 \right) = 0 \quad (25)$$

$$F = \hat{F}_n(\xi) \quad \text{at } \tau = \tau_n$$

$$G = \hat{G}_n(\xi) \quad \text{at } \tau = \tau_n$$

In other words, \bar{F}_{n+1} and \bar{G}_{n+1} are the solutions of (25) evaluated at the time $\tau = \tau_{n+1}$.

Problems like (25) may be numerically solved by means of the Glimm's Scheme (Smoller, 1983). The first step in this scheme is to approximate the initial data by a piecewise constant function as follows:

$$F = \hat{F}_n(\xi) \approx F_{n_i} = \hat{F}_n(\xi_i + \nu_n \Delta \xi) \quad (26)$$

$$G = \hat{G}_n(\xi) \approx G_{n_i} = \hat{G}_n(\xi_i + \nu_n \Delta \xi)$$

for $\xi_i - \frac{\Delta \xi}{2} < \xi < \xi_i + \frac{\Delta \xi}{2}$

in which ν_n is a number randomly chosen in the open interval $(-1/2, 1/2)$ and $\Delta \xi$ is the width of each step ($\Delta \xi = \xi_{i+1} - \xi_i$).

The above approximations for the initial data give rise, for each two consecutive steps, to the Riemann problem given by:

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} + \frac{\partial G}{\partial \xi} = 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{G^2}{F} + F^2 \right) = 0 \quad (27)$$

$$(F, G) = (F_{n_i}, G_{n_i}) \quad -\infty < \xi < \xi_i + \frac{\Delta \xi}{2}$$

$$(F, G) = (F_{n_{i+1}}, G_{n_{i+1}}) \quad \xi_{i+1} - \frac{\Delta \xi}{2} < \xi < \infty$$

where $\tau = \tau_n$.

Denoting by $F_{n_i}^R$ and $G_{n_i}^R$ the generalized solution of (28), the approximation for the solution of (25) at the time τ_{n+1} is given as follows:

$$F = \hat{F}_{n+1}(\xi) \approx F_{n_i}^R(\xi, \tau_{n+1}) \quad \xi_i < \xi < \xi_{i+1} \quad (28)$$

$$G = \hat{G}_{n+1}(\xi) \approx G_{n_i}^R(\xi, \tau_{n+1}) \quad \xi_i < \xi < \xi_{i+1}$$

in which τ_{n+1} must be such that the Courant-Friedrich-Lewy condition is satisfied (Smoller, 1983):

$$\tau_{n+1} - \tau_n \leq \frac{\Delta \xi}{2|\lambda|_{max}} \quad (29)$$

where $|\lambda|_{max}$ is the maximum (in absolute value) propagation speed, considering all the Riemann problems.

ii) Thermal Problem

Once F and G at $\tau = \tau_{n+1}$ are known for all ξ , a finite difference scheme is employed to determine θ_F and θ_S at $\tau = \tau_{n+1}$, for all ξ . The scheme is applied to the following problem:

$$F^{n+1} \frac{\partial \theta_F}{\partial \tau} + G^{n+1} \left(\frac{\partial \theta_F}{\partial \xi} \right)^n = A_F \frac{\partial^2 \theta_F}{\partial \xi^2} + A_F \left(\frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right)^n \left(\frac{\partial \theta_F}{\partial \xi} \right)^n + B_F F^{n+1} (\theta_S - \theta_F) \quad (30)$$

$$\frac{\partial \theta_S}{\partial \tau} = A_S \frac{\partial^2 \theta_S}{\partial \xi^2} + B_S F^{n+1} (\theta_F - \theta_S)$$

in which:

$$A_F = \sqrt{\frac{\rho}{p_0}} \left(\frac{\Lambda k_F}{\rho c_F L} \right) \quad B_F = \frac{R_{FS}}{\varepsilon \rho c_F} \sqrt{\frac{\rho}{p_0}} \quad (31)$$

$$A_S = \frac{\Lambda k_S (1 - \varepsilon)}{\rho s c_S L} \sqrt{\frac{\rho}{p_0}} \quad B_S = \frac{R}{\rho s c_S} L \sqrt{\frac{\rho}{p_0}}$$

SOME RESULTS

The procedure pointed out in the previous section is now employed for simulating a porous slab with a prescribed saturation at $\xi = 0$ and an impermeable surface at $\xi = 1$, represented by the following problem:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\psi u) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\psi u) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\psi u^2 + \psi^2) = -\gamma \psi^2 u \quad (32)$$

$$\psi = \hat{\psi}_0(\xi) \quad \text{for } \tau = 0$$

$$\psi u = \hat{\psi}_0(\xi) \hat{u}_0(\xi) \quad \text{for } \tau = 0$$

subject to the following boundary conditions, which are imposed on the first and last steps after each advance in time. (They must be considered together with initial data for ψ , u , θ_F and θ_S):

$$\xi = 0 \Rightarrow \begin{cases} \psi = 0.4 & \text{for } 0 < \tau \leq 140 \\ \psi = \text{free} & \text{for } \tau > 140 \end{cases} \quad (33)$$

$$\begin{cases} u = \text{free} & \text{for } 0 < \tau \leq 140 \\ u = 0 & \text{for } \tau > 140 \end{cases}$$

$$\xi = 1 \Rightarrow u = 0 \quad (34)$$

Considering the thermal boundary conditions:

$$\xi = 0 \Rightarrow \theta_F = \theta_S = 1 \quad (35)$$

$$\xi = 1 \Rightarrow \frac{\partial \theta_F}{\partial \xi} = \frac{\partial \theta_S}{\partial \xi} = 0 \quad (36)$$

Some selected results are presented in Figures 2 and 3, each of them consisting of eight graphs, representing distinct time instants (the first graph presents the initial data ($\tau = 0$)). Four curves are plotted in each graph: ψ is represented if solid lines connect the points, u if dashed lines connect the points, θ_F if solid lines with * connect the points and θ_S if dashed lines with * connect the points.

Figure 2 represents the distribution of the four considered variables, when $\gamma = 0$. This is equivalent to consider a perfect fluid flowing through the nonsaturated porous slab shown in figure 1. Figure 3 represents ψ , u , θ_F and θ_S versus ξ when $\gamma = 10^{-3}$, for the same time instants. A perfect fluid behaviour shows more accentuated discontinuities than a newtonian fluid, as physically expected. The differences become more evident when γ assumes greater values.

CONCLUDING REMARKS

A non conventional numerical approach is presented, in which a mathematical problem is decomposed in two parts: one elliptic (representing the energy equations for both constituents) and one hyperbolic (representing the continuity and momentum equations for the fluid constituent). A specific and powerful procedure is employed in the simulation of the hyperbolic part - Glimm's scheme combined with an operator splitting technique. The approximation of the hyperbolic problem is used as input in the elliptic part simulation, by means of a finite difference scheme, specially constructed for this problem.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was partially developed at the LMTA - Laboratory of Theoretical and Applied Mechanics at the Universidade Federal Fluminense.

REFERENCES

- Allen, M.B., 1986. "Mechanics of Multiphase Fluid Flows in Variably Saturated Porous Media", Int. J. Engng. Sci, **24**, 339-351
- Atkin, R.J. and Craine, R.E., 1976. "Continuum Theories of Mixtures. Basic Theory and Historical Development", Quart. J. Mech. Appl. Math., **29**, 209-244
- Martins-Costa, M.L. and Saldanha da Gama, R.M., 1996. "Constitutive Relations for the Energy Transfer in Nonsaturated Continuous Mixtures", Mech. Research Comm., **23/2**, 117-122
- Saldanha da Gama, R.M. and Sampaio, R., 1987. "A Model for the Flow of an Incompressible Newtonian Fluid Through a Nonsaturated Infinite Rigid Porous Medium", Comput. Appl. Math., **6/2**, 195-205
- Smoller, J., 1983. "Shock-Waves and Reaction-Diffusion Equations", Springer-Verlag, Berlin
- Williams, W.O., 1978. "Constitutive Equations for a Flow of an Incompressible Viscous Fluid through a Porous Medium", Quart. J. Appl. Math., **36**, 255-267

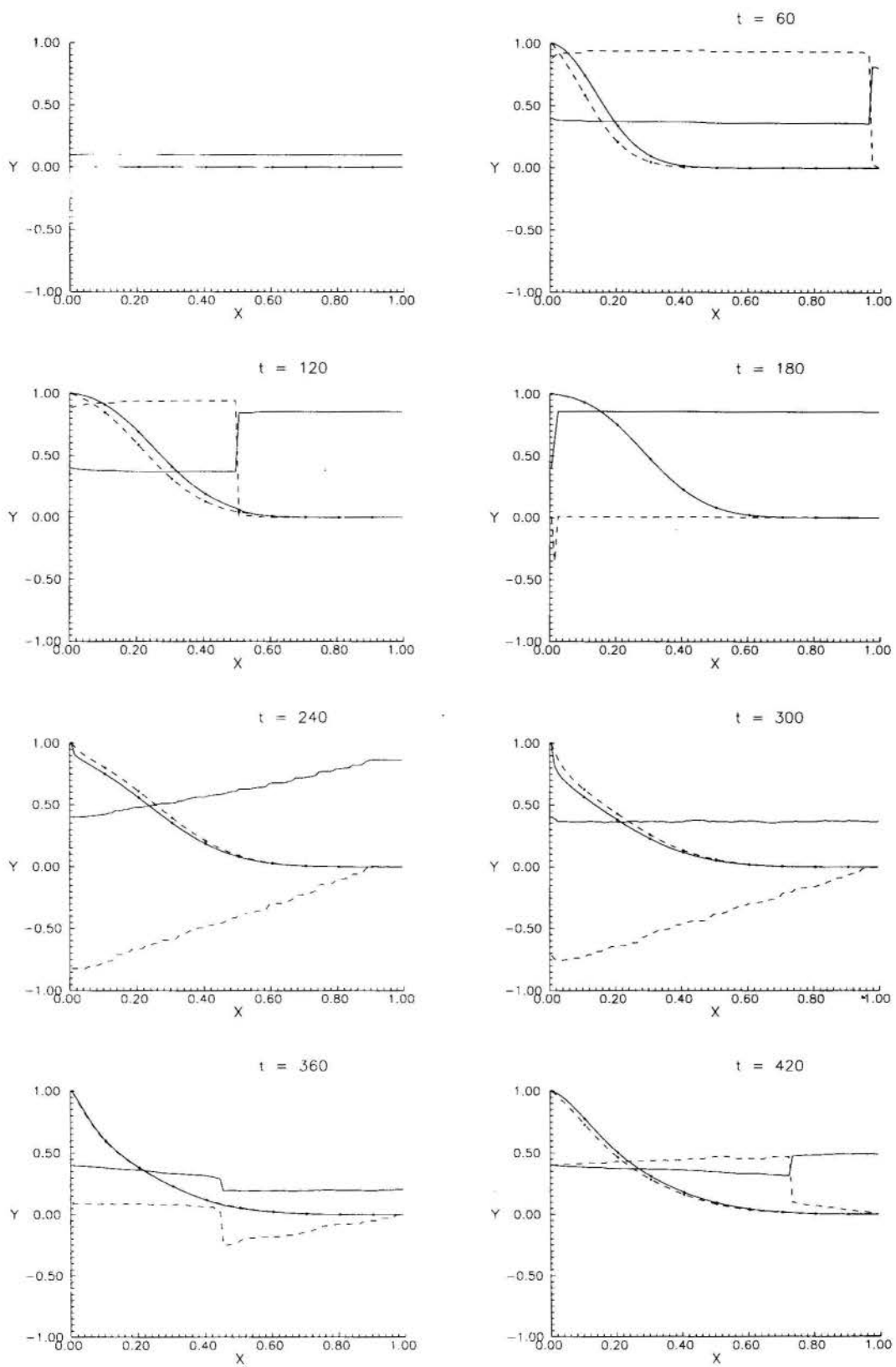


Figure 2 - Field Y (representing ψ , u , θ_F and θ_S) vs. position - for $\gamma = 0$

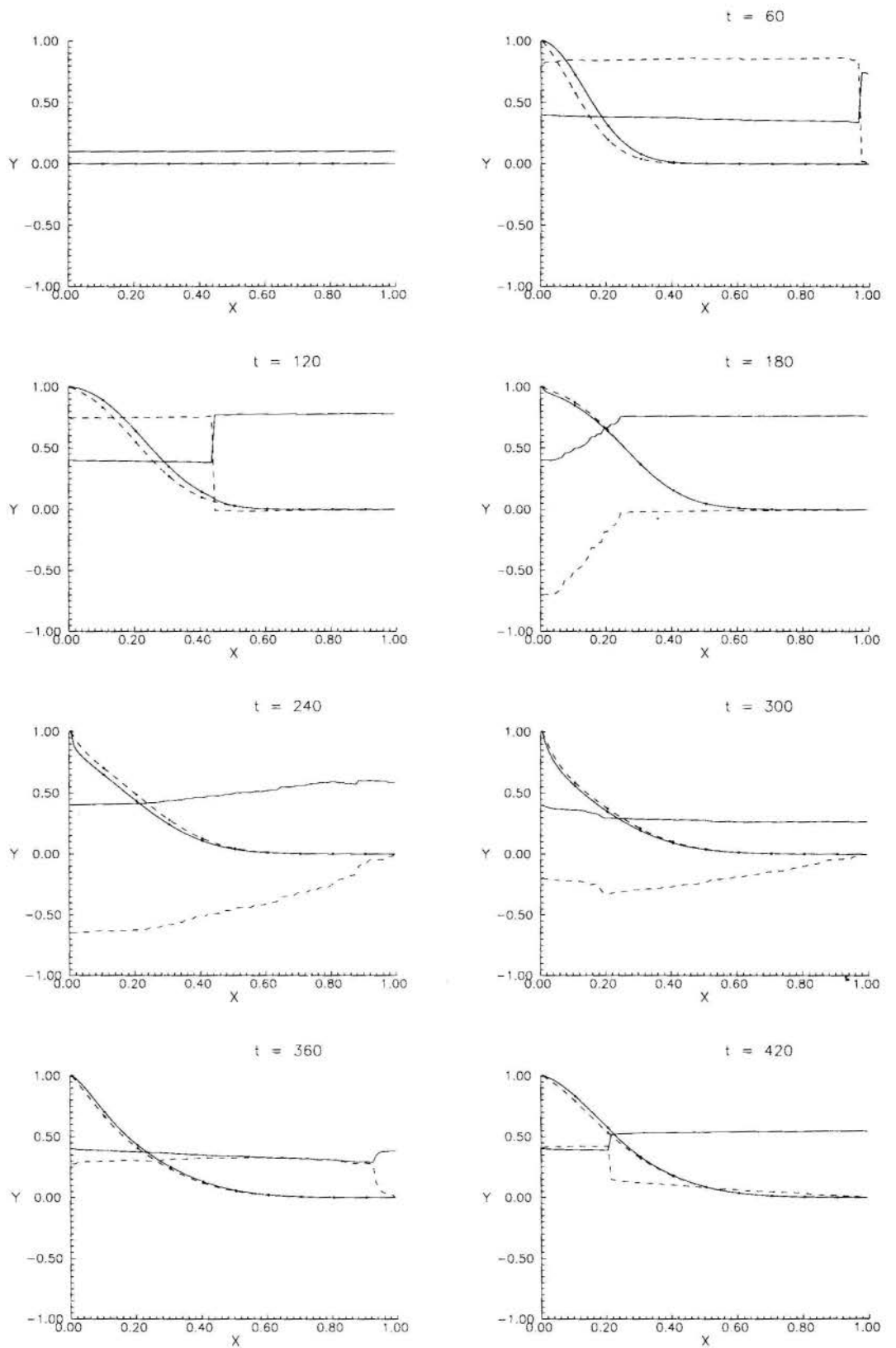


Figure 3 - Field Y (representing ψ , u , θ_F and θ_S) vs. position - for $\gamma = 10^{-3}$



CARACTERIZAÇÃO HIDRODINÂMICA DE MEIOS POROSOS ENVOLVENDO A UTILIZAÇÃO DE UM PROGRAMA SIMULADOR DE UM TENSÍOMETRO.

Marinho B. Quadri

Laboratório de Sistemas Porosos - Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Santa Catarina
Cx P. 476 - CEP 88040-900- Florianópolis - BRASIL



RESUMO

Apresenta-se um modelo físico-matemático para o funcionamento de um tensiômetro provido de um manômetro de mercúrio. O problema matemático é resolvido com o emprego do método dos volumes finitos aplicado ao caso de escoamento monodirecional radial. O modelo proposto se revela apto a representar vários aspectos do fenômeno natural. O programa simulador desenvolvido mostra-se potencialmente útil ao estudo e à caracterização de meios porosos submetidos a processos de escoamento em regime de insaturação.

INTRODUÇÃO

O tensiômetro constitui-se num instrumento clássico utilizado na medição do estado de energia da água presente no seio de um material poroso. Ele é composto de uma cápsula porosa (barreira capilar), geralmente de cerâmica, a qual é conectada à uma das extremidades de um tubo cheio de água. Na outra extremidade é fixado o manômetro. Um esquema é mostrado na Figura 1. Uma vez colocada em contato com o material, a água presente na cápsula, inicialmente à pressão atmosférica, passa a interagir com a água do material a qual se encontra sob tensão. Durante a evolução do sistema para o estado de equilíbrio, uma certa quantidade de água é drenada do tensiômetro para o meio, o que provoca a queda de pressão da água que se encontra herméticamente confinada no interior do tubo. Essa queda de pressão é indicada pelo manômetro.

Desta maneira, é possível avaliar o estado de energia da água presente no meio poroso (potencial matricial), e mesmo seguir sua evolução no caso de escoamentos transientes em regime de insaturação. É necessário entretanto atentar para o fato de que a monitoração de um fenômeno transiente pode ser consideravelmente amortecida pelas perdas de carga através da parede porosa da cápsula e pela inércia do transdutor de pressão empregado.

No que se refere à sensibilidade do transdutor, deve-se procurar limitar o volume de água deslocada do reservatório do tensiômetro. Nesse sentido, um transdutor de membrana deformável pode reduzir ao mínimo o tempo de resposta do dispositivo tensiométrico. Já em relação à resistência hidráulica imposta pela parede porosa, há que se considerar o limite de queda de pressão sem que ocorra a desaturação, com entrada de ar no reservatório de água, e conseqüente nivelamento das pressões ao valor atmosférico. De fato, a maior limitação do tensiômetro reside na impossibilidade de se ir além da ordem de 0,8 a 1,0 bar de queda de pressão, sem que se produza o colapso do sistema.

Tendo um tensiômetro, munido de um manômetro de mercúrio, como objeto de estudo, procurar-se-á demonstrar como a sua modelagem matemática pode auxiliar na compreensão dos mecanismos de transporte bem como na caracterização hidrodinâmica de meios porosos. Em particular, o programa simulador desenvolvido apresenta-se como uma ferramenta importante, permitindo um acompanhamento visual e

global das simulações, exibindo a distribuição transiente de umidade e pressão no domínio de solução e facilitando, entre outras coisas, a análise paramétrica do problema.

O MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO

Como modelo para a representação do escoamento da água no material poroso, adota-se a equação de Richards (1931) para a direção radial, negligenciando-se a parcela convectiva de natureza gravitacional. Tem-se:

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial r} \right] \quad (1)$$

onde t é a variável temporal (s); r , a variável espacial (m); ψ , o potencial matricial (m); K , a condutividade hidráulica (m/s); e C , a capacidade capilar (m^{-1}), dada por $C(\psi) = \partial \theta / \partial \psi$, sendo θ , o conteúdo volumétrico de umidade (m^3/m^3). Essa equação é submetida às seguintes condições:

- condições iniciais

$$t = 0 : \begin{cases} \psi = \psi_0 & ; \quad r > r_1 \\ \psi = \psi_1 & ; \quad r = r_1 \end{cases} \quad (2)$$

onde os índices 0 e 1 representam a condição inicial no meio e a parede externa da cápsula, respectivamente.

- condições de contorno

(a) fluxo nulo de água na fronteira externa (por exemplo, na parede impermeável do recipiente que contém a amostra);

$$t > 0 : \left. \frac{\partial \psi}{\partial r} \right|_{r=r_\infty} = 0 \quad (3)$$

com r_∞ correspondendo ao raio externo.

(b) na unidade de tempo, o volume de água deslocado do interior do manômetro é igual ao volume de água que aflora à

superfície da cápsula passando para a amostra. Como a cápsula é considerada saturada, não existe acumulação de líquido em seu interior,

$$t > 0 : A_c K(\psi) \frac{\partial \psi_1}{\partial r} \Big|_{r=r_1} = \frac{A_{\phi m}}{2} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (4)$$

com A_c , a área externa da cápsula; $A_{\phi m}$, a área transversal do tubo do manômetro; e h , a altura de coluna d'água correspondente à queda de pressão no tensiômetro.

Um esquema do modelo físico adotado é apresentado na Figura 1.

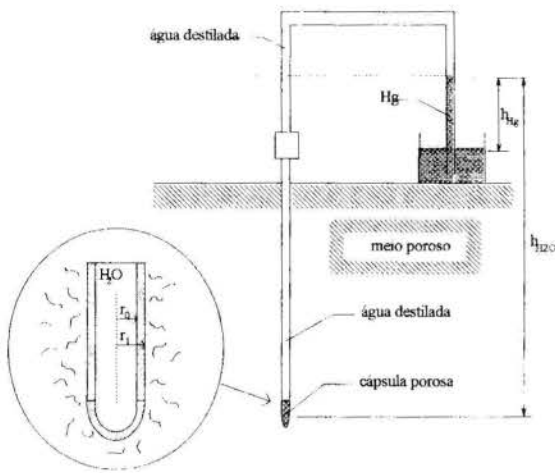


Figura 1 - Esquema de um dispositivo tensiométrico munido de um manômetro de mercúrio, mostrando em detalhe a cápsula porosa.

Salienta-se que a formulação aqui adotada, em termos de um potencial de pressão, diferentemente de um potencial de umidade como em Quadri (1988), confere ao modelo um caráter mais geral, pois contrariamente a θ , ψ é sempre contínuo no meio, permitindo o estudo de meios extratificados e a consideração de regiões submetidas a pressões positivas.

RESOLUÇÃO DO PROBLEMA

O problema matemático representado pela Eq. (1) sujeita às condições dadas pelas Eqs. (2), (3) e (4) é tratado segundo o método dos volumes finitos, utilizando uma formulação totalmente implícita. A validade das soluções obtidas é subordinada a critérios de fechamento de balanço de massa, de estabilidade e de medidas experimentais (Quadri, 1988).

Para resolver o problema, é necessário conhecer as relações $C(\psi)$ e $K(\psi)$, coeficientes esses que conferem o caráter não linear à Eq. (1). Para se determinar $C(\psi)$, deve-se dispor da chamada curva de retenção de umidade ($\psi \times \theta$). Não foi possível encontrar uma expressão analítica [e.g. tipo van Genuchten (1980)] adequada à representação dessa curva experimental ao nível de precisão desejada. Assim, opta-se por trabalhar com valores tabelados obtidos a partir dos próprios dados experimentais, efetuando-se interpolações sempre que

necessário. A Figura 2 mostra o aspecto da curva de retenção para um processo de infiltração primária.

No que se refere à condutividade hidráulica, $K(\psi)$, utiliza-se a expressão de Brooks e Corey (1964):

$$K = K_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\phi - \theta_r} \right)^\beta \quad (5)$$

onde K_s , condutividade hidráulica de saturação do meio, ($= 7.4 \text{ E-}03 \text{ cm/s}$, é um valor experimental); e ajustam-se ϕ , a porosidade do meio, ($= 0.395$); θ_r , teor de umidade de referência, ($= 0$); e β , um parâmetro, ($= 5.8492$). A Figura 3 ilustra o comportamento de K em função de θ , sendo que a passagem de $K(\psi)$ a $K(\theta)$ é efetuada através da relação $\psi \times \theta$ (curva de retenção).

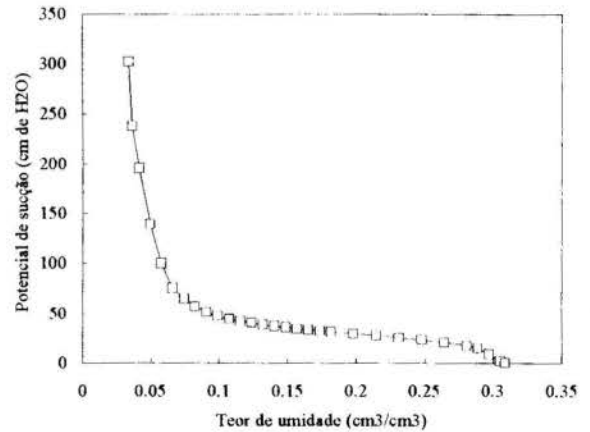


Figura 2 - Curva de retenção de umidade.

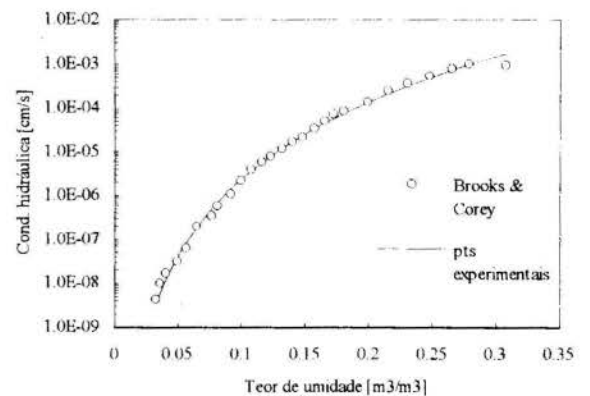


Figura 3 - Condutividade hidráulica do meio poroso.

No código numérico, os valores da condutividade hidráulica, que devem ser estimados nas paredes dos volumes de controle, são calculados segundo uma ponderação *backward*. A boa qualidade das soluções obtidas parecem indicar a validade do procedimento.

O meio poroso utilizado é o mesmo de Quadri (1988), constituído de 95% de areia de duna e 5% de caulim em peso. As propriedades fenológicas do meio, cápsula porosa, características geométricas do tensiômetro e das amostras, bem como as técnicas experimentais envolvidas, podem ser encontradas no referido trabalho.

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

A resolução do modelo matemático através da utilização da técnica dos volumes finitos eliminou os problemas de instabilidade e precisão apontados em Quadri, Philippi e Bolzan (1988), quando da resolução de um modelo similar (com formulação em termos de teor de umidade, θ).

Ao serem graficados em escala monologarítmica, os resultados da dinâmica de resposta do tensiômetro (Figuras 4, 5 e 6) se apresentam segundo sigmóides. Experimentalmente, este comportamento é mais notório aos baixos teores de umidade (Figura 6). No que se refere ao tempo necessário para que seja atingida a condição de equilíbrio, encontram-se tempos progressivamente maiores à medida que diminui o teor de umidade inicial da amostra. O modelo revela duas fases distintas no processo de medição:

- **Fase cinética:** molhamento da região próxima à cápsula, correspondendo à etapa acelerada da dinâmica de resposta;
- **Fase assintótica:** secagem da região anteriormente umidificada, segundo uma dinâmica assintótica.

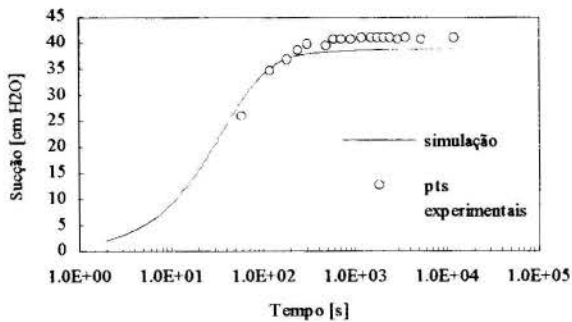


Figura 4 - Resposta do tensiômetro para alto teor de umidade inicial da amostra ($\theta_i = 0.133 \text{ m}^3/\text{m}^3$).

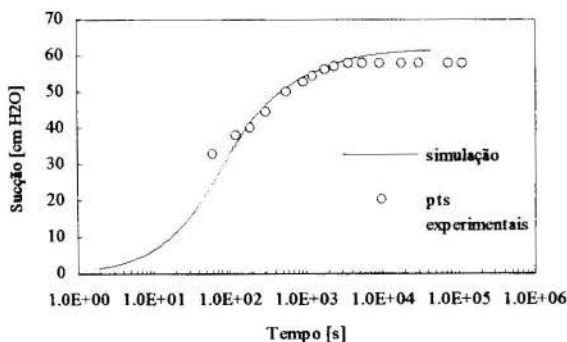


Figura 5 - Resposta do tensiômetro para médio teor de umidade ($\theta_i = 0.078 \text{ m}^3/\text{m}^3$).

A evolução do teor de umidade nas proximidades da cápsula pode ser apreciada através da Figura 7, para as diferentes simulações consideradas. Fica evidente o molhamento com posterior secagem do meio junto à cápsula. Tal fato nos remete ao fenômeno de histerese (não considerado pelo modelo) normalmente apresentado pelos meios porosos quando submetidos a processos sucessivos de embebição e drenagem. Isto implica na não unicidade da relação ($\psi \times \theta$) com consequências diretas nos cálculos do coeficiente $C(\psi)$ presente

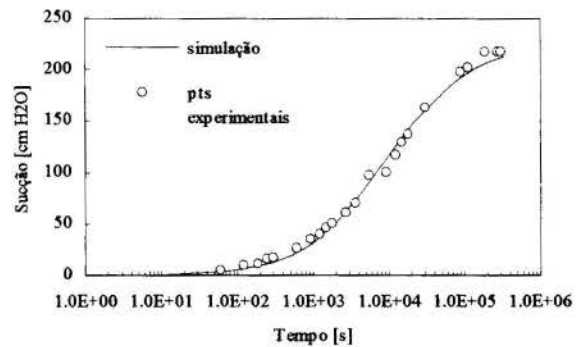


Figura 6 - Resposta do tensiômetro para baixo teor de umidade ($\theta_i = 0.038 \text{ m}^3/\text{m}^3$).

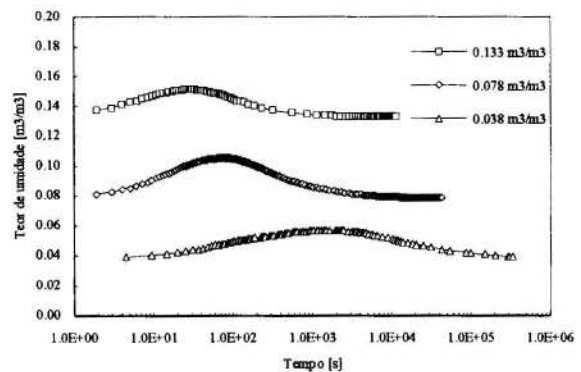


Figura 7 - Simulação da evolução do teor de umidade junto da parede da cápsula para diferentes umidades iniciais do meio poroso.

na Eq. (1) e nas passagens $K(\psi) \leftrightarrow K(\theta)$ e $\psi \leftrightarrow \theta$. Observa-se que a histerese passaria a se manifestar na fase assintótica do processo, a partir dos máximos das curvas mostradas na Figura 7. Pode-se demonstrar que esses máximos coincidem com os pontos de inflexão das curvas de resposta nas Figuras 4, 5 e 6. Deve-se portanto examinar a necessidade de incluir a histerese no modelo a fim de que se possa avaliar o seu impacto sobre outros parâmetros de ajustagem nas simulações.

Outro aspecto importante a considerar, é a forte influência da resistência hidráulica da cápsula (K_c) sobre a fase cinética. Através de uma análise de sensibilidade de parâmetros, comprovou-se a grande diversidade de valores para a condutividade hidráulica das cápsulas utilizadas nos ensaios experimentais, conforme assinalado em Quadri (1988). Desse modo, valores entre $3.0 \text{ E-}08$ e $5.0 \text{ E-}10 \text{ m/s}$ para K_c foram

utilizados nas simulações a fim de reproduzir os comportamentos observados experimentalmente.

Da confrontação entre resultados experimentais e simulação, constata-se um bom desempenho do modelo-simulador, tanto na forma da resposta quanto na proximidade aos pontos experimentais. Adicionalmente, a ausência de instabilidades e a exatidão obtida no fechamento dos balanços de massa (erros menores que 0.1%) durante a obtenção das soluções numéricas são pontos favoráveis à validação do modelo.

CONCLUSÕES

O modelo-simulador proposto se revela apto a representar vários aspectos do fenômeno natural, haja vista a sintonia dos resultados de simulação com os experimentais e de sua conformidade com a noção física que possuímos dos processos de migração de umidade em meios porosos.

O modelo indica a necessidade de inclusão do fenômeno de histerese, principalmente para que se possa examinar seu impacto sobre a definição da fase assintótica do processo de medição.

Apesar de negligenciar a histerese, os resultados de simulação obtidos demonstram a pertinência das demais hipóteses de trabalho adotadas e particularmente da caracterização, efetuada experimentalmente, Quadri (1988), das propriedades hidrodinâmicas do meio poroso.

Comprova-se que, tanto no aspecto experimental como no teórico, a resistência hidráulica da cápsula porosa é determinante para a definição da fase cinética do processo.

Por fim, o modelo-simulador se apresenta potencialmente útil para a determinação e/ou confirmação das propriedades hidrodinâmicas do meio. Através de um procedimento inverso, buscar-se-ia uma quantificação dessas propriedades através da análise das resposta do tensiômetro partindo-se de diferentes condições iniciais de teor de umidade das amostras.

REFERÊNCIAS

Brooks, R.H.; Corey, A.T., 1964, "Hydraulic properties of porous media", Hydrol., Paper nº 3, Colorado State Univ., Fort-Collins.

Miller, E.E.; Elrick, D.R., 1958, "Dynamic determination of capillary conductivity extended for non-negligible membrane impedance. Soil Sci. Soc. Am. Proc., Vol. 22, pp. 483-486.

Patankar, S.V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow". Hemisphere Publishing Corporation. New York.

Quadri, M.B., 1988, "Dinâmica de Resposta de Tensiômetros: Desenvolvimento Experimental e Modelação Numérica", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina.

Quadri, M.B.; Philippi, P.C., 1988, "Determinação experimental dos parâmetros fenomenológicos, relacionados com o funcionamento de um tensiômetro em meios porosos insaturados", ENCIT 88, Águas de Lindóia, SP, Brasil, Anais pp 299-302.

Quadri, M.B.; Philippi, P.C.; Bolzan, A., 1988, "Transferência de umidade em meios porosos insaturados: a dinâmica de resposta de um tensiômetro", ENCIT 88, Águas de Lindóia, SP, Brasil, Anais pp 303-306.

Remson, I.; Hornberger, G.M.; Molz J.F., 1971, "Numerical methods in surface hydrology", John Wiley and Sons Inc. New York.

Richards, L.A., 1931, "Capillary conduction of fluids in porous mediums", Physics, 1: pp 318-333.

van Genuchten, M.T., 1980, "A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J., 56: pp 1042-1050.

ABSTRACT

The aim of this work is to show the utility of a simulator-model to description process of water transfer in unsaturated porous media during the transient response of a tensiometer. The transfer equations are solved numerically by finite volumes assuming an radial geometry. The model indicates two stages for the response: at first, a kinetic process and following a asymptotic behavior. In addition, the hysteresis phenomenon appears as a important aspect in this study. The results of laboratory and theoretical predictions show that the procedure provides a useful and promising means of determination of the hydrodynamic characteristics of the milieu.

ABCN

DISCRETE MULTIPHASE EQUILIBRIUM SIMULATION IN POROUS MEDIA

R.A. Pieritz & J.P. Laurent

LTHE - Lab. D'Etude des Transferts en Hydrologie et Environnement
UMR5564/CNRS - INPG - UJF
B.P. 53 - 38041 - Grenoble Cedex 09 - FRANCE



SUMMARY

Displacement simulations in realistic pore networks are presented for cases where capillarity controls fluid motion and spatial distributions. With discrete geometry tools, the real network is reduced to a flow path "skeleton". In equilibrium conditions, the skeleton inverse transform is then applied to determine the flow geometry. Complex displacement sequences, involving partial or total imbibition and drainage, can be simulated that way. The corresponding algorithm allows studying the irreducible wetting phase saturation or fractured media.

INTRODUCTION

The interpretation and modelling of multiphase flow and retention properties of porous media must take into account the complexity of the internal geometry of the microscopic channels. These fundamental properties are studied by considering the movement of menisci at the pore scale, and also, by an "entrapment" of the residual fluid phase (Adler, 1992) (Fernandes, 1994). Unsaturated flow in subsurface hydrology is a specific case of multiphase flow in porous media. It is the case when the porous space of a soil is filled by water and air, which are the two fluid phases the most usually present in the natural environment. Problems involving the dynamics of two or more immiscible fluids in porous media are well known in the oil industry (Spearing, 1991) (Hammecker, 1993) (Ferreol, 1995). In petroleum engineering, multiphase flows of water, gas, oil and liquid solutions are involved in secondary oil recovery operations.

Modern image analysis techniques allow to represent this real porous media network micro-structure by a phase function Z , in the 2-Dimensional case, by integer binary values (Rosenfeld, 1966) (Coster, 1989) (Pieritz, 1994). Derived discrete properties of this binary domain are formulated by the "Discrete Geometry" fundamentals, simplifying evaluation and characterisation methods (Chassery, 1991) (Thiel, 1991) (Pieritz, 1995).

The major purpose of this paper is to formulate a discrete geometric method to evaluate capillary displacements of multiphase flows in real networks by a compact topologic "skeleton" representation. This paper does not aim to provide an extensive review of the field, but rather to concentrate on a few concepts that are relevant to the topic and to summarise the proposed geometric method.

Some physical basics conventions are presented in the first section, to situate the problem domain. The subsequent section explains the fundamental "Background Distance Map" formulation, to reduce the binary network image to an "integer map" representation. The following section presents the basic "Median Axis" skeleton concept, to generate the mean

skeleton known as the "Median Line". In the next section, the capillary displacement simulation method is formulated, and some examples are shown. At last, limitations and conclusions are discussed.

CONVENTIONS

The term multiphase flow means that at least two immiscible fluids coexist and flow in the available pore space of a porous medium. This is to distinguish from flows of miscible fluids, which are dominated by mass diffusion and dispersion phenomena. Mixing between fresh and salt ground water and the movement of organic or chemical pollutants through the saturated zone of an aquifer are typical examples of such problems. Multiphase flows are dominated by the interfacial properties of the fluid-fluid and fluid-solid interfaces, such as surface tension, contact angle, wettability...

Capillary dominated displacements are controlled by stable, equilibrium configurations of fluid/fluid interfaces in a pore system. At any given capillary pressure, the menisci separating bulk fluid phases will all have the same mean curvature if the system is in a truly equilibrium state. Subject to the wettability constraint, fluid-fluid boundaries are represented by the envelope of the union of reconstructed circles cap segments with a radius greater than a common threshold. The threshold radius is related to the capillary pressure through the Laplace equation. Fluid advancement, in a quasi-static sense, is then governed by propagation of the envelope assemblages of circular caps through the pore network skeleton.

Fluid displacements are dependent from connectivity constraints if there is no mutual solubility between bulk fluid phases. Nonwetting fluid displacement can occur only along hydraulically connected pathways of the same phase. Otherwise, fluid motion does not take place. When connectivity is lost, residual phase remains.

DISCRETE DISTANCE IMAGE

Each point "r" of the real porous media space belongs either to the solid phase or to the pore space (i.e. the interstitial phase). A phase function can be introduced, namely

$$Z_k(r) = \begin{cases} 1 & \text{if } r \in \text{phase } k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

where k = Porous, Solid. The porous medium may be either finite, in which case it occupies a volume V, or infinite (V = R³).

The simplest global parameter characterising the medium is the porosity, which is the fraction of void space within the sample:

$$\epsilon = \frac{1}{V} \int_V Z_k(r) d^3r \quad (2)$$

In which d³r denotes a volume element in the 3D space.

In the following, it will often be assumed that the material is spatially periodic, i.e. that it can be partitioned into identical parallelepipedic unit cells. This can be applied only to materials that are statistically homogeneous; the size of the cell is implicitly assumed to be very large when compared to any characteristic length of the porous medium (Adler, 1992).

This representation of the medium which is continuous is generally replaced by a discrete one. The medium is considered as composed of elementary cubes (or squares in the 2-Dimensional case), each of identical sides a, which are either empty or filled with solid. Such a discretisation occurs naturally with image analysis or with the generation of reconstructed porous media (Coster, 1989).

To reduce these data for image manipulation, a "distance labelling" technique can be formulated, where each pixel is labelled using the smaller distance from it to the neighbour background, composed of complementary image objects. This procedure generates a "Background Distance Image" based in a distance mask called "Chamfer Mask". The chamfer mask is a structural element which relates a neighbours shape to integer labels. This labelling technique uses a sequential algorithm (Thiel, 1991), where the Euclidian distance is approximated by a discrete integer distance.

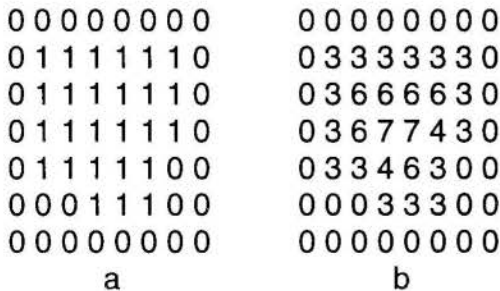


Figure 1 - Binary image (a) and its background distance image with d34 chamfer mask(b).

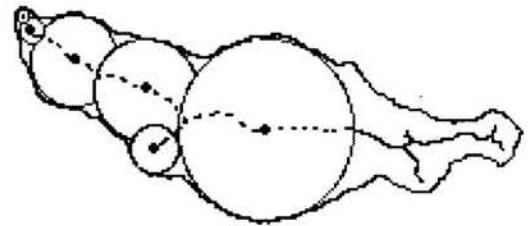
The most commonly used discrete distance is the chamfer

distance known as *d34*, where each neighbour from a given point, taken following the horizontal and vertical coordinated axis, are considered to be 3 measuring units distant from the starting point. The diagonal neighbours are 4 measuring units from that point. This mask give the numerical approximation of $\sqrt{2} = 1.6666...$ to the square root of 2 (1.4142...). In Figure 1, it is show an example of this approximation used for a binary grid. The main advantage of using this discrete distance is related to the lower computer storage and evaluation requirements (only integers are used to evaluate the distances image).

MEDIAN AXIS

The distances map may be conceived as a union of circles whose radii are equal to background distance related to the point where the circle is centred. This concept permit decompose the geometry in basic circles where a main geometric element can be constructed called "*Median Axis*" (Figure 2).

The median axis represents the centres of the local maximal circles included in the geometry, tangent to the object's edges (Chassery, 1992).



A point P belongs to the Median Axis (MA) if it is the centre of a maximal circle of radius R_p which is not contained in any other circle centred at another point Q, different from P:

$$P \in MA \Leftrightarrow \forall Q, B(P, R_p) \not\subset B(Q, R_q) \quad (3)$$

The Median Axis is, thus, obtained by extracting the local larger circles which are identified by using a sequential algorithm (Thiel, 1994). This is a reversible technique, useful to compress the data needed to represent a 2D image, since the entire image can be reconstituted by giving the position of the centres and the radius of these circles. In a 2D background discrete distance image these data are given by i and j point coordinates and the integer distance label ("radius value").

MEDIAN LINE SKELETON

Although the Median Axis is the only data needed to reconstitute the original discrete image (morphological information - black and white compress image process), it does not give any information related to the different objects' relations (topological information - connections between the different "objects" of the image).

The sequential step consists to connect the different

points of the Median Axis, usually disconnected. This generates a completely connected discrete topologic skeleton called "*Median Line*" (Figure 3 represents the median line associated to the binary image).

From each median axis element is performed a connection algorithm by "*Power Line*" research. Extraction of connecting points is made over the background distance image, by calculating the path which presents the minimum gradient between two any points in median axis (Pieritz, 1994). This connection step permit conserve the topological information with a compact image representation.

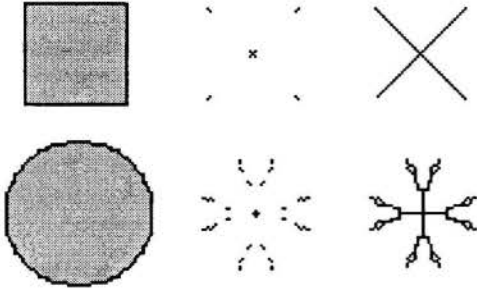


Figure 3 - The binary shape (left), the Median Axis (centre) and its Median Line (right) representation.

A recursive algorithm is used, needing only one run over the image matrix because for each point founded as a candidate to the median line (ML), it generates a connection line to identify the other median axis point. A "pile" conserve each new ML point coordinates, and the algorithm is performed until empty this pile.

CAPILLARY-DOMINATED DISPLACEMENTS

Given a network which has been reduced to a skeleton map of pore versus rock, the inscribed circles centres skeleton provide the framework for developing equilibrium saturation distributions.

The main flow requirement in the image borders are the "perpendicular" (or normal) flow path condition, representing constant angular component in the "control" data domain. A "skeleton normal flow condition" in the network input-output flow boundaries is obtained by a generation of a fictitious connected pore phase around the structure. An example of such skeleton and a normal input-output flow skeleton condition, for a two-dimensional model pore system (100x60 pixel), is shown in Figure 4. This information can be used to generate a phase map or given capillary pressure.

Phase maps can be produced by rendering a subset of the inscribed circles whose radii were determined in the previous step (Median Axis formulation). The union of circles with radii greater than or equal to a cutoff radius would represent a distribution of nonwetting phase during primary drainage if all pore space were accessible. One can compute such accessibility-independent phase distributions for the range of radii present in the inscribed skeleton. Such a rendering with a radius minor of a pixel would represent the entire porosity

image. Each cutoff radius would correspond to a different level of capillary pressure according to the Laplace equation.

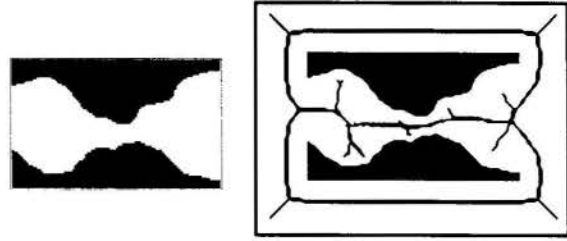


Figure 4 - Two dimensional porous network model (left) and its "normal flow condition" porous phase skeleton (right).

The nonwetting phase distribution is that subset of the reconstructed circle union mask which is connected to the face(s) where injection or production can take place. For the simple, 2-D example in Figure 4, the role of accessibility is rather obvious. Should nonwetting phase only be allowed to enter from the left, only a subset of the surface rendered can be filled (Figure 5). A program which runs a connectivity (Hoshen, 1976) check on each skeleton pixel identified as nonwetting phase and excludes those elements without a pathway. Reconstructed resulting phase distributions represent predicted equilibrium configurations found upon primary drainage.

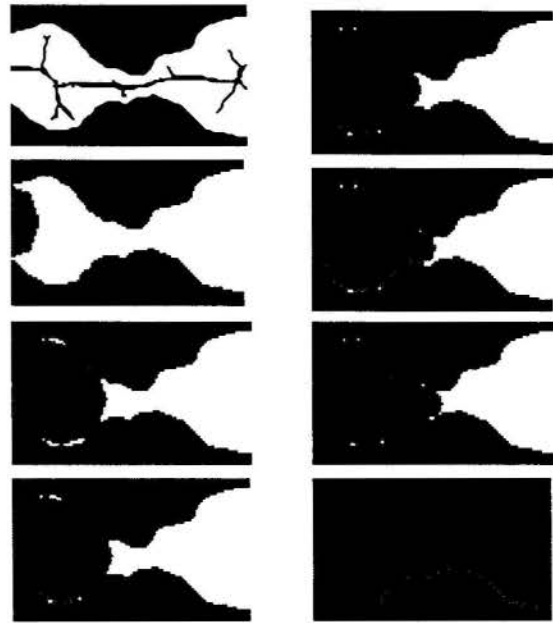


Figure 5 - Imbibition simulation in the simple 2-D model pore system of Figure 4, where nonwetting phase can only enter from the left. Nonwetting phase is grey, and wetting phase is white. Increase of capillary pressure in columns ($r_0 = 50$ to $r_n = 3$ - in d34 integer chamfer units).

In imbibition simulation (decreasing capillary pressure), when considering a new equilibrium state, all pore space available for the wetting phase represented in the skeleton map with the appropriate radius of curvature is accessible to the wetting phase. However, the nonwetting phase must have

a continuous nonwetting phase pathway to the exterior, or phase trapping, results. A new imbibition state is found by forming the union between nonwetting skeleton phase present which is immobile and that fraction of existing nonwetting skeleton phase which is already in the preferred accessibility independent configuration at the target capillary pressure. The nonwetting skeleton phase which can be stranded at each incremental decrease in capillary pressure is found by, identifying that fraction of existing nonwetting phase which is not in the appropriate primary drainage image, since the nonwetting phase image is connected to the sample exterior.

The phase distributions images as a function of entry radius are provided in Figure 5. Only the nonwetting phase are provided in grey colour. In this simulation, the nonwetting phase can only enter from the left. Invasion of the pore body at the open surface is allowed at a pore entry radius of $r_0 = 17$ pixels, but penetration is not allowed to proceed due to the presence of a pore throat. Decreasing, pore entry radius causes filling of pore roughness, as the method approximates the solid curvature locally with tangent circles of decreasing size. When the pore entry diameter equals the pore throat diameter, the downstream pore body is filled. This is the same point at which percolation is observed. At a pore entry radius is minor of a pixel, all pore space is occupied by nonwetting phase. Upon decreasing capillary pressure (Figure 6), the saturation pathway is retraced until the equivalent pore entry radius increases beyond to the original enter value of pixels (flow output only in right side in equivalent d34 chamfers units). At this point, phase disconnection is favoured over pore emptying, and stranding, occurs in the leftmost pore body.

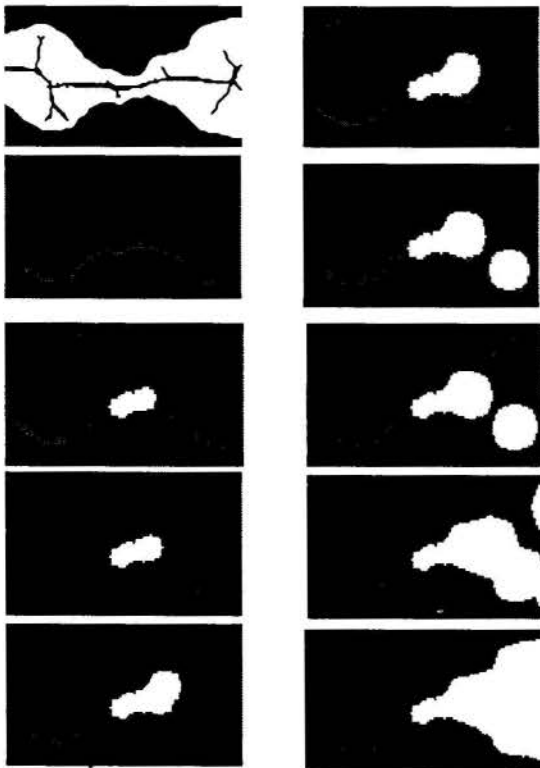


Figure 6 - Drainage simulation in the simple 2-D model pore system of Figure 4, where nonwetting phase can only exit from the right. Nonwetting phase is grey, and wetting phase is white. Decrease of capillary pressure in columns ($r_0 = 15$ to $r_n = 50$ - in d34 integer chamfer units).

This type of stranding is analogous to the so-called ink-bottle effect (Dullien, 1991) except that pores need not have only a simple entrance or exit to be susceptible to phase trapping, in contrast, the contents of the pore connected to the exterior is allowed to extrude completely.

In real 2D binary images sections of pore networks the discrete skeleton procedure performs the invasion and drainage curves showing the hysteresis phenomena. In Figure 7, a 2D micrographical binary section of a Autoclaved Aerated Concrete - AAC (Laurent and Frendo-Rosso, 1992) - was shown, with its porous phase topologic median line skeleton representation (performed with the d34 chamfer mask - Figure 8).

This material have two distinguish classes: a microporous structure in the solid matrix and a macroporous cellular structure (air bubbles) industrially created. The data represents an image of polished section impregnated by a black dye epoxy resine, with a rate of macroporosity $\epsilon_c = 59\%$, in an image of 256x256 pixel (17 x 17 mm section, macroporous in white).

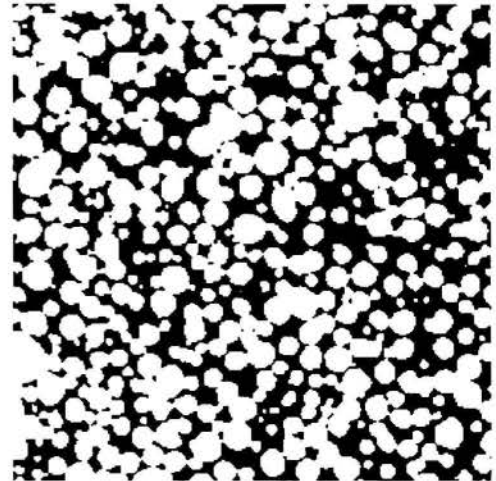


Figure 7 - Binary digital image of an Autoclaved Aerated Concrete - AAC (256 x 256 pixel).

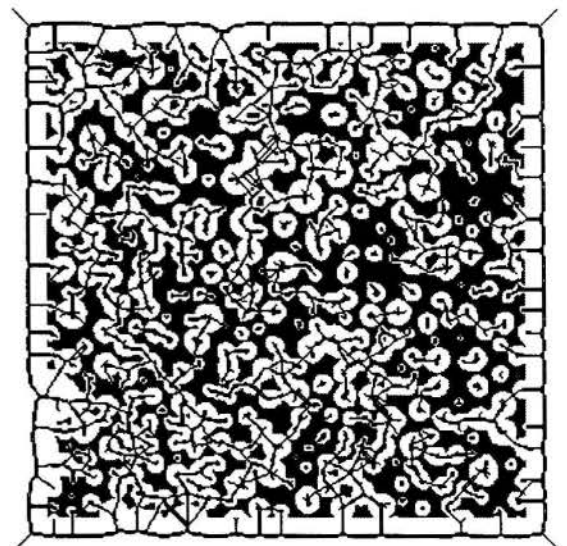


Figure 8 - The macroporous phase median line skeleton for the AAC binary image of Figure 7 (chamfer d34 - "normal flow skeleton" condition).

The invasion and drainage curves to the macroporosity from the AAC image (Figure 7) are shown in the graph of Figure 9, related to an equivalent cylindrical model (by the Laplace equation) with the mercury nonwetting phase ($\theta = 141^\circ$ and $\sigma = 0,485\text{N/m}$ - Metz, 1992). The final flow phase patch is presented in Figure 10 (grey), representing the "percolation" resulting grid. The invasion and drainage are performed from all borders.

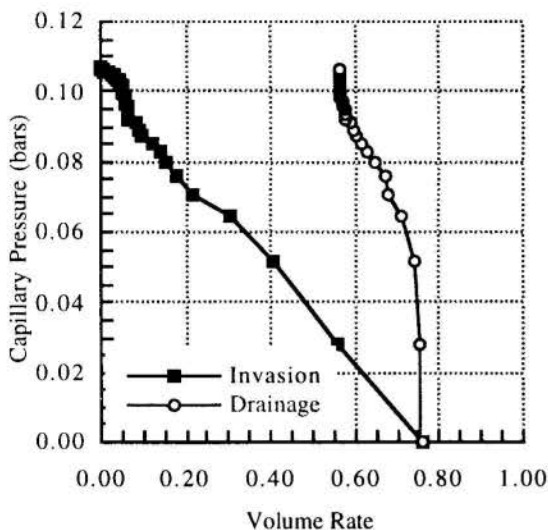


Figure 9 - The invasion and drainage curves (performed with the chamfer mask d34) for the AAC image (Figure 7 - $\epsilon_c = 59\%$).

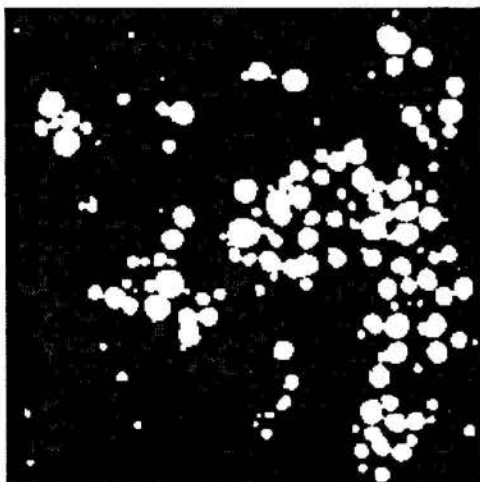


Figure 10 - The flow grid after saturation (from all borders) for the image of Figure 7 (cutoff radii = 1 pixel)

From the real 2D binary section (Figure 7), an artificial fissured network is generated with linear segments, where the resulting binary porous network is shown in Figure 11 (macroporosity $\epsilon_c = 65\%$). The observed resulting entrapped flow patch (in grey - Figure 12) after return from the saturation to the initial invasion capillary pressure was observed, showing the importance of the fissured grid in the flow displacements after saturation conditions.

The resulting invasion and drainage curves for the porous network of the Figure 11 (performed with the chamfer mask d34) related to a mercury nonwetting phase are shown in Figure 13, where the hysteresis phenomena is observed. Introducing fissures in the flow grid, the 2D section is changed

to a complete percolation grid.

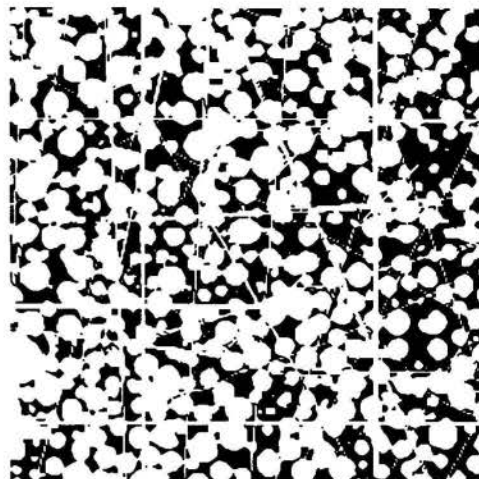


Figure 11 - AAC artificial fissured binary image (256 x 256 pixel - $\epsilon_c = 65\%$)

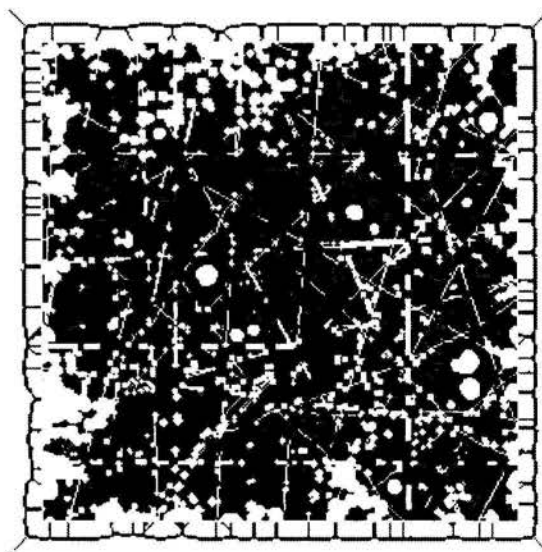


Figure 12 - Irreducible flow phase after saturation/drainage from all borders (grey colour) for the Figure 11.

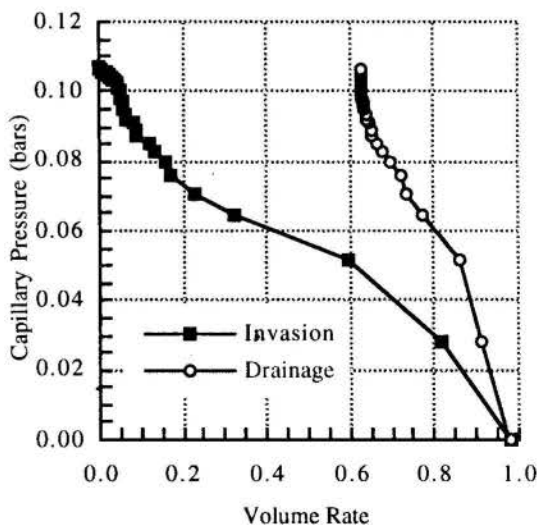


Figure 13 - Resulting invasion and drainage curves for the AAC artificial fissured image (Figure 11 - $\epsilon_c = 65\%$), performed with the chamfer mask d34.

DISCUSSION

The simulations performed over the AAC section present the main problem of 2D models to evaluate real medium properties. In the first example (Figure 7), the porous phase is a non-complete percolation data because it do not conserve the real 3D spatial connections of the macroporous. The resulting invasion-drainage graph show this limitation where the image saturation pressure (cutoff = 1 pixel) do not completely fill the porous surface.

In the second case, the artificial fissured network relates the percolation threshold with the fissured's radii, given only a quality data. Otherwise, these simulations relating the main geometrical properties with physical steady state two-phase flow models, allowing complex geometric systems simulations.

CONCLUSIONS

A 2D network model has been developed where a compact discrete skeleton is able to simulate capillary-dominated displacements, which result from increases or decreases in capillary pressure. Equilibrium fluid distributions can be derived on complex network geometries, such as those obtained from micro-imaging techniques on physical cracked specimens. The initial observations concerning fluid properties on artificial 2D fissured images have strong implications for modelling steady state two-phase flow regimes. The reduced skeleton network model algorithm can handle mixed wettability scenarios and gives reasonable results for capillary processes. Transport properties can be estimated using predicted equilibrium fluid distributions, only handling integer indices with lower computer storage requirements.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors are grateful to Edouard THIEL and Jean-Marc CHASSERY (IMAG-UJF-France) for providing the IPS interface (Image Package System - Development Environment). The fluid motion visualisation software was made with the COI-XModel library, graciously provided by Clovis Raimundo MALISKA Junior (ESSS Co. - Brazil). Financial support from CNPq (Brazil), CEFI/SFERE (France) and INSU/PRH (France) research project.

REFERENCES

- Adler, P.; 1992, "Porous Media". *Butterworth-Heinemann, Series in Chemical Engineering*.
- Fernandes, C.P.; 1994, "Caracterização Morfo-Topológica de Espaços Porosos: Reconstituição Multi-Escala e Simulação de Processos de Invasão de Fluidos não-molhantes".- *Phd. Thesis - LMPT - Universidade Federal de Santa Catarina - Brazil*.
- Ferreol, B.; Rothman, D.H.; 1995, "Lattice-Boltzmann Simulations of Flow Through Fontainebleau Sandstone", *Kluwer Academic Publishers -Transport in Porous Media* 20: pp 3-20.
- Hammecker, C.; et all, 1993, "A Geometrical Model for

Numerical Simulation of Capillary Imbibition in Sedimentary Rocks", *Kluwer Academic Publishers -Transport in Porous Media* 12: pp. 125-141.

Rosenfeld, A., 1966, "Sequential Operations in Digital Picture Processing". *Journal of ACM*, 13(4).

Coster, M. & Chermant, J. L., 1989, "Precis D'Analyse D'Images". *Presses du CNRS*.

Chassery, J.M.; Montanvert, A., 1991, "Géométrie discrète en analyse d'images". *Ed. HERMES - Paris - France*.

Thiel, E.; 1991, "Amélioration des distances du chanfrein, Construction de la ligne Médiane et décomposition de formes". *Mémoire de DEA en Mathématiques Appliquées, INPG - Grenoble - France*.

Pieritz, R.A.; 1994, "Desenvolvimento das técnicas do Gráfico da Linha Mediana e da Binarização por Regiões Conexas aplicadas a Caracterização Geométrica de Meios Porosos". *M. Sc. Thesis - LMPT Universidade Federal de Santa Catarina - Brazil*.

Thiel, E.; 1994, "Les Distances de chanfrein en analyse d'images: Fondaments et Applications". *Phd. Thesis - IMAG - INPG - Grenoble - France*.

Pieritz, R.A.; Philippi, P.C.; 1995, "The Generalised Median Line Graphics Technique in porous media geometry characterisation", *Proceedings of QCVA95 - International Conference on Quality Control by Artificial Vision*, pp. 110-118.

Hoshen, J.; Kopelman, R.; 1976, "Percolation and Cluster distribution. I. Cluster multiple labelling technique and critical concentration algorithm". *Physical Review B*, Vol. 14, No. 8.

Spearing, M.; Matthews, G.P.; 1991, "Modelling Characteristic Properties of Sandstones", *Kluwer Academic Publishers -Transport in Porous Media* 6: pp.71-90.

Dullien, F.A.L.; 1991, "Characterization of Porous Media - Pore Level", *Kluwer Academic Publishers -Transport in Porous Media* 6: 581-606

Laurent, J.P; Frendo-Rosso, C.; 1992, "Application of image analysis to the estimation of AAC Thermal conductivity", *Wittmann. Proceedings of the 3RD Rilem International Symposium on AAC*, pp 65-69.

Metz, F.; Knöfel, D.; 1992, "Systematic mercury porosimetry investigations on sandstones", *Materials and Structures*, Vol.25, pp 127-136.



THERMO-HYDRAULIC CHARACTERIZATION OF COLD PLATES USING MECHANICALLY COMPRESSED PERMEABLE LAYERS

José L. Lage
J. L. Embrey Associate Professor

Bogdan V. Antohe
Graduate Student

Mechanical Engineering Department
Southern Methodist University
Dallas, TX 75275-0337 - USA



SUMMARY

The fundamental characteristics of a new cooling concept for the thermal management of high frequency microwave systems is presented. The primary goal is to minimize temperature differences between electronic modules. The cold plate design consists of inserting an aluminum alloy porous matrix inside the cold plate. The matrix presents: low density, intrinsic mechanical strength, high thermal conductivity and good material compatibility for brazing, and it is manufactured with low densities and different void sizes. High density matrices, obtained by mechanical compression, are advantageous for brazing. Hydraulic parameters of these compressed matrices were obtained experimentally and used as input for numerical simulations. Our results support the expectations that these porous cold plates can exhibit exceptional thermal performances.

BACKGROUND

The development of advanced high frequency microwave systems faces very challenging cooling restrictions in terms of flow rate and temperature of the delivered coolant. Precise control of the phase of each signal from each microwave module is critical to achieve the required overall performance.

From a system operational view, it is highly desired that the electrical performance of identical components in each module have identical electrical characteristics. This can be accomplished by having the operating temperatures of identical parts the same. Therefore, minimizing temperature gradients between identical components in each housing module is a fundamental requirement. To provide reliable operation, it is necessary to have the operating temperatures as low as possible, within certain bounds. This is achieved by improving the heat transfer coefficient of the cold plate aperture, thereby reducing the temperature rise between fluid and cold plate mounting surface. This reduction lowers the device junction temperature and significantly improves the array reliability.

A conventional microwave aperture uses cold plates with modules mounted as shown in Fig. 1. When the coolant circulates through the cold plate internal passageways, module waste heat is transferred to the flowing coolant and transported away from the array. A series-flow arrangement (Fig. 1 - left) results in a large temperature difference between identical components in successive modules since the temperature of the cooling fluid increases along its travel path. Also shown in Fig. 1 is a typical resulting temperature gradient, which is undesirable. An existing solution to this problem requires sophisticated, computerized calibration techniques to compensate for the differences in electrical characteristics of each component caused by each module operating at a different temperature.

A parallel-flow arrangement, if attainable, would cool each module in parallel along with all other modules in the array. This results in a uniform temperature between modules and optimum array electrical performance. For most high frequency microwave arrays, however, the scale of the array is small and prior attempts to utilize parallel-flow cold plates have been unsuccessful because the changes in flow direction required by the small scale and the lack of adequate plenum space result in poorly distributed coolant flow. This poorly distributed flow causes excessive temperature differences between modules, the very problem that the parallel-flow concept was intended to solve.

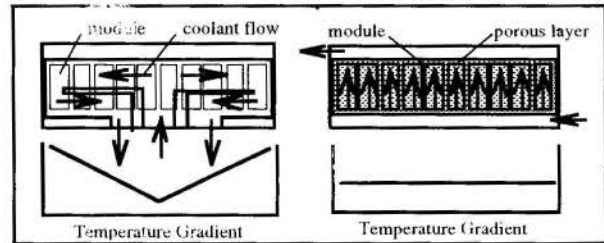


Figure 1- Cold plate designs: existing (left) and proposed (right)

To obtain a parallel-flow arrangement with a flow uniformity not obtained previously, a new approach to the design of a cold plate is necessary. The new cold plate design, considered in the present effort, consists of inserting a porous metallic layer inside the cold plate aperture (Fig. 1 - right). By placing a porous layer within the cold plate, the pressure drop from inlet to outlet plena is equalized, resulting in a parallel-flow, thereby maintaining the temperature of components located at a particular level (i.e., at the same vertical distance between inlet and outlet plena) substantially the same. In this way, by having identical circuitry from module to module at the same level, the electrical characteristics of these circuits will be the same.

We mention in passing that a microporous cold plate is related to heat exchangers designed with mesh and brush inserts (Bergles, 1985), modern microchannel heat exchanger (Walpole and Missaggia, 1993) and microsintered heat exchangers (Lindemuth et al., 1994). All these devices attempt to improve the weak heat transfer at the fluid side of solid-fluid heat exchangers by increasing the solid-fluid interface area (fin effect) and/or by inducing fluid mixing (turbulence and dispersion effects). Previous studies with metal wool filled copper tubes (Kuzay et al., 1991), flat-plate rectangular microchannels (Peng et al., 1995), and sintered heat sink (Lindemuth et al., 1994) support our expectations that a microporous cold plate can exhibit exceptional thermal performance.

The main advantages of the microporous design, as compared with metal wool filling, microchannels, and microsintering techniques, are: (1) much broader physical characterization (e.g., porosity range from 30 to 90%), (2) precise specification (good repeatability), (3) structural rigidity, and (4) superior manufacturing characteristics (brazing).

The material considered for the microporous insert, aluminum alloy 6101-O porous matrix, has been carefully chosen. It

has low density, intrinsic mechanical strength for structural rigidity, and good material compatibility for brazing the porous layer with the heat sink surfaces. In addition, the thermal conductivity of this porous material is much higher than that of the coolants used in electronics. Therefore, the effective thermal conductivity of the saturated porous region is higher than the thermal conductivity of the clear (of porous matrix) region.

The pressure drop across the porous layer, for a given flow rate and fluid dynamic viscosity, depends on the structure of the medium characterized by its porosity, permeability and inertia (or Forchheimer) coefficient. These properties of the metallic microporous layers have to be obtained experimentally as predictive models for this type of porous layers do not exist.

In what follows, we report results of numerical simulations of microporous cold plates using hydraulic parameters of porous aluminum layers obtained experimentally.

EXPERIMENTAL SETUP

An experimental setup is designed and built to obtain accurate determination of the flow (Darcy velocity) and pressure drop across a porous layer bonded to a metallic block (Fig. 2). Permeability and inertia coefficient of these layers are obtained as detailed in Antohe et al. (1996). The dimensions of the porous layers are chosen to conform with the heat sink design for phased array radars being considered by Texas Instruments.

All aluminum blocks have inlet and outlet plena connected by a 76.2 mm long (L), 50.8 mm wide (W), and 1.0 mm thick (H) test channel. A porous layer is placed in and bonded with a thin layer of Sheldahl T1401 adhesive to the internal surfaces of the test channel. The bonding is carefully done to minimize possible adhesive intrusion through the pores of the layers.

Nine porous layers were chosen, based upon brazing surface and structural integrity, for building a microporous cold plate. Each porous layer is obtained by compressing a 1570 pores per meter aluminum 6101-O alloy matrix in the direction perpendicular to the flow direction (along H , Fig. 2). The volumetric porosity of the compressed layer is uniform. The compression of the matrix is very advantageous as it enlarges the contact (interface) area between the porous layer and the solid surfaces of the heat sink. This in turn facilitates the brazing process and, in consequence, improves the heat transfer across the interface and the structural rigidity of the heat sink. The compression ratio, $r = H_i/H$ (where H_i is the initial matrix thickness and H is the final matrix thickness), varies from four to fourteen. All samples are compressed to a final thickness of 1 mm (H). The initial (uncompressed) porosity ϕ_i varies from 90 to 98%.

The air flow apparatus (Fig. 3) includes a pressure regulator to adjust the maximum inlet air pressure (the inlet air line is linked to an external tank holding compressed air at 1.0 MPa). The air flow rate ranges from 1.7×10^{-6} to 7.2×10^{-5} m³/s corresponding to an air velocity range of 0.033 to 1.436 m/s. Both rotameters used (OMEGA FL111 and FL112) are calibrated to two percent of the reading value. The repeatability of both instruments is of half percent of reading value.

The differential pressure is measured between the inlet and outlet ports of the block. A 300 Pa gauge micromanometer manufactured by Combustion Instruments Ltd. (0.1 Pa accurate) is utilized to measure very small pressure drop. For moderate pressure drop regime a 0.5 kPa gauge inclined portable manometer, manufactured by Dwyer Inc., is used. The uncertainty of the instrument is 2.5 Pa. A 78.5 kPa, accurate to 10 Pa, and a 46.5 kPa, accurate to 30 Pa, U-shaped manometers are used to measure the pressure drop at higher range. The uncertainty of these manometers is one millimeter water column and one millimeter mercury column, respectively. It is important to point out that the pressure range used in the air test is small enough to neglect any compressibility effect. Therefore, the density dependence on pressure, that can be approximately modeled by

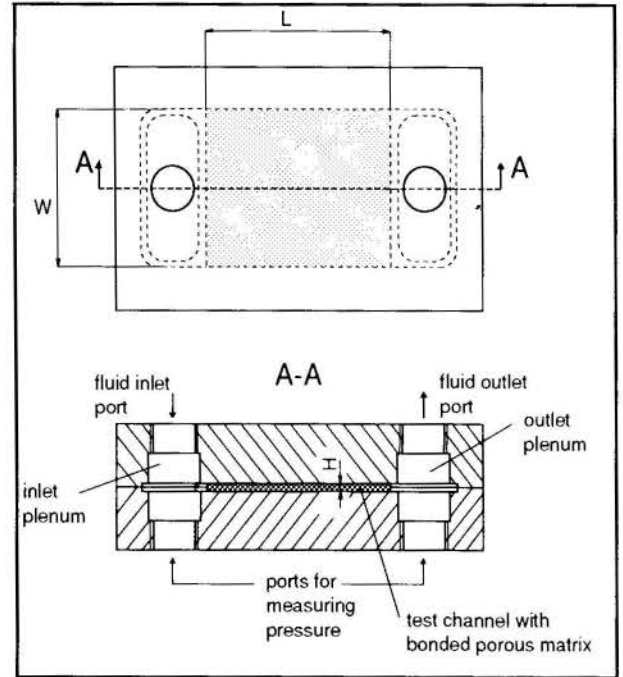


Figure 2. Block for testing porous layers

using the ideal gas law, is not accounted for here.

The inlet air temperature is recorded for correcting the air density and viscosity (Bejan, 1993). A type J thermocouple wire is inserted in the air stream. The outlet air temperature is also measured with a portable thermocouple thermometer. Air temperature difference between inlet and outlet is negligible (within thermocouple uncertainty of 0.5 °C) for all experiments.

Air test results represent the arithmetic average of at least five experimental runs for each block. For each test block the data acquisition starts at low flow rate, increasing in finite steps. No hysteresis is observed when reducing the flow rate.

POROSITY, PERMEABILITY AND INERTIA COEFFICIENT OF COMPRESSED POROUS LAYERS

The porosity of the compressed layers is obtained by calculating the solid volume and dividing it by the total volume of the matrix, $\phi = 1 - (V_s/V)$, where V_s is the solid phase volume, and V is the total volume of the porous matrix. The solid (aluminum) volume of each porous layer is calculated by weighing each porous sample after compression, and dividing it

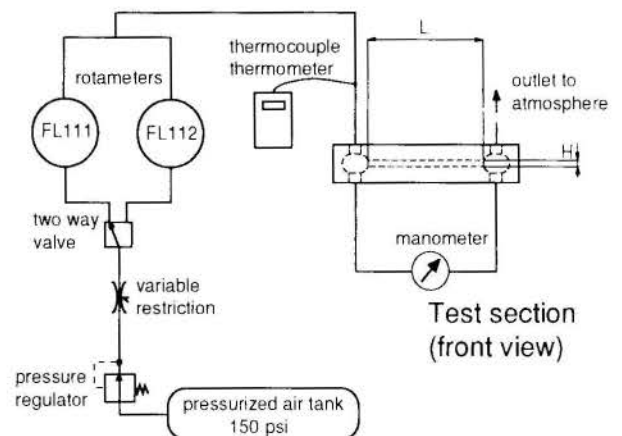


Figure 3. Air flow experimental setup.

by the aluminum alloy density ($\rho_s = 2681.4 \text{ kg/m}^3$). The total volume is measured directly. From the experimental measurements, a Darcy velocity is computed for each pressure drop by dividing the volumetric flow rate, \dot{Q} , by the cross section area of the test channel $S (=WH)$:

$$v_D = \frac{\dot{Q}}{S} \quad (1)$$

The pressure differential, produced by the porous layer only, is computed by subtracting the pressure drop of the clear (no porous insert) block, Δp_f , from the pressure drop of the specific porous sample, Δp_p , at each velocity

$$\Delta p(v_D) = \Delta p_p(v_D) - \Delta p_f(v_D) \quad (2)$$

For the pairs $(v_D, \Delta p/L)$ a quadratic interpolation following

$$\frac{\Delta p}{L} = \frac{\mu}{K} v_D + \frac{\rho c_F}{K^{1/2}} v_D^2 \quad (3)$$

is performed, using the least-square method. Note that μ is the fluid dynamic viscosity. The permeability K and the Forchheimer coefficient c_F for each specific porous layer are obtained directly from the quadratic interpolation. This procedure is shown (Antohe et al., 1996) to be consistent with the experimental range utilized and to yield more precise values.

Table 1 summarizes the hydraulic results obtained for the nine blocks tested. The uncertainty values for the permeability and Forchheimer coefficients are calculated following the methodologies presented in detail in Antohe et al. (1996).

Figure 4 presents the permeability and inertia coefficient of all blocks as function of initial porosity and compression ratio. The permeability increases with initial porosity as it decreases with compression ratio, as expected. The variation of inertia coefficient is less sensitive to compression ratio. These experimentally obtained values are used in the numerical simulation of the cold plates described in the following section.

Figure 5 presents the experimental pressure drop versus velocity of blocks 1, 4, 8, and 9. These extremes, highlighted in Table 1, are of: maximum porosity and permeability and minimum inertia coefficient -- block 1; minimum permeability -- block 4; minimum porosity -- block 8; maximum inertia coefficient -- block 9. An important observation in Fig. 5 is that, indeed, the flow through the compressed microporous layers behave as flow through a porous medium, that is, the pressure drop varies quadratically with speed.

THEORETICAL MODEL

Consider the flow of incompressible Newtonian fluid with constant properties through a heterogeneous system (Fig. 6). The fluid saturates the rigid, homogeneous and isotropic porous matrix. Fluid and solid matrix are supposed to be in thermal

Table 1- Initial (uncompressed) porosity (ϕ_i , %), compression ratio (r), porosity (ϕ , %), permeability (K , in 10^{-10} m^2), Forchheimer coefficient (c_F), and uncertainties (U_K, U_{c_F} , %).

block	ϕ_i	r	ϕ	K	U_K	c_F	U_{c_F}
1	96	7	64	11.4	5.4	0.37	8.0
2	96	9	62	5.9	4.7	0.40	8.8
3	96	11	56	3.7	4.5	0.45	9.2
4	96	14	47	1.8	3.6	0.41	11.5
5	94	7	56	6.1	5.2	0.47	8.2
6	94	9	46	3.2	4.7	0.53	8.8
7	92	5	60	9.2	5.2	0.38	8.2
8	92	7	31	5.4	4.7	0.42	8.8
9	90	5	43	2.7	5.8	0.84	7.9

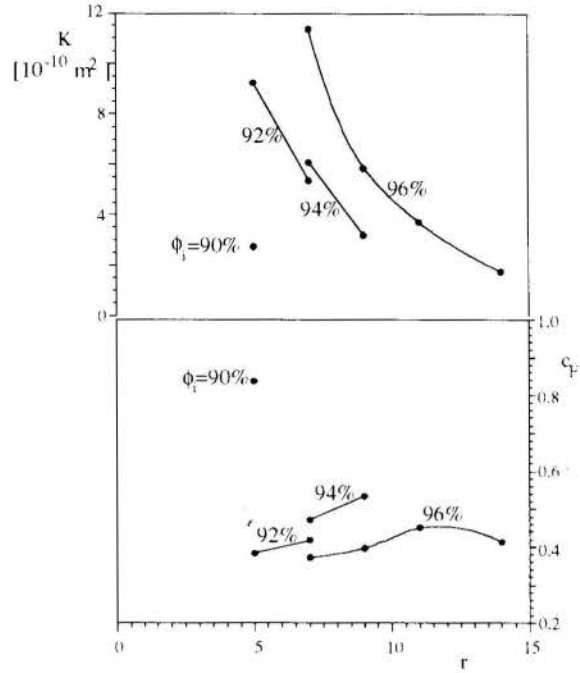


Figure 4- Permeability and inertia coefficient of all layers as function of initial porosity (ϕ_i) and compression ratio

equilibrium. The vertical (z) pressure variation can be neglected in a slender enclosure, $h \ll (t, d)$. The velocity field is assumed to be fully developed in z within both, non-porous and porous, regions. The three dimensional horizontal velocity components can be written as the product of the z -averaged velocity components, u and v , with a shape function that determines the velocity profile in the z direction, $g(z)$.

$$\begin{aligned} p'(x,y,z) &= p'(x,y), \quad u(x,y,z) = u(x,y)g_{f,m}(z), \\ v(x,y,z) &= v(x,y)g_{f,m}(z), \quad w(x,y,z) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

The double subscript in shape function g (m for porous region and f for non-porous region) anticipates different velocity profiles within each region. The temperature is also considered to have negligible variation in the z -direction,

$$T(x,y,z) = T(x,y) \quad (5)$$

With Eqs. (4) and (5), the 3D steady balance equations (Hsu and Cheng, 1990) can be integrated in z , from zero to h . The resulting equations, valid for a slender cooling enclosure, are

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (6)$$

$$\begin{aligned} (\nabla \nabla) \cdot \mathbf{V} &= \frac{\phi^2 h}{\int_0^h g_{f,m}^2 dz} \left[-\frac{1}{\phi \rho} \nabla p' + J \nabla^2 \mathbf{V} + \left(\frac{2J}{h} \frac{dg_{f,m}}{dz} \right) \Big|_h \frac{1}{K} \right] \mathbf{V} \\ &= \frac{c_F \phi^2}{K^{1/2}} |\mathbf{V}| \mathbf{V} \end{aligned} \quad (7)$$

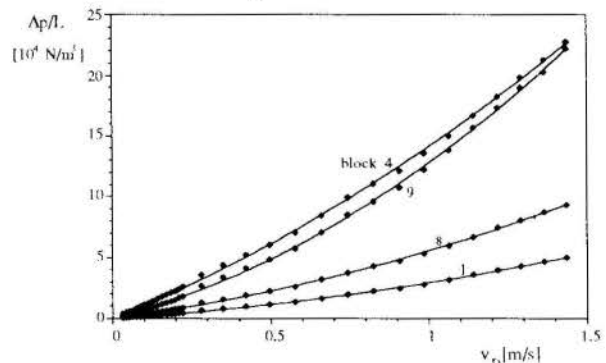


Figure 5- Pressure drop vs. air velocity of selected layers.

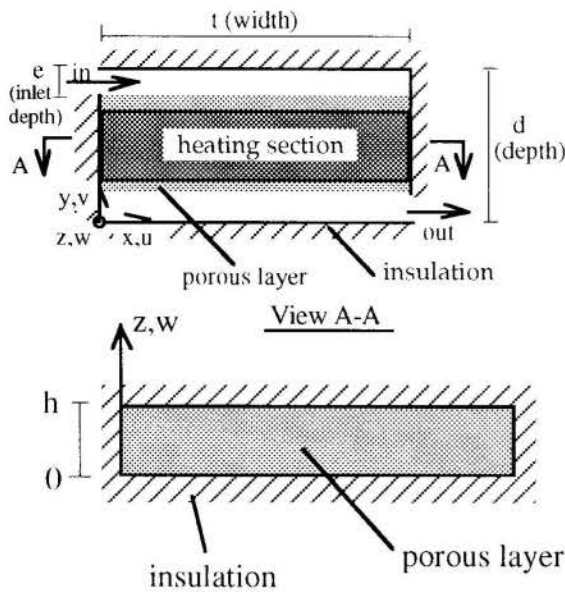


Figure 6. Model representation of microporous cold plate

$$\mathbf{v} \cdot \nabla T = \frac{k_{f,m}}{\rho c_p} \nabla^2 T + \frac{1}{\rho c_p h} q'' \quad (8)$$

where \mathbf{V} is the z -averaged fluid (seepage) velocity vector equal to $u \mathbf{i} + v \mathbf{j}$, p' is the effective pressure, T is the temperature. Fluid quantities are the density, ρ , specific heat, c_p , thermal conductivity, k_f , and kinematic viscosity, ν . Saturated porous medium quantities are the effective thermal conductivity, k_m , porosity, ϕ , effective viscosity coefficient, J , permeability, K , and Forchheimer inertia coefficient, c_F . Other parameters are the height, h , depth, d , and width, t , of the enclosure (Fig. 6).

The coefficient J shown in the Laplacian term is the ratio between the effective (porous) kinematic viscosity (ν_m) and the fluid kinematic viscosity, $J = \nu_m/\nu$. For low permeability porous medium, this factor can be set equal to $1/\phi$ (Nield and Bejan, 1992). Notice that when $\phi = 1$ and $K \rightarrow \infty$, Eq. (7) takes the form of the Navier-Stokes equation, accurate for modeling flow through a non-porous region.

Once the shape functions for non-porous and porous regions are known, Eqs. (6)-(8) will form a system of two-dimensional non-linear partial differential equations. The dimensional simplification from three to two dimensions, although straightforward, requires the additional effort of determining the shape functions. Within a non-porous region, the fully developed profile is represented by $g_f(z) = \frac{6z(h-z)}{h^2}$, so

$$\int_0^h g_f^2 dz = \frac{6h}{5} \quad \text{and} \quad \left. \frac{dg_f}{dz} \right|_h = \frac{-6}{h} \quad (9)$$

The situation is more complex when considering the flow within a porous medium region. Unfortunately, a unique closed form solution valid for all ranges of K and c_F does not exist, so it is necessary to proceed on a case-by-case basis. For a low permeability matrix as considered here, low enough to validate a Brinkman-extended Darcy model (in a scaling form, $K \ll e^{3/2} \nu / (\phi u_{in} c_F)^{1/2}$), the fully developed velocity profile given by Kaviany (1985) leads to:

$$g_m(z) = \Gamma_1 - \Gamma_2 \left(e^{\beta(x-h)/h} + e^{-\beta x/h} \right),$$

where:

$$\Gamma_1 = \frac{(1 - e^{-2\beta})}{\left[1 - e^{-2\beta} - 2(1 - e^{-\beta})^2 \beta^{-1} \right]}$$

$$\Gamma_2 = \frac{(1 - e^{-\beta})}{\left[1 - e^{-2\beta} - 2(1 - e^{-\beta})^2 \beta^{-1} \right]}$$

and $\beta = (h^2 \phi / K)^{1/2}$. So,

$$\int_0^h g_m^2 dz = h \Gamma_1 + h \Gamma_2^2 \left[2e^{-\beta} - \frac{(1 - e^{-2\beta})}{\beta} \right]$$

and $\left. \frac{dg_m}{dz} \right|_h = \frac{\beta}{h} \Gamma_2 (e^{-\beta} - 1)$ (10)

The energy Eq. (8) reveals the uniform volumetric heating model adopted here. This model is expected to be reasonably accurate when modeling heat transfer through thin enclosures. Notice that arrays designed by Texas Instruments present identical top and bottom modules, in which case the heat dissipated by the electronics is symmetric in z . The volumetric heat parameter of the rightmost term, q''' , represents the total power generated by the top and bottom electronic components per unit of volume, $q''' = (q''_t + q''_b) / h = q'' / h$. This volumetric heat source is considered only within the region sandwiched by the two layers of electronic components (heating region), being zero everywhere else within the enclosure. Notice also that Eq. (8) is valid for a non-porous region when k_f is used in the thermal diffusion term. As secondary dispersion effects within the porous layer are not accounted for, the cooling effect obtained by solving the system of Eqs. (6)-(8) is conservative.

Boundary conditions are: impermeable, non-slip, and adiabatic solid surfaces ($u = v = \partial T / \partial x = \partial T / \partial y = 0$), uniform and isothermal inlet flow ($u = u_{in}$, $v = 0$ and $T = T_{in}$), and non-diffusion outlet boundary ($\partial u / \partial x = \partial T / \partial x = 0$).

PHYSICAL CONFIGURATION

A typical cold-plate for a phased-array radar consists of an enclosure measuring 0.5 m (width, t) by 0.15 m (depth, d) by 0.001 m (height, h). Inlet and outlet ports measure 0.025 m (e). The electronic modules have a depth of 0.075 m, which is the same as the heating region (d_h) centered in the y direction.

The porous medium region is also centered in the y direction, but it extends beyond the heating region being 0.1 m deep (Fig. 6), aligned with the inlet and outlet ports. The ϕ , K , and c_F properties of the porous layer are from Table 1. The mass flow rate of coolant (polyalphaolefin or PAO -- a synthetic oil used for cooling military avionics) varies from 6×10^{-3} kg/s to 37×10^{-3} kg/s. Its density, kinematic viscosity, thermal conductivity and specific heat are respectively: 790 kg/m³, 7.9×10^{-6} m²/s, 0.143 W/mK, and 2 kJ/kgK (from Chevron, 1981). Property variations are neglected in this preliminary study.

Typical inlet coolant temperature, T_{in} , is 20 °C, and the total heat flux dissipated by the electronics is $q'' = 18.2$ kW/m². The effective thermal conductivity, k_m , of each compressed layer is obtained using the phase-symmetry model recently proposed by Hsu et al. (1994). The four layers tested here present effective conductivity of: 29 W/mK (block 1), 50 W/mK (block 4), 93 W/mK (block 8), 63 (block 9). Notice that the porous modified thermal conductivity is much higher than the fluid thermal conductivity, therefore, it is the latter that effectively controls the thermal diffusion process within the enclosure.

Equations (6)-(8), and shape parameters listed in Eqs. (9) and (10), are solved using the finite volume method with SIMPLE algorithm (Patankar, 1980) and QUICK scheme (Leonard, 1979). Discretized equations are solved with the efficient Tri-Diagonal-Matrix algorithm using an implicit alternating-direction Gauss-Seidel iterative method. The present code is a modified version (upgraded) of the one validated against experimental results by Lage et al. (1991) simulating indoor pollutant transport through a ventilated enclosure.

Convergence criteria are: relative norm of pressure gradient smaller than 10^{-6} for flow convergence, and relative norm of volume averaged temperature smaller than 10^{-5} for energy equation. After performing extensive grid accuracy tests, it is observed that a non-uniform (grid lines clustered near solid interfaces and near non-porous-porous interfaces) 110 by 70 grid is sufficient to guarantee a three percent or smaller discrepancy with results obtained with a 160 by 100 grid.

In Fig. 7, the pressure drop from inlet port to outlet port, the maximum temperature within the cold plate, and the maximum temperature difference along the x direction of Fig. 6 within the heating region (electronics region) are displayed for cold plates with porous layers 1, 4, 8, and 9 (Table 1).

The pressure drop curves indicate a predominance of Darcy regime as expected because of the flow rates used and the relatively low permeability of the porous layers. The maximum pressure drop is attained with the lowest permeability porous layer, block 4, the least efficient configuration in hydraulic terms. The lowest pressure drop is that of block 8 that presents the lowest porosity.

The maximum temperature curves indicate a steep decrease in maximum temperature of the cold plate with mass flow rate of PAO. The most efficient porous layer is that of block 4, the one with smallest permeability. The mass flow rate effect is less predominant on the maximum temperature variations along the x direction, specially between blocks 1, 4, and 9. In any event, the worst scenario points to a maximum porous pressure drop of less than 5×10^5 Pa and a maximum ΔT_{max} of less than 20°C .

Figures 8 and 9 present the streamline and isotherm

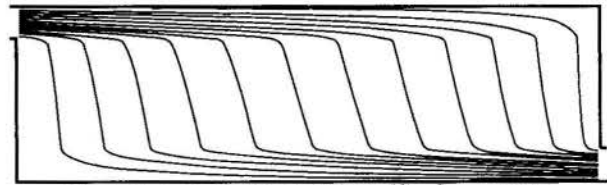
distributions of each block for a PAO mass flow rate equal to 6.2×10^{-3} kg/s. Recall that the objective is to have streamlines as vertical as possible within the heating region of the cold plate for uniform flow distribution. It is clear that porous layer of block 4 achieves the best flow distribution and more uniform temperature within the heating region.

LIMITATIONS

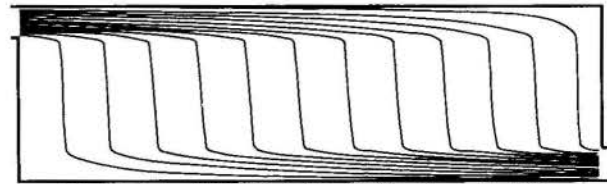
The separation of variables, as, for example, $u = u'(x,y)g(z)$, when the flow region is a sequence of non-porous – porous – non-porous... regions requires the assumption that all hydrodynamic development lengths are negligibly small.

For transition from non-porous to porous region, the assumption is accurate as long as the Darcy number is small: the developing length in a low permeability porous region is predicted as $x_m \sim hK^{1/2}/e$ (Nield and Bejan, 1992), in the present case $x_m \sim 10^{-6}$ m, shorter than the porous layer depth of 0.1 m.

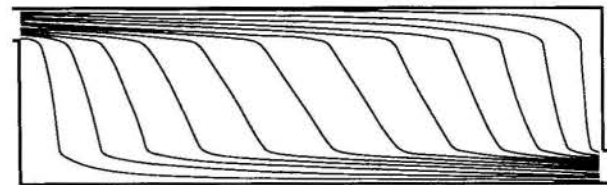
The transition from porous to clear region is more subtle. For non-porous flow through parallel plates, with uniform incoming flow, the entrance length is predicted as $x_f = 0.0065h^2u_{in}/\nu$ (Sparrow, 1955). So, the maximum developing length is less than 0.0025 m which is about 10 times smaller than the shortest plenum depth equal to 0.025 m. Since the flow coming out of a low permeability porous region is not uniform (distorted due to Brinkman effect) the development length is expected to be even shorter (this effect might be negligible if porosity variation near the surface is included in the analysis).



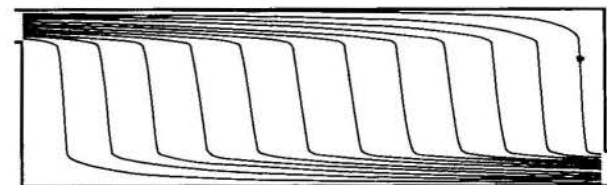
Block 1: $\phi=0.64$, $K=11.36 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_F=0.371$



Block 4: $\phi=0.47$, $K=1.75 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_F=0.413$



Block 8: $\phi=0.31$, $K=5.36 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_F=0.418$



Block 9: $\phi=0.43$, $K=2.72 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_F=0.838$

Figure 8. Streamlines of PAO flow

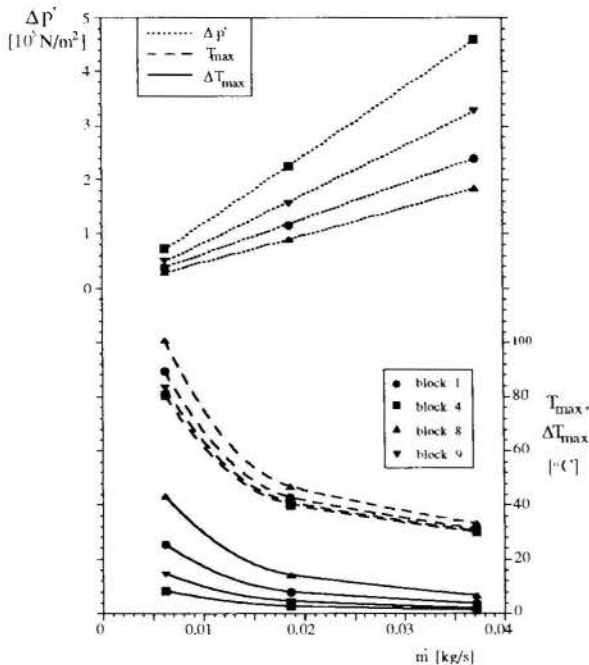
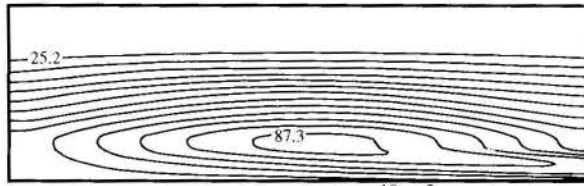
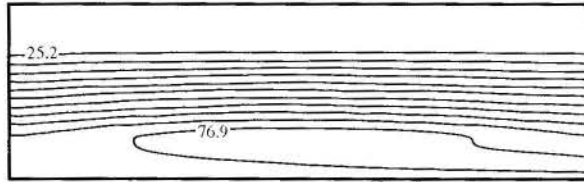


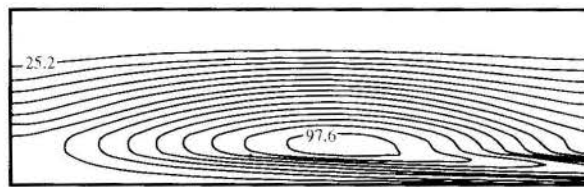
Figure 7- Pressure drop ($\Delta p'$) from inlet to outlet ports, maximum temperature within cold plate (T_{max}), and maximum temperature difference (ΔT_{max}) along the x direction within heating section, versus PAO mass flow rate



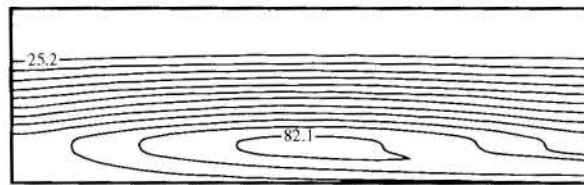
Block 1: $\phi=0.64$, $K=11.36 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_f=0.371$



Block 4: $\phi=0.47$, $K=1.75 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_f=0.413$



Block 8: $\phi=0.31$, $K=5.36 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_f=0.418$



Block 9: $\phi=0.43$, $K=2.72 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $c_f=0.838$

Figure 9. Equally spaced isotherms, in $^{\circ}\text{C}$

The correctness of imposing non-diffusion temperature boundary condition at the outlet of the enclosure is now discussed. The zero diffusion outlet boundary condition was shown by Lage et al. (1991) to have negligible effect on the numerical simulation of ventilated two dimensional enclosures. Presently, for Prandtl number larger than one when convection predominates, the diffusive outlet boundary condition effect becomes less pronounced. The maximum temperature difference between results obtained with non-diffusive outlet boundary and with diffusive boundary and constant temperature $T_{\text{out}} = T_{\text{in}}$, is less than two percent.

The assumption of thermal equilibrium is known to deteriorate for high Reynolds number and high Darcy number, depending on the solid matrix to fluid thermal diffusivity ratio. This dependence is not a simple one, as indicated in the work of Amiri and Vafai (1994) considering a porous medium made of identical spherical particles, particle Reynolds number from 0 to 450, and Darcy number from 0 to 15×10^{-7} (see their Fig. 7). The solid matrix and fluid considered here present diffusivity ratio around 1500. The particle-based Reynolds number is less than 150, and the Darcy number (K/c^2) is about 10^{-6} . Although Amiri and Vafai's qualitative mapping does not go beyond diffusivity ratio 25, it anticipates the thermal equilibrium assumption to be a reasonable approximation.

CONCLUSIONS

Hydraulic behavior of mechanically compressed aluminum matrices are fully tested, using air, in terms of porosity, permeability and inertia coefficient. The parameter values vary

as: $0.3 < \phi < 0.7$, $1.0 \times 10^{-10} \text{ m}^2 < K < 1.2 \times 10^{-9} \text{ m}^2$, $0.3 < c_f < 0.9$. These parameters, fundamental for the design and optimization of the micro heat exchangers, are input data for several numerical simulations of a real system being developed by Texas Instruments. Results show the thermo-hydraulic efficiency of the system in terms of pressure drop, maximum temperature in the system, and maximum temperature variation transversal to the main coolant flow direction.

ACKNOWLEDGEMENT

Financial support from TI is greatly appreciated.

LIST OF REFERENCES

- Amiri, A. and Vafai, K., 1994 "Analysis of dispersion effects and non-thermal equilibrium non-darcian, variable porosity incompressible flow through porous medium," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.37, pp.939-954.
- Antohe, B. V., Lage, J. L., Price, D. C., Weber, R. M., 1996, "Experimental determination of permeability and inertia coefficients of mechanically compressed aluminum porous matrices," *J. Fluids Engng.*, to appear.
- Bejan, A., 1993, *Heat Transfer*, John Wiley, New York.
- Bergles, A. E., 1985, "Techniques to Augment Heat Transfer," *Handbook of Heat Transfer Applications*, eds. W. M. Rohsenow et al., McGraw Hill, New York.
- Chevron, 1981, *Synfluid Synthetic Fluids*, Phys. Property Data.
- Hsu, C. T. and Cheng, P., 1990, "Thermal dispersion in a porous medium," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.33, pp.1587-1597.
- Hsu, C. T., Cheng, P. and Wong, K. W., 1994, "Modified Zehner-Schlunder models for stagnant thermal conductivity of porous media," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.37, pp.2751-2759.
- Kaviany, M., 1985, "Laminar flow through a porous channel bounded by isothermal parallel plates," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.28, pp.851-858.
- Kuzay, T. M., Collins, J. T., Khounsary, A. M., Morales, G., 1991, "Enhanced Heat Transfer with Metal-Wool-Filled Tubes," *Proceedings ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference*, Vol.5, pp.451-459.
- Lage, J. L., Bejan, A. and Anderson, R., 1991, "Efficiency of transient contaminant removal from a slot ventilated enclosure," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.34, pp.2603-2615.
- Leonard, B. P., 1979, "A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation," *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol.19, pp.59-98.
- Lindemuth, J. E., Johnson, D. M. and Rosenfeld, J. H., 1994, "Evaluation of Porous Metal Heat Exchangers for High Heat Flux Applications," *Heat Transfer in High Heat Flux Systems*, Eds. A. M. Khounsary, T. W. Simon, R. D. Boyd, and A.J. Ghajar, ASME HTD Vol.301, pp.93-98.
- Nield, D. A. and Bejan, A., 1992, *Convection in Porous Media*, Springer-Verlag, New York.
- Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, Washington D.C..
- Peng, X. F., Wang, B. X., Peterson, G. P., and Ma, H. B., 1995, "Experimental Investigation of Heat Transfer in Flat Plates with Rectangular Microchannels," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.38, pp.127-137.
- Sparrow, E. M., 1955, "Analysis of laminar forced convection heat transfer in the entrance region of flat rectangular ducts," *NACA TN-3331*.
- Walpole, J. N., and Missaggia, L. J., 1993, "Microchannel Heat Sinks for Two-dimensional Diode Laser Array," *Surface Emitting Semiconductor Lasers And Arrays*, Vol.1 (Edited by G.A. Evans and J. M. Hammer), Academic Press, New York.



ANALYSIS OF SUBCOOLED FLOW BOILING IN TUBES



Élcio Nogueira
 Universidade do Vale do Paraíba
 São José dos Campos - SP - Brazil

J. M. KUNBERGER, C. O. GAVRILESCU AND S. KAKAÇ
 Department of Mechanical Engineering, University of Miami, FI, USA

SUMMARY

The purpose of this study is to present a new analytical two-dimensional solution, using the integral transform technique, to the problem of forced convection heat transfer in laminar and turbulent flows at the thermal entrance region of a circular duct and to demonstrate its consistence, and its aplicability for high subcooled boiling systems. The non-equilibrium condition that occurs in the subcooled flow boiling was considered and comparisons of pressure drop, average temperature and wall temperature, obtained by experiments, has lead to further reliable modifications of the model.

INTRODUCTION

The modeling of subcooled boiling is of considerable practical interest for the analysis and design of two-phase flow boiling systems because of its high heat transfer coefficients. Although it is possible to write exact conservation equations from the first principle to represent the subcooled and saturated boiling, it is necessary to use simplified forms of the conservation equations for many problems of practical interest because the full set of equations tends to be time consuming. Another important problem is that their utilization is hampered by insufficient knowledge of the constitutive equations required for closure and, in fact, the majority of thermo-hydrodynamic analytical studies involved the solution of one-dimensional time dependent equations (Andreani and Yadigaroglu, 1992). However, one-dimensional models are not ideal for comparisons with experimental measurements because these models neglect the distribution of void fraction, velocity and temperature along the radial dimension.

Since the subcooled flow boiling is in a complicated non-equilibrium state involving the vapor bubbles and the subcooled liquid, the subcooled boiling process is not clarified in detail yet, and as a complex physical phenomenon is still not sufficiently well understood to allow reliable predictions of heat transfer and pressure drop (Spindler, 1994).

Recently, a two-dimensional two-phase non-equilibrium model was presented by Lai and Farouk (1993). The model attempts to predict non-equilibrium effects, that is, superheating near the wall and subcooling in the center, and the governing equations are solved using a finite difference scheme. However, to the authors knowledge, the application of detailed two-dimensional two-phase flow model to the solution of subcooled boiling problem has started recently, and an analytical two-dimensional solution procedure has not yet been developed.

PRESENT MODEL

By using the integral transform technique, Nogueira (1993) and Nogueira et al. (1995) developed a differential model concerned with the analytical solution of a hydrodynamically thermally developed flow for two-phase gas-liquid annular flow. The procedure of analytical solution adopted here is a particular case of

the solution used for annular two-phase flow model at the core (Nogueira et al., 1995), with null void fraction; but, in the present case we do not have discontinuity in the shear stress because the wall is stationary and smooth.

THEORETICAL ANALYSIS

Flow Problem. Under the hypothesis of steady incompressible fully developed flow with constant fluid properties, the momentum equation for the flow becomes (Nogueira, 1993)

$$\frac{d}{dr} \left[r E_m(r, u(r)) \frac{du(r)}{dr} \right] = \frac{Pr}{\mu}, \quad 0 \leq r \leq r_w \quad (1.a)$$

The boundary conditions are

$$\frac{du(r)}{dr} = 0, \quad r = 0 \quad (1.b)$$

$$u(r) = 0, \quad r = r_w \quad (1.c)$$

Direct integration of the system (1) provides the following expression for the velocity profile:

$$u(r) = \frac{Pr_w^2}{2\mu} \int_R^1 \frac{R' dR'}{E_m(R', u(R'))} \quad (2.a)$$

where

$$R = \frac{r}{r_w}; P = - \left[\frac{dp}{dz} + \rho g \alpha \right]; g \alpha = \left| \vec{g} \right| \sin \alpha \quad (2.b-d)$$

and

$$E_m(R, u(R)) = 1 + \frac{\epsilon_m(R, u(R))}{\nu} \quad (2.e)$$

Then, the shear stress may be computed from:

$$\tau(R) = \frac{Pr_w R}{2} \quad (3)$$

and the average velocity through the duct is obtained from

$$\bar{u} = \frac{Pr_w^2}{2\mu} \int_0^1 \frac{R^3 dR}{Em(R, u(R))} \quad (4)$$

A dimensionless velocity profile is defined as

$$U(R) = \frac{u(R)}{Cu} \quad (5)$$

where C is a parameter introduced to allow direct comparisons against previous works available in the literature and is given by

$$C = \frac{u_{max}^*}{u} \quad (6.a)$$

For laminar flow i.e.,

$$E_m(R, u(R)) = 1.0 \quad (6.b)$$

Then

$$u_{max}^* = u^*(0) = \frac{Pr_w^2}{4\mu} \quad (6.c)$$

$$\bar{u} = \frac{Pr_w^2}{8\mu} \quad (6.d)$$

and

$$C = 2.0 \quad (6.e)$$

The turbulent models adopted are extracted from the literature:

$$\frac{\varepsilon_m(R, u(R))}{\nu} = \frac{K}{E} \left[e^{Ku^+} - 1 - Ku^+ - \frac{(Ku^+)^2}{2!} - \frac{(Ku^+)^3}{3!} \right] \quad (7.a)$$

for $y^+ < 40$

where $K=0.407$ and $E=10$, as proposed by Spalding (1961), and

$$\frac{\varepsilon_m(R, u(R))}{\nu} = \frac{K_1}{6} y^+ (1+R)(1+2R^2) \quad (7.b)$$

for $y^+ \geq 40$

with $K_1=0.4$, as obtained by Reichardt (1951). The related quantities are given by:

$$y^+ = (1-R)r_w \frac{\sqrt{\tau_w/\rho}}{\nu} \quad (8.a)$$

$$u^+ = \frac{u(R)}{\sqrt{\tau_w/\rho}} \quad (8.b)$$

For turbulent flow conditions, the velocity profile is obtained by an iterative procedure. The first approximation for pressure gradient is obtained from Eq. (6.d). The local velocity is obtained from Eq. (2.a), and the approximate theoretical average velocity is obtained from Eq. (4). By the comparison between experimental and theoretical average velocities and with the application of the bisection method for pressure gradient, the velocity profile is obtained with a prescribed accuracy.

The dimensionless formulation of the energy equation, can be written as (Nogueira, 1993):

$$\left(\frac{l_0}{l_n} \right)^2 CRU(R) \frac{\partial \theta(R, Z)}{\partial Z} = \frac{\partial}{\partial R} \left[RE_n(R, u(R)) \frac{\partial \theta(R, Z)}{\partial R} \right] \quad (9.a)$$

$0 \leq R \leq 1, Z > 0$

with the following inlet and boundary conditions

$$\theta(R, 0) = F(R), \quad 0 \leq R \leq 1 \quad (9.b)$$

$$\frac{\partial \theta(0, Z)}{\partial R} = 0, \quad Z > 0 \quad (9.c)$$

$$\alpha l_0 \left[\theta(R, Z) + \frac{T^*}{\Delta T} \right] + \beta^* E_n \frac{\partial \theta(R, Z)}{\partial R} = \Phi(Z),$$

$$R=1; Z > 0 \quad (9.d)$$

Where

$$Z = \frac{\alpha z}{ul_n^2}, \quad \theta(R, Z) = \frac{T(r, z) - T^*}{\Delta T}, \quad (10.a-b)$$

$$F(R) = \frac{f_0(r) - T^*}{\Delta T}, \quad \Phi(Z) = \frac{T_w(z) - T^*}{\Delta T}, \quad (10.c-d)$$

$$\phi(Z) = \frac{\phi(Z)l_0}{k\Delta T}, \quad E_n(R) = 1 + \frac{Pr}{Pr_t} \frac{\varepsilon_m(R, u(R))}{\nu} \quad (10.e-f)$$

and

$$l_0 = r_w, \quad l_n = 2r_w \quad (11. a - b)$$

Then, for prescribed temperature:

$$T^* = T_w(Z); \quad \Delta T = f_0(0) - T^*, \quad (12. a - b)$$

and for prescribed heat flux:

$$T^* = f_0(0); \quad \Delta T = \frac{\phi(Z)l_n}{k}, \quad (12. c - d)$$

The turbulent Prandtl number used in the present work is one of the most suitable for applications in engineering practice, suggested by Reynolds (1975).

$$Pr_t = 1 - \frac{(K_1 u^+)^4 / 4!}{e^{K_1 u^+} - 1 - K_1 u^+ - (K_1 u^+)^2 / 2! - (K_1 u^+)^3 / 3!} \quad (13)$$

However, for the viscous sublayer we have used a constant value of $Pr_t = 1.0$, which is suggested by Direct Numerical Simulation (DNS) and reported by Kays (1994).

The formal solution of the system (9), can be written as (Cotta, 1993).

$$\theta(R, Z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\Psi(\mu_i, R)}{N_i} e^{-\lambda_i^2 Z} \left[\bar{f}_i + \frac{1}{C} \left(\frac{l_n}{l_0} \right)^2 \int_0^Z \bar{g}_i(Z') e^{\lambda_i^2 Z'} dZ' \right] \quad (14)$$

where λ_i 's and Ψ_i 's are eigenvalues and eigenfunctions of the associated auxiliary problem (Nogueira, 1993).

For prescribed wall heat flux boundary condition ($\alpha^* = 0$ and $\beta^* = 1$) the solution becomes (Nogueira, 1993):

$$\theta(R, Z) = \bar{\theta}(Z) + \theta_Z(R, Z) + \theta_0(R) \quad (15)$$

where

$$\bar{\theta}(Z) = \frac{2Z/C + \int_0^1 W(R)F(R)dR}{\int_0^1 W(R)dR} \quad (16)$$

$$\theta_Z(R, Z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\Psi_i(R)}{N_i} e^{-\lambda_i^2 Z} \left[\bar{f}_i - \frac{\bar{g}_i(Z)}{\mu_i^2} \right] \quad (17)$$

The component $\theta_0(R)$ is evaluated from:

$$\frac{d}{dR} \left[K(R) \frac{d\theta_0(R)}{dR} \right] = \frac{\Phi(Z)W(R)}{\int_0^1 W(R)dR}, \quad 0 \leq R \leq 1 \quad (18 a)$$

$$\frac{d\theta_0(R)}{dR} = 0, \quad R = 0 \quad (18 b)$$

$$K(R) \frac{d\theta_0(R)}{dR} = \Phi(Z), \quad R = 1 \quad (18 c)$$

Then, the solution for $\theta_0(R)$ becomes (Nogueira, 1993):

$$\theta_0(R) = \frac{\Phi(Z)}{\int_0^1 W(R)dR} \left[\int_0^R \frac{\int_0^R W(R')dR'}{K(R')} dR' - \int_0^R W(R') \int_0^R \frac{\int_0^R W(R')dR'}{K(R')} dR' dR \right] \quad (19)$$

$$0 \leq R \leq 1$$

Spindler (1994) reported the work of Hahne et al. (1990), where the following simplified equation for wall excess temperature at incipient boiling was suggested:

$$T_w = \frac{2\sigma T_s \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right)}{r^* h_{lg}} + T_s \quad (20)$$

where h_{lg} , σ , T_s and r^* are the latent heat of evaporation, surface tension, saturation temperature and cavity radius, respectively. The ratio $(2\sigma/\rho_g r^*)$ represents the excess pressure in the vapor nucleus and for Freon-11 $(2\sigma/\rho_g r^*) = 1.1$ bar was found as best fit (Spindler, 1994).

RESULTS AND DISCUSSION

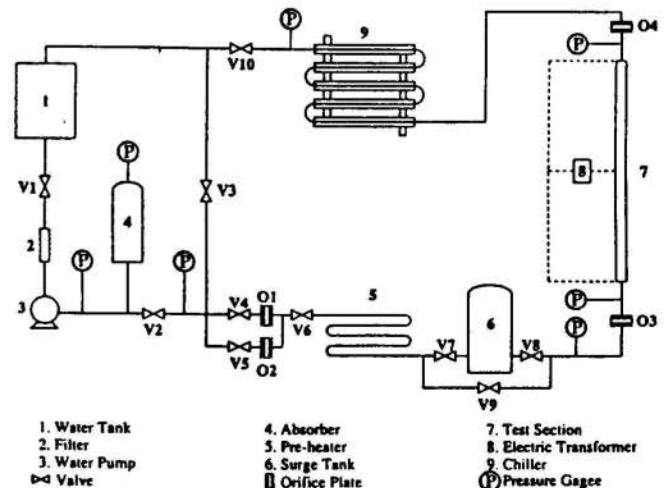


Figure 1 - Schematic Diagram of the Vertical System

Figure 1 is a schematic diagram of the vertical two-phase flow loop, showing basic devices and instrumentation. A detailed description of the vertical system and procedures used to obtain experimental results is given by Veziroglu and Kakaç (1983). The detailed description of the horizontal experimental system was made by Gavrilescu. (1995), and all experimental results for horizontal system were reported by Kumberger (1995).

To demonstrate the validity of the model, we compare the values obtained for the outlet system pressure with the experimental results. Figure 2 shows this comparison for different nominal heat input values. For these comparisons, we used the experimental surge tank pressure (Figure 1), which is the input for the theoretical calculations. The property values were obtained using expressions, valid for Freon-11, given by Liu (1989). The obtained results are in good agreement for the cases without heat input and lower values of heat input. Higher difference was observed for relatively high nominal heat inputs. In fact, higher differences were expected since the property variations with temperature along the heater and the compressibility of the fluid were not considered in the present model. However, the absolute difference between theoretical and experimental results is not so high because the experimental pressure drop in the heated section is low.

The same qualitative observations are valid for the results presented in Figure 3. In this case, we compare the variation of pressure along the heater. Again, the agreement between the results is good for low heat input and satisfactory for relatively high heat inputs.

Figure 4 shows the results for the fluid outlet temperature at the centerline, for constant heat flux boundary condition. For subcooled conditions, when mass flow rate is relatively high and the bulk temperature is not higher than the saturation temperature, the experimental results and those obtained by the analytical procedure are in a very close agreement. However, when the mass flow rate decreases the fluid reaches the saturation temperature before the outlet, and the experimental values are lower than the theoretical values. With increasing heat flux this effect appears for higher mass flow rates and the position of incipient boiling shifts upstream of the channel. The difference observed can be explained by the fact that the theoretical model did not take into account the bubble growth at the wall or at the thermal boundary layer. In fact, part of the wall flux is needed for sensible heating and to activate the first nucleation sites.

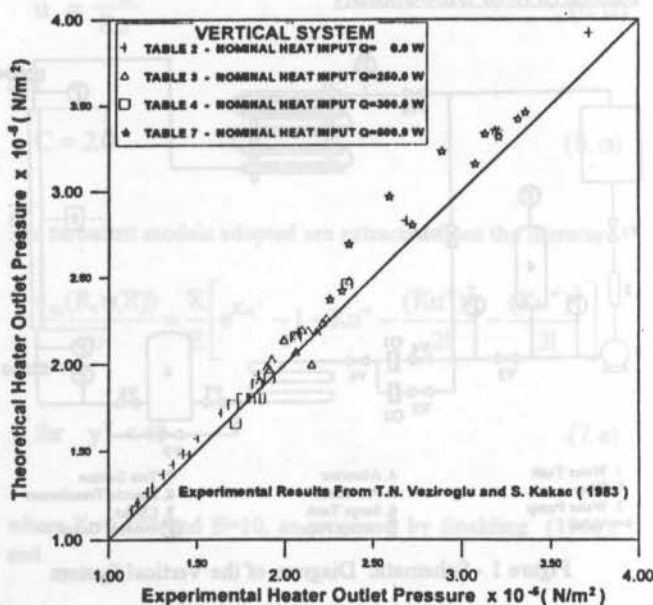


Figure 2 - Outlet Pressure of the Vertical System

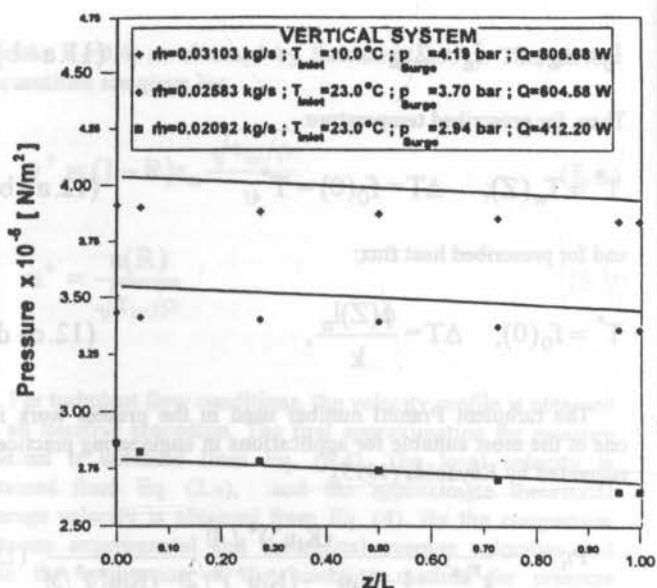


Figure 3 - Local Pressure of the Vertical System

The comparisons of the theoretical results with experimental findings of the average fluid temperature (Figure 5) are satisfactory, even for relatively high heat flux conditions. However, the comparisons for wall temperature, Figure 6, are not so good for all conditions and, in fact, for high heat fluxes the results are very different. These differences occur when the wall temperature reaches the so-called wall superheat and it exceeds the saturation temperature. At this point, bubble generation starts and a thin superheat liquid film exists next to the wall, where bubbles nucleate, grow and collapse. Beyond this point the wall temperature remains constant, and the boundary condition of constant heat flux at the wall is not effective if bubble effects are not considered in the model. However, although in a non-equilibrium condition, the liquid bulk temperature is very much below the saturation temperature and the model is able to represent it.

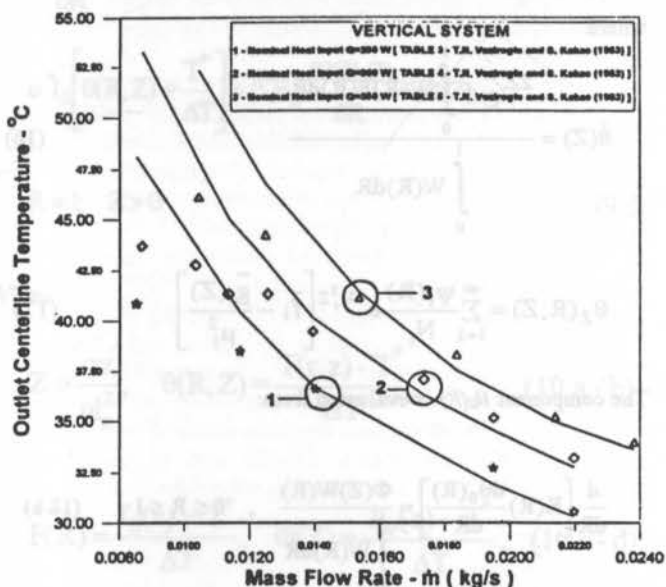


Figure 4 - Outlet Temperature of the Vertical System

Figure 7 presents results of constant wall temperature boundary condition for all points beyond the incipient boiling point. For comparison between experimental wall temperature and wall temperature given by Eq. (23), which is used in the

theoretical model, the local pressure is used to obtain the saturation temperature. In this case, the constant heat flux boundary condition was used to carry out the theoretical analysis until the theoretical wall temperature reaches the wall temperature given by Eq. (23). Then, with the new initial condition and local property values, the same procedure is used as described above to obtain the field of temperature. In fact, the wall temperature given by Eq. (23), which is used with the present procedure, is in good agreement with the experimental results of this work.

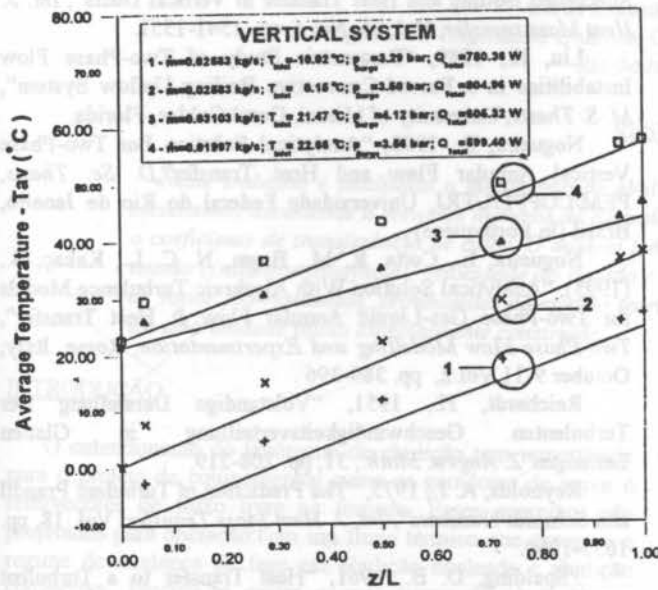


Figure 5 - Average Temperature for Vertical System

For horizontal system the comparisons made were qualitatively the same as those presented for vertical system, and the non-equilibrium condition has been represented by the model [Figures 8 and 9]. However, because of the stratification observed in horizontal systems, our model can not represent the difference observed between the top and bottom temperatures.

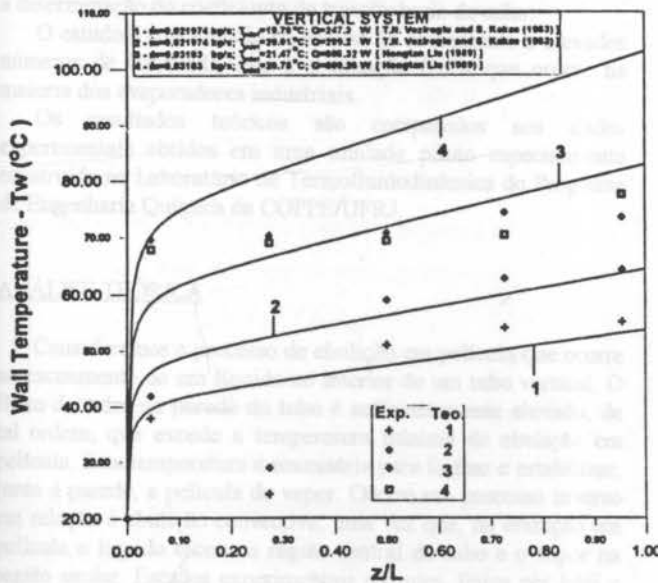


Figure 6 - Wall Temperature for Heat Flux Boundary Condition

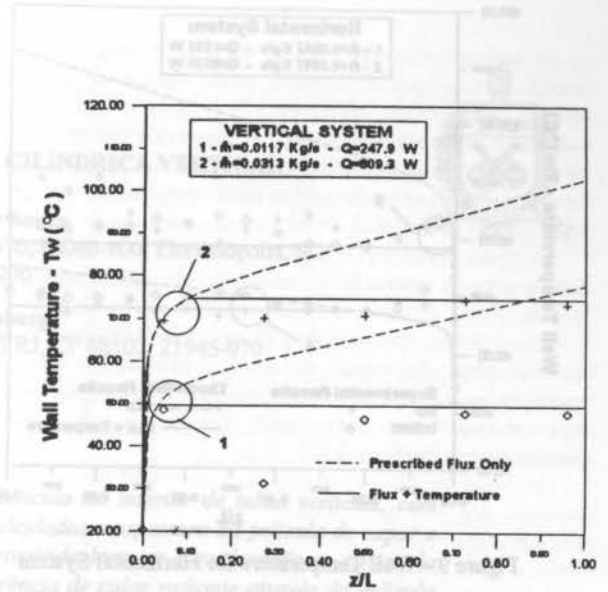


Figure 7 - Wall Temperature With Flux+Temperature B. C.

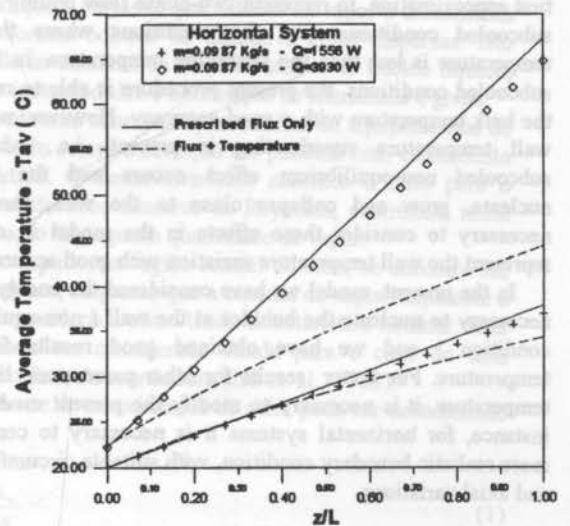


Figure 8 - Average Temperature for Horizontal System

When the comparisons for average temperature are made, Figure 8 above, the theoretical average temperature is below the experimental one, and the difference between theoretical and experimental results is higher for relatively high heat flux. These results are expected because, although the energy excess for bubbles generation and growing was considered in the theoretical model, the presence of the droplets in the hydrodynamic and thermal boundary layers was not considered and it is known that the structure of turbulence in the hydrodynamic layer is modified by the presence of bubbles and that the temperature of the vapor near the wall is reduced because of the strong vaporization of the droplets in the thermal boundary layer (Andreani and Yadigaroglu, 1994).

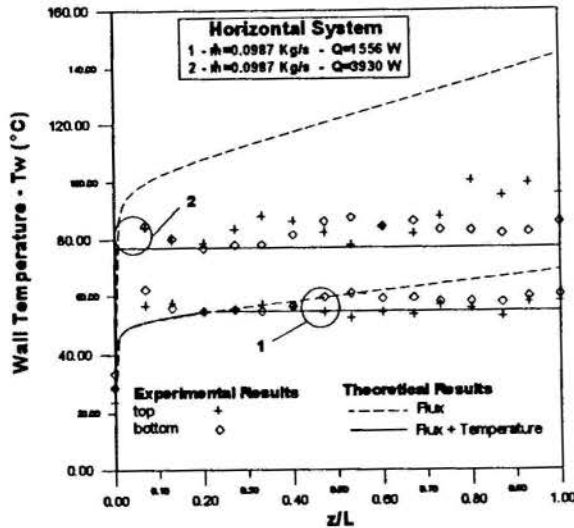


Figure 9 - Wall Temperature for Horizontal System

CONCLUSIONS

We have demonstrated that our model can be used, as a first approximation, to represent two-phase flow boiling for high subcooled conditions, i.e., for conditions where the bulk temperature is less than the saturation temperature. In fact, for subcooled conditions, the present procedure is able to represent the bulk temperature with a good accuracy. However, when the wall temperature superheating is present, i.e., when the subcooled non-equilibrium effect occurs and the bubbles nucleate, grow and collapse close to the wall, then it is necessary to consider these effects in the model in order to represent the wall temperature variation with good accuracy.

In the present model we have considered the energy excess necessary to nucleate the bubbles at the wall (non-equilibrium condition) and we have obtained good results for wall temperature. For better results for other parameters, like bulk temperature, it is necessary to modify the present model. For instance, for horizontal systems it is necessary to consider a more realistic boundary condition, with suitable circumferencial and axial variations.

ACKNOWLEDGMENTS

One of the authors, Elcio Nogueira, wishes to acknowledge the financial support provided by CNPq of Brazil. He also acknowledges Dr. Renato Machado Cotta whose encouragement was important.

REFERENCES

- Andreani, M. and Yadigaroglu, G., 1992, "Difficulties in Modelling Dispersed Flow Film Boiling", *Wärme-und Stoffübertragung* 27, pp. 37-49.
- Andreani, M. and Yadigaroglu, G., 1994, "Prediction Methods for Dispersed Flow Film Boiling", *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 20, Suppl., pp. 1-51.
- Cotta, R. M., 1993, "Integral Transform in Computational Heat and Mass Transfer", CRC Press, Boca Raton, FL.
- Gavrilescu, C. O., 1995, "Experimental Study of Two-Phase Flow Instabilities in Convective Boiling Horizontal Systems", *M. S. Thesis*, University of Miami, Coral Gables, Florida.

Hahne, E., Spindler, K. and Shen, N., 1990, "Incipience of Boiling in Subcooled Well Wetting Fluids", *Proc. 9Th Int. Heat Transfer Conf. Jerusalem*, Vol. 2, pp. 69-74.

Kakaç, S., Yener, Y., 1995, "Convective Heat Transfer", CRC Press, Boca Raton, FL.

Kays, W. M., 1994, "Turbulent Prandtl Number - Where Are We?", *Journal of Heat Transfer, Transactions of the ASME*, Vol. 116, pp. 284-295.

Kunberger, J. M., 1995, Experimental results not published.

Lai, J. C., Farouk, B., 1993, "Numerical Simulation of Subcooled Boiling and Heat Transfer in Vertical Ducts", *Int. J. Heat Mass transfer*, Vol. 36, No. 6, pp. 1541-1551.

Liu, H., 1989, "Parametric Study of Two-Phase Flow Instabilities in a Forced-Convective Boiling Upflow System", *M. S. Thesis*, University of Miami, Coral Gables, Florida.

Nogueira, E., 1993, "Analytical Solution For Two-Phase Vertical Annular Flow and Heat Transfer", *D. Sc. Thesis*, PEM/COPPE/UF RJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil (In Portuguese).

Nogueira, E., Cotta, R. M., Brum, N. C. L., Kakaç, S., (1995), "Analytical Solution With Algebraic Turbulence Models for Two-Phase Gas-Liquid Annular Flow & Heat Transfer", *Two-Phase Flow Modelling and Experimentation*, Rome, Italy, October 9-11, Vol.2, pp. 389-396.

Reichardt, H., 1951, "Volständige Darstellung Der Turbulenten Geschwindigkeitsverteilung in Glatten Leitungen", *Z. Angew. Math.*, 31, pp. 208-219.

Reynolds, A. J., 1975, "The Prediction of Turbulent Prandtl and Schmidt Numbers", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 18, pp. 1055-1069.

Spalding, D. B., 1961, "Heat Transfer to a Turbulent Stream From a Surface With a Step-Wise Discontinuity in Wall Temperature", *Conf. Intern. Development in Heat Transfer, ASME*, Boulder, Colorado, Part II, pp. 439-446.

Spindler, K., 1994, "Flow Boiling", *Proceeding of The Tenth International Heat Transfer Conference*, Brighton, UK, Vol. 1.

Veziroglu, T. N. and Kakaç, S., 1983, "Two-Phase Flow Instabilities.", Final Report NSF Project CME 79-20018, Clean Energy Research Institute, University of Miami, Florida.



EBULIÇÃO EM PELÍCULA EM PAREDE CILÍNDRICA VERTICAL

José Antonio Ribeiro de Souza

Departamento de Engenharia Química, UFSC, CP 476, 88040-900, Florianópolis, SC
FAX: 55 (0)48 2319770

Cirus Macedo Hackenberg

Programa de Engenharia Química, COPPE, UFRJ, CP 68502, 21945-970
Rio de Janeiro, RJ



RESUMO

Neste trabalho é analisado o mecanismo de ebulição em película no interior de tubos verticais, com escoamento ascendente a elevados números de Reynolds. São calculados a espessura da película de vapor e o coeficiente de transferência de calor. O modelo teórico desenvolvido leva em consideração os efeitos da tensão cisalhante interfacial, velocidade do líquido e a transferência de calor radiante através da película de vapor. Os resultados, provenientes do modelo teórico, são comparados aos dados experimentais obtidos em uma unidade piloto especialmente construída.

INTRODUÇÃO

O entendimento do fenômeno de ebulição tem importância para o projeto de equipamentos como os geradores de vapor e refulveradores de fluxo livre ou forçado. Esses aparelhos são projetados para operação com um fluxo térmico que assegura o regime de mudança de fase em ebulição nucleada e ebulição convectiva. Procura-se evitar o mecanismo de ebulição em película, pois a camada de vapor junto à parede atua como um isolante, provocando um superaquecimento do tubo. Isto nem sempre é possível controlar dadas as condições operacionais industriais. Portanto, torna-se importante o estudo do mecanismo de transferência de calor em ebulição em película, com a finalidade da previsão da taxa de evaporação em tais equipamentos.

Neste trabalho é feito um equacionamento que permite a obtenção da equação característica para a espessura da película de vapor. Esta equação consiste em uma forma mais direta para a determinação do coeficiente de transferência de calor.

O estudo é concentrado na análise do escoamento a elevados números de Reynolds, que é a situação física que ocorre na maioria dos evaporadores industriais.

Os resultados teóricos são comparados aos dados experimentais obtidos em uma unidade piloto especialmente construída no Laboratório de Termofluidodinâmica do Programa de Engenharia Química da COPPE/UFRJ.

ANÁLISE TEÓRICA

Consideremos o processo de ebulição em película que ocorre no escoamento de um líquido no interior de um tubo vertical. O fluxo de calor na parede do tubo é suficientemente elevado, de tal ordem, que excede a temperatura mínima de ebulição em película. Esta temperatura é necessária para formar e estabilizar, junto à parede, a película de vapor. Ocorre um processo inverso em relação à ebulição convectiva, uma vez que, na ebulição em película o líquido escoou na região central do tubo e o vapor na região anular. Estudos experimentais recentes, feitos por Ishii e DeJarlais (1987), mostraram visualmente os regimes que ocorrem no escoamento. Foi detectada a existência de três regimes: escoamento anular invertido, "slug" invertido e escoamento com gotas dispersas (neblina).

O escoamento anular invertido ocorre a baixas qualidades do vapor, sendo que a elevadas quantidades de vapor o escoamento muda para formar bolsões de líquido e gotas dispersas. Isto ocorre devido ao aumento da força de arrasto no núcleo líquido, ocasionando instabilidades e a formação de filamentos e gotas.

Este estudo está concentrado na análise de equipamentos de evaporação onde ocorre a ebulição em película com escoamento anular invertido. O desenvolvimento analítico é feito para o escoamento a elevados números de Reynolds, ocorrendo, neste caso, a produção de pequena quantidade de vapor.

O núcleo líquido, na região central do tubo, se encontra em regime turbulento, enquanto que a camada de vapor, adjacente à parede, será considerada como tendo característica laminar. Esta suposição pode ser considerada válida para o caso de uma película muito fina, de acordo com Hsu et. al. (1988).

O coeficiente de transferência de calor pode ser determinado na forma

$$h = \frac{k_v}{\delta} \quad (1)$$

bastando conhecer a espessura δ da película de vapor; k_v é a condutividade térmica do vapor.

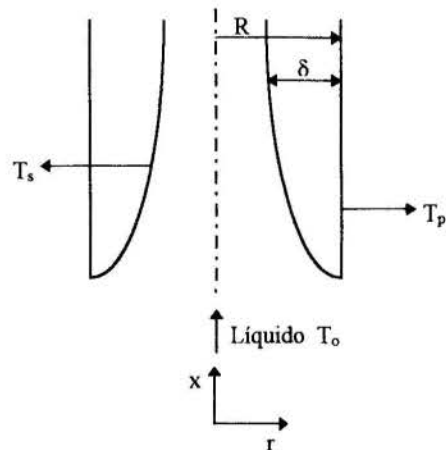


Figura 1 - Sistema de coordenadas

O método utilizado consiste na solução das equações da energia para as fases do líquido e vapor. Fazendo-se um balanço térmico na interface, obtém-se uma equação que fornece a espessura da película de vapor em função da posição axial do tubo. Foram feitas simplificações para que se obtivesse soluções analíticas dos perfis de temperatura, para então ser feito o acoplamento na interface.

O líquido entra no tubo com uma temperatura T_o , abaixo da temperatura de saturação T_s , sendo T_p a temperatura da parede do tubo.

Considerando um gradiente de pressão no fluido, a equação da quantidade de movimento para a película de vapor, em coordenadas cartesianas (para a película de vapor extremamente fina pode-se usar coordenadas cartesianas em lugar de coordenadas cilíndricas) é:

$$\mu_v \frac{\partial^2 u_v}{\partial y^2} = \frac{\partial P}{\partial x} - (\rho_l - \rho_v) g \quad (2)$$

e considerando uma tensão cisalhante τ_i na interface líquido-vapor, sendo u_v a velocidade do vapor, μ_v a viscosidade do vapor e ρ_l e ρ_v as densidades do líquido e do vapor, respectivamente.

A velocidade média do vapor é dada por, Souza (1994),

$$U_v = \frac{\tau_i \cdot \delta}{2 \mu_v} \quad (3)$$

Para a determinação da tensão τ_i , foi utilizado um fator de atrito para o escoamento bifásico, sugerido por Wallis (1970), com correções que levam em consideração o fenômeno de mudança de fase (parâmetro c),

$$f_l = c \cdot 0,093 \text{Re}_l^{1/4} \left(1 + 360 \frac{\delta}{D} \right) \quad (4)$$

sendo $\text{Re}_l = \frac{D u_l \rho_l}{\mu_l}$ o número de Reynolds do líquido, U_l velocidade média do líquido, μ_l viscosidade do líquido e D o diâmetro interno do tubo.

Está sendo considerado o escoamento do líquido em "plug flow" com velocidade média U_l .

A equação da energia para o escoamento da película de vapor, tendo característica laminar, pode ser simplificada para

$$u_v \frac{\partial T_v}{\partial x} = \alpha_v \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_v}{\partial r} \right) \quad (5)$$

com as condições de contorno

$$\begin{aligned} T_v &= T_p & \text{em } r &= R, & \text{para todo } x > 0 \\ T_v &= T_s & \text{em } r &= R - \delta, & \text{para todo } x > 0 \end{aligned}$$

e condição inicial

$$T_v = T_s \quad \text{em } x = 0, \quad \text{para } R - \delta < r < R$$

A equação da energia para a fase líquida em escoamento turbulento fica na forma

$$u_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = (\alpha_l + \epsilon_t) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) \quad (6)$$

com u_l a velocidade do líquido, α_l a difusividade térmica do líquido e ϵ_t a difusividade térmica turbulenta.

Com as condições de contorno

$$\begin{aligned} T_l &= T_s & \text{em } r &= R - \delta, & \text{para todo } x > 0 \\ \frac{\partial T_l}{\partial r} &= 0 & \text{em } r &= 0, & \text{para todo } x > 0 \end{aligned}$$

e condição inicial

$$T_l = T_o \quad \text{em } x = 0, \quad \text{para } 0 \leq r \leq R - \delta$$

A equação constitutiva para a difusividade térmica turbulenta é aproximada segundo Fung e Groeneveld (1982),

$$\epsilon_t = 0,08 U_l \left(\frac{1}{2} \delta \right) \quad (7)$$

A espessura da película de vapor é obtida através do salto do fluxo interfacial,

$$-k_v \frac{\partial T_v}{\partial r} = -\rho_l c_{pl} (\alpha_l + \epsilon_t) \frac{\partial T_l}{\partial r} + \frac{d\dot{m}_v}{dx} \lambda \quad (8)$$

onde c_{pl} é o calor específico do líquido e λ o calor latente de vaporização.

A substituição dos perfis de temperatura e do fluxo mássico evaporado \dot{m}_v fornecerá uma equação diferencial ordinária para a película.

As equações anteriores podem ser expressas na forma adimensional introduzindo-se novas variáveis.

Para a fase líquida

$$\Delta^2 \frac{\partial \theta_l}{\partial \xi^2} = \phi_l \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \theta_l}{\partial \eta} \right) \quad (9)$$

com

$$\begin{aligned} \theta_l &= \frac{T_l - T_s}{T_p - T_s} & \xi &= \frac{\alpha_l L \chi}{R^2 U_l} \\ \eta &= \frac{r}{R - \delta} & \phi_l &= \frac{\alpha_l + \epsilon_t}{\alpha_l} \\ \Delta &= \frac{R - \delta}{R} & \chi &= \frac{x}{L} \end{aligned}$$

onde a interface será representada por $\eta = 1$ e a parede do tubo por $\eta = \frac{1}{\Delta}$. Esta equação deve ser resolvida para

$$\begin{aligned} \theta_l &= 0_0 & \text{em } \xi &= 0 \\ \frac{\partial \theta_l}{\partial \eta} &= 0 & \text{em } \eta &= 0 \\ \theta_l &= 0 & \text{em } \eta &= 1 \end{aligned}$$

Considerando a espessura adimensionalizada Δ constante, o que é razoável para pequenas taxas de evaporação, pode-se ter uma solução analítica, Özisik (1980),

$$\theta_l = 2 \theta_0 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_0(\lambda_m \tau)}{\lambda_m J_1(\lambda_m)} e^{-\frac{\lambda_m^2 \xi}{\Delta^2}} \quad (10)$$

onde λ_m são raízes positivas de $J_0(\lambda_m) = 0$.

Para a película de vapor

$$\Delta^2 \frac{\partial^2 \theta_v}{\partial \zeta^2} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \theta_v}{\partial \eta} \right) \quad (11)$$

com

$$\theta_v = \frac{T_v - T_s}{T_p - T_s} \quad \zeta = \frac{\alpha_v L \chi}{R^2 U_v}$$

Esta equação deve ser resolvida para

$$\begin{aligned} \theta_v &= 0 & \text{em} & \zeta = 0 \\ \theta_v &= 0 & \text{em} & \eta = 1 \\ \theta_v &= 1 & \text{em} & \eta = \frac{1}{\Delta} \end{aligned}$$

Para a obtenção de uma solução analítica foi considerado $u_v = U_v$. Esta solução é obtida de modo análogo ao apresentado por Carslaw e Jaeger (1959),

$$\theta_v = \frac{\ln \eta}{\ln (1/\Delta)} - \pi \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{J_0(\beta_m) J_0(\beta_m/\Delta)}{J_0^2(\beta_m) - J_0^2(\beta_m/\Delta)} \cdot [J_0(\beta_m \eta) Y_0(\beta_m) - Y_0(\beta_m \eta) J_0(\beta_m)] e^{-\frac{1}{\Delta^2} \beta_m^2 \zeta} \right] \quad (12)$$

com β_m sendo as raízes positivas da equação $J_0(\beta_m) Y_0(\beta_m/\Delta) - J_0(\beta_m/\Delta) Y_0(\beta_m) = 0$. As raízes desta equação foram determinadas seguindo a metodologia de Abramowitz e Stegun (1965).

Estas equações foram desenvolvidas de forma geral e no nosso caso específico, na unidade experimental construída, o líquido entrava à temperatura de saturação, não existindo, então, o 1º termo do lado direito da Eq. (8). Resulta, então, a equação para a distribuição da espessura da película

$$\begin{aligned} \frac{-R^3}{L} \Delta \left[(1-\Delta) + \frac{540}{D} (R - 2R\Delta + R\Delta^2) \right] \frac{d\Delta}{d\chi} = \\ = \frac{2k_v \mu_v (T_p - T_s)}{c \cdot 0,0935 Re_1^{-1/4} \rho_l \rho_v U_1^2 \lambda} \left[-\frac{1}{\ln \Delta} - \right. \\ \left. - \pi \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\beta_m J_0(\beta_m) J_0(\beta_m/\Delta)}{J_0^2(\beta_m) - J_0^2(\beta_m/\Delta)} \cdot [J_0(\beta_m) Y_1(\beta_m) - Y_0(\beta_m) J_1(\beta_m)] e^{-\frac{\alpha_v \beta_m^2 L \chi}{\Delta^2 R^2 U_v}} \right] \quad (13) \end{aligned}$$

com a condição $\Delta = 1$ em $\chi = 0$.

DESENVOLVIMENTO EXPERIMENTAL

Os dados experimentais foram obtidos em uma unidade consistindo de um evaporador com uma bomba centrífuga para circulação forçada do líquido. A seção de aquecimento, onde ocorre a mudança de fase, é formada por um tubo de aço inoxidável 304, com 1 m de comprimento, diâmetro interno de

9,4 mm. O tubo foi aquecido externamente por um queimador de gás GLP, tendo 50 orifícios direcionadores de chama.

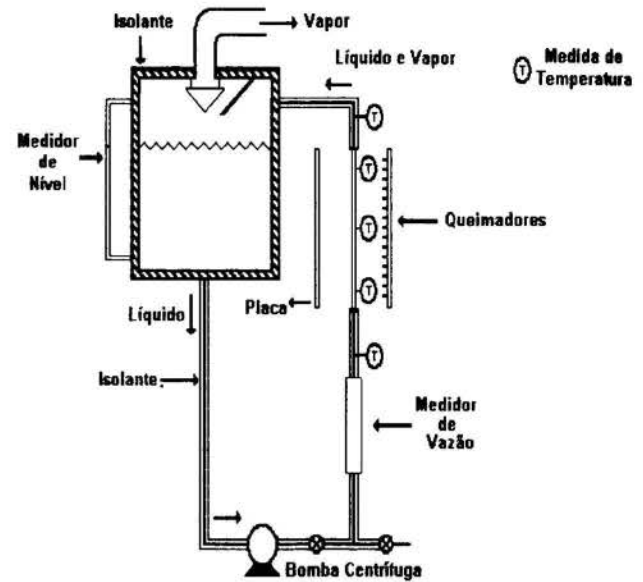


Figura 2 - Esquema da unidade experimental

As medidas de temperatura da parede do tubo foram feitas com três termopares chromel-alumel, igualmente espaçadas ao longo do tubo. Os termopares foram colocados em pequenas cavidades na parede do tubo, sendo envolvidos por tubos de 10 cm de comprimento, soldados no tubo de 1 m, para evitar a influência da radiação.

O coeficiente de transferência de calor experimental é

$$h_{exp} = \frac{q}{A (T_p - T_s)} \quad (14)$$

onde A é a área lateral interna do cilindro e $q = \dot{m}_w \lambda$, com a quantidade de água evaporada, \dot{m}_w , obtida pela leitura da diferença de nível no tambor do evaporador.

Os experimentos foram realizados com o líquido entrando no tubo à temperatura de saturação. A água foi usada como fluido de trabalho. A tabela 1 mostra os valores das temperaturas da parede do tubo para cada um dos números de Reynolds utilizado,

Tabela 1 - Temperatura da parede do tubo em função do número de Reynolds do líquido - Medidas experimentais

Re _l	60.000	90.000	120.000	150.000	180.000
T _p (°C)	270,0	263,5	255,0	245,0	240,0

Estes valores são próximos daqueles de Lee e Kim (1987) que obtiveram a ebulição em película, com escoamento anular invertido, tendo temperaturas da parede na faixa de 290 °C.

A tabela 2 apresenta as espessuras médias experimentais da película de vapor para cada respectivo número de Reynolds

Esta tabela mostra que a película de vapor é extremamente fina, o que está de acordo com as hipóteses consideradas.

Tabela 2 - Espessura média experimental da película de vapor

Re _l	60.000	90.000	120.000	150.000	180.000
δ (m)	5,71x10 ⁻⁵	5,31x10 ⁻⁵	5,04x10 ⁻⁵	4,84x10 ⁻⁵	4,65x10 ⁻⁵

Na tabela 3 estão representados os coeficientes de transferência de calor para cada uma das medidas experimentais e os correspondentes valores médios.

Tabela 3 - Coeficientes de transferência de calor em função do número de Reynolds do líquido

Coeficientes Experimentais (W/m ² °C)						
Re _l	h ₁	h ₂	h ₃	h ₄	h ₅	h _{médio}
60.000	522,0	526,0	518,0	530,0	532,6	525,7
90.000	565,0	567,0	561,5	557,0	574,0	564,9
120.000	595,6	603,5	588,9	585,8	602,3	595,2
150.000	620,0	615,8	616,6	622,5	623,5	619,7
180.000	641,4	638,9	655,6	650,4	639,6	645,2

Observa-se das medidas experimentais que a altas vazões ocorre uma pequena variação na espessura da película de vapor. O coeficiente de transferência de calor, nesta faixa estudada, aumenta pouco com a elevação do Reynolds. Isto ocorre porque a espessura é muito fina e qualquer aumento na vazão ocasiona pouca interferência na película.

Esta conclusão é coerente com aquela obtida por Fung et. al. (1979), que fizeram comentários sobre tal condição da película, porém como utilizavam vazões de líquido relativamente baixas, os seus resultados não eram conclusivos.

CONFRONTO TEÓRICO-EXPERIMENTAL

A comparação entre o coeficiente de transferência de calor calculado e o experimental é apresentada na figura 3.

Para o coeficiente teórico foi usado uma valor de $c=3,0$ no cálculo da tensão cisalhante interfacial, o que está de acordo com os dados de Fung e Groeneveld (1982). A Eq. (13) foi resolvida utilizando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Foi determinado o perfil da espessura da película de vapor em função da posição axial do tubo, e então a espessura média foi utilizada para o cálculo do coeficiente de transferência de calor. A solução foi obtida usando-se um termo da série, uma vez que os demais não apresentaram influência. O coeficiente representado na figura 3 é combinado com o coeficiente h_{rad} , Souza (1994), que leva em consideração a transferência de calor radiante através da película de vapor. Embora o coeficiente h_{rad} , na faixa de temperatura estudada, seja pequeno ($\approx 5\%$ em relação ao coeficiente convectivo), a sua colaboração é importante no confronto com os dados experimentais.

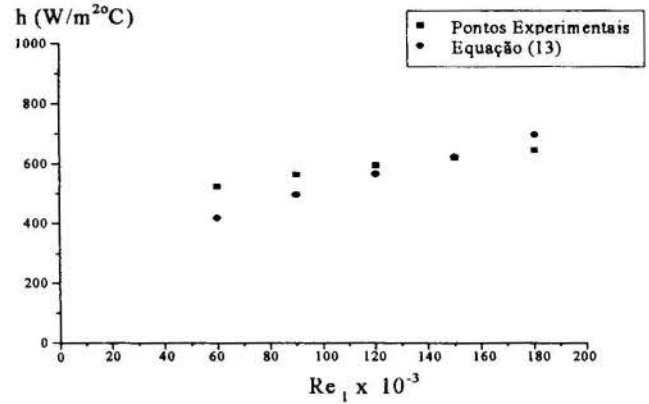


Figura 3 - Confronto teórico-experimental do coeficiente de transferência de calor

A solução da Eq. (13) utilizando a tensão cisalhante interfacial e um perfil de temperatura não-linear, em coordenadas cilíndricas, apresenta bons resultados no confronto com os dados experimentais.

CONCLUSÕES

A unidade piloto construída permitiu que fossem obtidos dados com números de Reynolds do líquido entre 60.000 e 180.000, região não devidamente explorada na literatura. O vapor foi obtido com concentrações da ordem de 10%, o que está na faixa do escoamento anular invertido. A consideração da película de vapor com característica laminar se mostrou razoável, devido à película ser extremamente fina. A tensão cisalhante interfacial exerce importante influência no escoamento bifásico, o que foi confirmado com os bons resultados no confronto com os dados experimentais.

REFERÊNCIAS

- Abramowitz, M. and Stegun, I., 1965, "Handbook of Mathematical Functions", Dover, New York.
- Carslaw, H.S. and Jaeger, J.C., 1959, "Conduction of Heat in Solids", Oxford University Press, Second Edition.
- Fung, K.K.; Gardiner, S.R.M. and Groeneveld, D.C., 1979, "Subcooled and Low Quality Flow Film Boiling of Water at Atmospheric Pressure", Nuclear Engineering and Design, 5, pp. 51-57.
- Fung, K.K. and Groeneveld, D.C., 1982, "A Physical Model of Subcooled and Low Quality Film Boiling of Water in Vertical Flow at atmospheric Pressure", Proceedings of the Seventh International Heat Transfer Conference, Vol. 4, pp. 381-386.
- Hsu, C.; Guo, Z.; Yan, A. and Bi, H., 1988, "Low Pressure and Subcooled Water Flow Film Boiling Research by Visual Method", Particulate Phenomena and Multiphase Transport, Edited by T. Nejat Veziroglu, Hemisphere Publishing Company.

Ishii, M. and De Jarlais, G., 1987, "Flow Visualization Study of Inverted Annular Flow of Post Dryout Heat Transfer Region", Nuclear Engineering and Design, 99, pp.187-199.

Lee, Y. And Kim, K.H., 1987, "Inverted Annular Flow Boiling", Int. J. Multiphase Flow, 13, 3, pp. 345-355.

Özisik, M.N., 1980, "Heat Conduction". Wiley, New York.

Souza, J.A.R., 1994, "Ebulição em Película em Tubos Cilíndricos a Elevados Números de Reynolds", Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.

Wallis, G.D., 1970, "Annular Two-Phase Flow, Part I: A Simple Theory; Part 2 : Additional Effects", J. of Basic Eng., March.

ABSTRACT

The aim of this work is to study heat transfer phenomena in vapor-liquid systems for high Reynolds number.

The mechanism of film boiling in inner vertical tubes with ascending flow is analysed. The study of the phase transition front allows the determination of the thickness of the vapor film and heat transfer coefficient.

The theoretical model developed in the present study incorporates the effects of interfacial shear stress, liquid velocity and the radiation heat transfer across the vapor film.

The results derived from the theoretical model are compared with experimental data collected from a pilot unit especially built for this work.

TWO-PHASE FLOW INSTABILITIES IN BOILING SYSTEMS

Sadik Kakaç, Claudia O. Gavrilescu and Elcio Nogueira

Department of Mechanical Engineering

University of Miami

Coral Gables, FL 33124, USA

SUMMARY

Results of density-wave oscillations in an upflow boiling system using water are given. The limiting heat flux and quality of the onset of these oscillations were determined and their dependence on system pressure, mass flux, inlet subcooling and exit restriction was found. Low frequency oscillations in a horizontal system are also predicted. The steady-state and transient system characteristics are determined numerically. Satisfactory agreement with experiments is obtained.

INTRODUCTION

Two-phase flow instabilities have been observed to occur in many industrial situations like refrigeration systems, turbo-machinery, and power plant heat exchangers. Prediction of flow parameters such as steady-state pressure-drop characteristics and stability boundaries for oscillations is very crucial in the design of two-phase flow equipment. Thermal oscillations are undesirable as they can cause problems of system control, and can lead to tube failure due to wall temperature increase. They can also lead to fatigue failure of the tube caused by a continuous cycling of the wall temperature. It is clear from these problems that plant equipment should possess an adequate margin of safety against oscillations. Stenning (1964) investigated and identified three types of dynamic instabilities, namely, density-wave type, pressure-drop type, and thermal oscillations in a single channel upflow boiling system. Daleas and Bergles (1965) investigated the effect of the compressibility of upstream volumes of subcooled water on system instability. They investigated pressure-drop instabilities in a single horizontal tube system. Kakaç et al. (1977) identified dynamic oscillations and conducted experiments with various heat inputs, inlet temperatures and different size heater. Various reviews of two-phase flow dynamic instabilities are cited in Boure et al. (1973) and in Lahey and Drew (1980).

The objective of this work is to study theoretically and experimentally the steady-state and oscillatory characteristics of flow boiling in single horizontal and vertical channels two-phase flows. The Drift-Flux model is used for prediction of amplitudes and frequencies of oscillations and its results are compared with the experimental findings.

EXPERIMENTAL STUDYDescription of the Horizontal Experimental System.

Two-phase flow of R-11 is studied and different flow

parameters are measured. The steady-state characteristics are obtained via pressure-drop vs. mass flow rate measurements. Different heat inputs and exit restriction diameters are considered. As part of the oscillations (unsteady flow problem) study, a surge-tank was used to simulate system compressible volume. The change in surge-tank level coincides with the occurrence of oscillations. A pressure transducer is used to measure the variations in pressure.

Figure 1 is a schematic diagram of a multi-channel in-tube boiling horizontal system experimental apparatus which is used in this study. In the present study, only single-channel flow is studied.

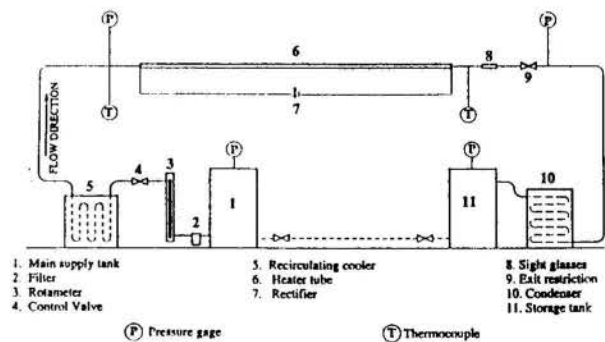


Figure 1-Schematic diagram of the horizontal system

The following flow parameters were used: system pressure 30-100 bar; mass velocity 100-1100 kg/m²s; inlet subcooling 0-24°C; exit restriction tube diameter ratio, β , 0.24; heat input 1000-2000 W. R-11 was controlled by the main control valve. The surge tank is a four inch diameter, ten inch high copper cylinder with caps on both ends. Pressure gage and sight glass are mounted on it to visualize the pressure and liquid level inside. The main function of the surge tank is to provide a compressible volume upstream of the system. The test section tube ($L=1060$ mm, $d_i=10.9$ mm, $d_o=12.7$ mm) is thermally insulated and electrically heated

and the heat input can be regulated by a DC rectifier. After it exits the test section, the two-phase mixture is sent to a chiller where it condenses and the condensed liquid is stored in the recovery tank.

Temperature Measurement: Temperature measurements were made using E-type thermocouple wires of 0.01 inch diameter. The uncertainty associated with temperature measurement was 0.375%.

Pressure Measurement: Pressure signals are measured at the following locations: inlet and outlet plenum, before inlet plenum, after restriction valve, before and after the heater. Pressures before and after the heater are sensed by both pressure gages and transducers, while the others are measured by gages only. The uncertainty associated with the pressure transducer was 5.1%.

Flow Measurement: The mass flow rate in the system was regulated by the control valve. Two measuring devices, therefore, are used to monitor and control the flow rate, i.e., rotameter and differential pressure transducer. The uncertainty of flow rate measurement was 2.64%.

Description of the Vertical Experimental System. The set-up shown in Fig. 2 was used to investigate the basic mechanisms of different types of oscillations and effects of various parameters on these oscillations. Demineralized and degasified water was used as the test fluid. The following flow parameters were used: system pressure 30-100 bar; mass velocity 600-1300 kg/m²s; inlet subcooling 10-90°C; exit restriction tube diameter ratio, β , 0.33, 0.417, 0.5; heat flux 0-700 kW/m².

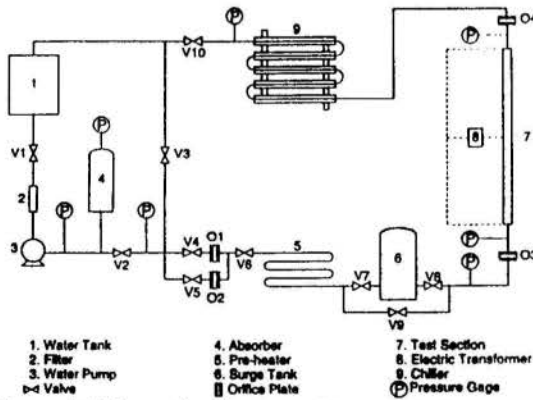


Figure 2-Schematic diagram of the vertical system

Water was heated to the desired inlet temperature in the pre-heater 5, and then heated again in the test section till boiling occurred. Two-phase mixture was sent back to water tank 1 through a chiller 9, where it was condensed back to below 50°C.

The surge tank was charged with nitrogen which formed a compressible volume for the test section.

The test section was made of stainless steel tube (Ø16mm×2mm) with a heated length of 3.8 m. Heating was realized by applying AC power directly to the tube, which was thermally insulated and electrically isolated from the rest of the system.

An orifice plate O4 was installed after the test section to form the exit restriction. Three plates with different orifice diameters were used in order to study the effect of the exit restriction on boiling instabilities.

Temperature measurement: For temperature measurements, standard chromel-constantan thermocouples were used. A typical uncertainty associated with temperature measurement was 0.375%.

Flow rate measurement: Measurement of flow rate was made using differential pressure transducers with a response time of the order 0.1 s. They were considered accurate enough for dynamic measurements. A typical density-wave oscillation period encountered in the study was 1.5 seconds. The uncertainty of flow rate measurement was 2.64%.

Pressure measurement: Pressures were measured by Bourdon-type pressure gauges and a strain-gauge type pressure transducer. The uncertainty associated with this type of pressure transducer was 5.1%.

EXPERIMENTAL STUDY OF THE VERTICAL SYSTEM

Density-wave type oscillations have been observed to occur at low mass flow rates in the positive slope region along the steady-state characteristic curves, Kakaç and Liu (1991). The system pressure drop was defined as the pressure drop from the surge tank to the exit of the exit restriction.

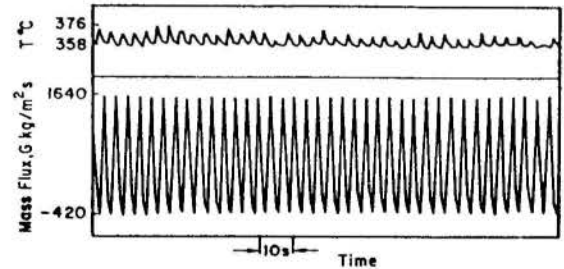


Figure 3- Typical density-wave type oscillation ($p=100$ bar, $G=937.5$ kg/m²s, $T_{sub}=90$ °C, $Q=580.5$ kW/m²)

At low vapor qualities, the vertical system was stable. As the heat input was increased and the quality increased to a certain value in the test section, oscillations of mass flux, inlet pressure and wall temperature with periods of 1.5-4.5 seconds were observed. These are density-wave type oscillations. At first, the period of oscillation was about 4.5 seconds, and the oscillation amplitude of mass flux was quite large. The oscillation period and amplitude decrease with increase in heat input. During density-wave type oscillations, the mass flux oscillation was always accompanied by a wall temperature oscillation. The amplitudes of the wall temperature oscillations were in the range of 10-30°C, and tended to increase as heat input increased. A typical density-wave type oscillation is shown in Fig. 3. Density-wave type oscillations

generally have higher frequencies and smaller amplitudes compared to other types of oscillations, Kakaç and Liu (1991).

The Effect of Parameters. The threshold values, i.e., the limiting heat flux and quality of the density-wave type oscillations were found to be affected by the following parameters in different ways.

System pressure. It was shown from this study that at higher system pressures, the values of limiting heat flux and quality were increased as shown in Fig. 4. This fact actually tells that the system becomes more stable, since the system can sustain higher heat input without experiencing density-wave type oscillations.

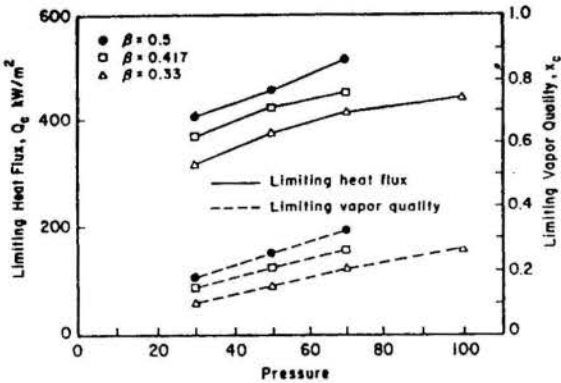


Figure 4-The effect of system pressure ($G=937.5 \text{ kg/m}^2\text{s}$, $T_{\text{sub}}=60 \text{ }^\circ\text{C}$)

Inlet mass flow rate. The threshold of the density-wave type of oscillations was also obtained as a function of mass flow rate under different system pressures as shown in Fig. 5. The limiting heat flux increases as mass flux increases. This leads the two-phase flow system to become more stable.

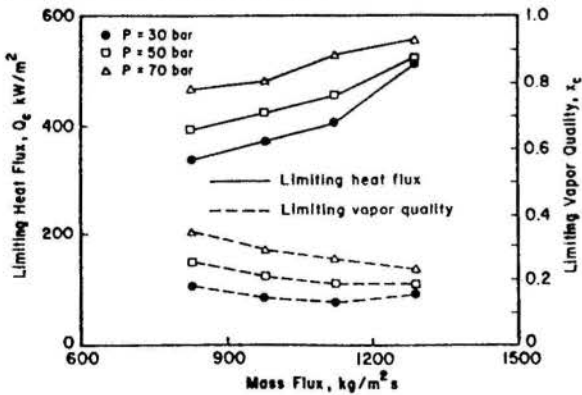


Figure 5-The effect of inlet mass flow rate ($T_{\text{sub}}=60 \text{ }^\circ\text{C}$, $\beta=0.417$)

Inlet subcooling. The effect of the inlet subcooling on the threshold values is quite complex. Under lower system pressure (30 bars), this effect is monotonous. Both limiting heat flux and quality increase almost linearly with increase in subcooling as shown in Fig. 6.

Under higher system pressures (50 bars and above), however, the relationship becomes multi-valued. Minima on both curves are found to occur at a subcooling of $30 \text{ }^\circ\text{C}$. With increased inlet subcooling, the single liquid phase region expands downstream, which makes the system more stable. Meanwhile, the average vapor quality in the heater decreases, which in turn reduces the response time for disturbances, the mass flux can therefore undergo oscillations more easily.

Exit restriction. The presence of the exit restriction increases the pressure drop in the two-phase flow region. When the orifice diameter decreases, the system becomes less stable (see Fig. 4). The oscillation periods decrease with increase in heat flux and orifice diameter, and increase with increase in inlet subcooling and system pressure.

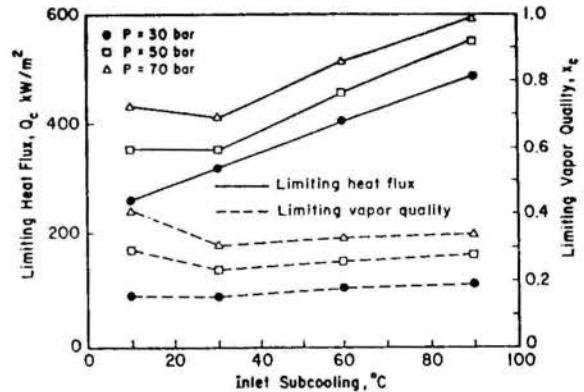


Figure 6-The effect of inlet subcooling ($G=937.5 \text{ kg/m}^2\text{s}$, $\beta=0.5$)

Prediction of Threshold of Density-Wave Type Oscillations.

It is clear from the experimental studies that the effects of various system parameters on limiting heat flux and quality are quite complex. While further and extensive studies are needed, a relatively simple correlation to predict the threshold of this type of oscillation can be obtained from the present experimental study.

By non-dimensionalizing the energy equation for homogeneous two-phase flow, a dimensionless number N_Q can be obtained, Wang et al. (1994):

$$N_Q = \frac{4Q_{s0}L_h}{h_1Gd} \tag{1}$$

where G is the mass velocity, d is the tube diameter and h is the enthalpy. By replacing Q_{s0} , which is heat flux of stable flow by the limiting heat flux value, Q_c , and h_1 by $(h_s - h_0)$, we obtain:

$$N_Q = \frac{4Q_cL_h}{(h_s - h_0)Gd} \tag{2}$$

N_Q can therefore be considered as a ratio relating the total heated length L_h to the length occupied by the single liquid phase in the test section. It also shows the relationship between limiting heat flux and fluid inlet subcooling.

Multiplying both sides of Eq. (2) by the limiting quality x_c , we have:

$$x_c N_Q = x_c \frac{4Q_c L_h}{(h_s - h_0)Gd} \quad (3)$$

Another dimensionless number N_p was derived from the dimensionless form of the momentum equation for homogeneous two-phase flow, Wang et al. (1994):

$$N_p = \frac{P_e \rho_l}{G^2 L_h} \quad (4)$$

where P_e is the exit pressure and ρ_l the liquid density. This number was used to show the effects of pressure and mass flux on the density-wave type oscillations.

In addition, the thermodynamic properties of the fluid were also taken into account:

$$N_{TS} = \frac{h_s - h_0}{\Delta h_v} \quad (5)$$

which is used to consider the effect of inlet subcooling.

A simple correlation was thus obtained by introducing the following relationship among Eqs. (3), (4) and (5):

$$x_c N_Q = A + B \frac{N_p}{N_{TS}} \quad (6)$$

In practice, the quality, x , in the system is to be found from thermal equilibrium condition, and N_Q is to be calculated from Eq. (1). The product of x and N_Q is then compared with the value calculated from Eq. (6). If $x N_Q > x_c N_Q = A + B N_p / N_{TS}$, the system is in the region where density-wave type oscillations can occur. Otherwise, the system will not experience this type of oscillations.

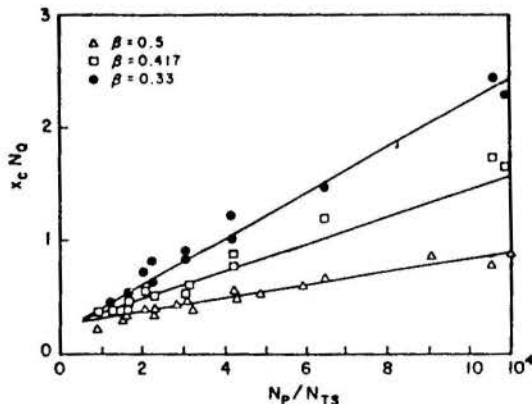


Figure 7: Comparison of correlation with experiments

The constants A and B in Eq. (6) are found to be functions of the exit restriction, Wang et al. (1994).

Experimental data and those calculated from the above correlation are plotted in Fig. 7. The linear relationship suggests that correlation (6) can be used satisfactorily to predict the threshold values of heat flux and quality of the density-wave type oscillations in a high pressure upflow boiling system under the present experimental conditions.

THEORETICAL STUDY

In the most general formulation of the two-phase flow problem, the conservation equations are written separately for each of the phases, hence it is called as a "separated flow model". Various forms of the conservation equations have been proposed by Ishii (1977), Yadigaroglu and Lahey (1976), Zuber and Findlay (1965). In most of the practical problems, however, one dimensional time-dependent equations are used. To close the set of six conservation equations (three for each phase), seven constitutive laws are required - friction and heat transfer for the two phases at the tube wall, and three conservation equations for shear force, mass balance and energy balance at the interface of the two phases. The requirement of seven constitutive laws makes the use of this model very difficult. In order to reduce the complexity involved in the formulation of the problem in its most general form, as noted above, several models have been suggested, which attempt at correlating different parameters of the two-phases, i.e. drift velocity, void fraction, slip ratio, etc. For a number of two-phase flow regimes, such as annular or slug flow, the homogeneous model does not reflect the physics of the phenomena, since the assumption of equality of the phase velocities is not justifiable. The drift-flux formulation which has gained much acclaim in the last decade, takes the relative velocity between the phases into account, while assuming thermodynamic equilibrium, Zuber and Findlay (1965). In addition to the assumption used in the development of the homogeneous model, the pressure and other fluid properties are assumed to be uniform along the cross-section.

SOLUTION PROCEDURE

The study of two-phase flow dynamic instabilities, in general, requires the knowledge of the steady-state pressure-drop versus mass flow rate characteristics. These relationships, which are the steady-state solutions to the conservation equations, are also used to determine the initial conditions for oscillations. Therefore, initial solutions are obtained for various heat inputs and/or inlet subcoolings under steady-state conditions.

By using the two-phase flow governing equations and the Zuber-Findlay model, the steady-state characteristics needed for the transient analysis were determined using finite-difference approximations, Padki

and Liu (1991). In writing the finite-difference equations five distinct regions are identified along the system, each having different characteristics, Kakaç and Liu (1991).

Time-Dependent Solutions - Pressure-Drop Type Oscillations. Using the method and results developed for steady-state characteristics, the time dependent behavior of the system under consideration is predicted for pressure-drop type oscillations.

Model for Pressure-drop Type Oscillations. Pressure-drop oscillations that occur in two-phase flow systems are triggered by a small instability in the negative slope region of the steady-state characteristics curve. The surge tank is an important dynamic component of the system that serves as an "external compressible volume". These oscillations have relatively low frequencies, and their periods are usually much larger than the residence time of single-phase fluid particle in the system. Consequently, the transient operating points can be obtained as a series of steady-state points. For the surge tank, the continuity equation can be written as, Padki and Liu (1991):

$$\frac{dP_s}{dt} = P_s^2 \frac{(G_i - G_o) A_p}{P_{so} V_o \rho_1} \quad (7)$$

The momentum equation for the mass velocity, G_i , between the main tank and the surge tank is written as:

$$G_i = \left[\frac{(P_i - P_s) \rho_1}{K_1} \right]^{1/2} \quad (8)$$

where K_1 is the inlet restriction coefficient of the valve between the main and the surge tanks. The above expression has been experimentally determined as:

$$G_i = \left[\frac{(P_i - P_s) \rho_1}{325} \right]^{1/2} \quad (9)$$

The steady-state solution, which is assumed to be valid for the section of the system following the surge tank can be expressed as:

$$G_o = G_o(P_s, Q_1) \quad (10)$$

Equations (7), (8), and (9) are approximated by the method of forward finite differences.

Scheme of Solution. The calculations start with given fluid temperature and pressure. The initial flow parameters and properties, corresponding to the given inlet mass velocity and heat input, are calculated using the steady-state program. These results are saved as the initial conditions at the stable operating point. The system is perturbed by increasing the pressure P_s in the surge tank. The inlet mass velocity for the surge tank is calculated using Eq. (8). Calling the steady-state program again, the mass velocity and other flow parameters and properties along the system are computed using Eq. (10), corresponding to the increased surge tank pressure. Since the pressure in the surge tank is increased, the flow rate through the heater decreases. The heat transfer coefficient and the heat input into the fluid also change. Using Eq. (7), the pressure P_s in the surge tank is calculated at the next step. As the exit

mass velocity G_o from the surge tank decreases more than the mass velocity G_i into the surge tank, P_s increases further during the time step Δt . This procedure is repeated in the successive time steps. In the successive time steps, the pressure difference between the surge tank and the system exit increases along the negative slope, until the top of one of the steady-state mass flow rate versus pressure-drop curves is reached, depending on the instantaneous heat input into the fluid. Then the calculation point leaps from the top of the curve to the liquid region automatically. The flow rate through the heater increases. The surge tank pressure decreases with increasing flow rate through the heater, since the exit flow rate is larger than the inlet flow rate. The pressure in the surge tank decreases till the bottom of one of the steady-state mass flow rate versus pressure-drop curves. Then another flow excursion takes place from the liquid region to two-phase or vapor region. These limit cycles are then repeated.

COMPARISON OF THEORETICAL AND EXPERIMENTAL RESULTS

We shall now examine the results from both the theoretical study and experimental work performed on vertical and horizontal flow systems.

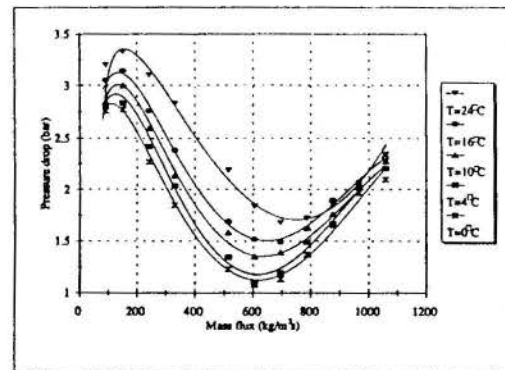


Figure 8-Steady-state characteristic curve of the horizontal system ($Q=2000$ W, $\beta=0.24$)

Time-Dependent Results. While Figure 8 shows typical steady-state characteristic curves for the horizontal system, Figure 9 shows typical recordings of pressure-drop oscillations occurring in the horizontal flow system.

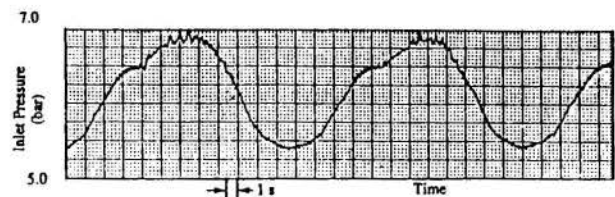


Figure 9-Pressure-drop type oscillations in horizontal system ($Q=2000$ W, $m=0.0717$ kg/s)

The rising portion of the pressure-drop oscillations corresponds to an increasing vapor flow that carries away more heat, thus lowering the wall temperature. The decreasing portion corresponds to a decreasing liquid mass flow rate that convects progressively lower heat away from the wall. This causes the temperature to increase. The experimental and theoretical results shown exhibit this characteristic clearly and are themselves in good agreement. The periods, amplitudes, as well as the waveforms; of the oscillations are reasonably well predicted by the theory.

Table 1-Comparison of experimental and theoretical results; pressure-drop type oscillations in a horizontal system (R-11, $d_i=8.34$ mm, $d_o=10.6$ mm, $m=0.0717$ kg/s)

Exit restriction mm	Heat input (W)	Period (s)	Ampl. (bar) Exper.	Period (s)	Ampl. (bar) Theor.
2.64	2000	18	1.5	24	1.9
2.64	2500	16	2.2	18	2.0
3.175	2000	13	1.1	12	1.25
3.175	2500	14	1.2	12	1.4

Table 2-Comparison of experimental and theoretical results; pressure-drop type and thermal oscillations in a vertical system (R-11, $d_i=7.5$ mm, $d_o=9.5$ mm)

Heat input (W)	Flow rate (kg/s)	Oscillation type	Period (s)	Ampl Exp.	Period (s)	Ampl Theo.
800	7.31	Heater inlet press.	50	0.96 bar.	57	0.94 bar
		Heater inlet temp..	50	99.8° C	57	96.0° C
600	7.31	Heater inlet press.	25	0.50 bar	30	0.69 bar
		Heater inlet temp..	25	49.2 °C	30	40.0° C
800	11.89	Heater inlet press	28	0.89 bar	27	1.14 bar
		Heater inlet temp	28	65.0° C	27	75.0° C

Tables 1 and 2 summarize the comparison between the experimental and theoretical results. The pressure-drop oscillations result through the interaction between the flow and the compressible volume in the surge-tank. Under these experimental conditions, high frequency density-wave oscillations also occur and are superimposed on the pressure-drop oscillations. The present model can predict the pressure-drop oscillations quite well.

CONCLUSIONS

At a given inlet subcooling, the amplitudes and periods of oscillation increase with increasing heat input.

At a given heat input rate, the amplitudes and periods of the oscillations increase with increasing inlet subcooling.

The periods and amplitudes of the oscillations increase with decreasing mass flow rate at the initial operating point on the negative slope.

The steady-state characteristics and the oscillations predicted with the use of the drift-flux model are in reasonably good agreement with experimental results.

In a boiling two-phase flow system, the occurrence of the density-wave type oscillations is affected by system pressure, inlet subcooling, mass flux and the size of exit restriction. These effects were given a full discussion.

The period of the density-wave type oscillation is related to the residence time of the mixture particles traveling along the system. The amplitude of mass flow rate oscillation is quite large and flow reversal also occurs during the oscillations.

REFERENCES

- J.A. Boure, A.E. Bergles, & L.S. Tong, (1973), Review of two-phase flow instability, Nucl. Eng. & Des., 25, 165.
- R.S. Daleas & A.E. Bergles, (1965), Effects of upstream compressibility on subcooled critical heat flux, ASME Preprint 65-HT-67.
- M. Ishii, (1977), Drift-flux model and derivation of kinematic constitutive laws, Two-phase-flows and Heat Transfer, Eds.: S. Kakaç, F. Mayinger and T.N. Veziroglu, Hemisphere, New York.
- S. Kakaç, T.N. Veziroglu, T.N. Özboya, & S.S. Lee, (1977), Transient boiling flow instabilities in a multi-channel upflow system, Wärme-Stoffübertragung, 10, 175-188.
- S. Yakaç & H.T. Liu, (1991), Two-phase flow dynamic instabilities in boiling systems, Multiphase Flow and Heat Transfer, vol. 1, Eds. X.-J. Chen, T.N. Veziroglu, & C.L. Tien, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, D.C.
- R.T. Lahey, Jr. & D.A. Drew, (1980), An assessment of the literature related to LWR instability modes, NUREG/CR-1414.
- M.M. Padki and H.T. Liu, (1991), Two-phase flow pressure-drop type and thermal oscillations, Int. J. of Heat and Fluid Flow, vol. 12, no. 3, 240-248.
- A.H. Stenning, (1964), Instabilities in the flow of a boiling liquid, J. Basic Eng., Trans. ASME, Series D, 86, 213.
- Q. Wang, X.J. Chen, S. Kakaç & Y. Ding, (1994), An experimental investigation of density-wave type oscillations in a convective boiling upflow system, Int. J. Heat and Fluid Flow, 15, 241-246.
- G. Yadigaroglu & R.T. Lahey Jr., (1976), On the various forms of conservation equations in two-phase flow, Int. J. of Multiphase Flow, 2, 477-484.
- N. Zuber & J.A. Findlay, (1965), Average volumetric concentration in two-phase flow systems, ASME J. Heat Transfer, 87, 453-468.



EFFECT OF MODELING ASSUMPTIONS ON THE DYNAMICS AND STABILITY OF HEATED BOILING CHANNELS

Maurício A. Pinheiro Rosa¹ and Michael Z. Podowski²
 Instituto de Estudos Avançados - CTA¹
 12231-970 - São José dos Campos - SP - Brazil
 Rensselaer Polytechnic Institute²
 12281 - New York - USA



SUMMARY

Thermally induced density wave oscillations in uniformly heated boiling channels have been analyzed numerically using the one-dimensional drift-flux model of two-phase flow. The purpose of this paper is to investigate several issues concerning the effects of physics (modeling assumptions) and operating conditions on the nonlinear dynamics and stability of heated boiling channels. The effect of considering subcooled boiling in the channel and phasic slip between the liquid and vapor phases of two-phase flow have been extensively analyzed.

INTRODUCTION

One of the most important questions concerning with the operation of two-phase flow systems in general and nuclear reactors in particular, deals with system stability. The methods of stability analysis can be divided into two major groups: one is based on linearized models, the other - full nonlinear models. The main advantage of the former method is that by perturbing the governing equations around a steady-state operating point, and converting the resultant linear model from time to frequency domain, exact analytical solutions can be obtained for the system transfer functions. These transfer functions can be then analyzed using well established quantitative criteria, to obtain rigorous conditions for system stability. In fact, such an approach has been successfully applied to various boiling systems, from small-scale experimental facilities to commercial boiling water reactors (BWR) and other thermal-power systems. Whereas the linear approach proves very useful in determining if a given system (more specifically - a particular operating point of the system) is stable and in establishing the onset-of-instability conditions, it does not provide information in regard to questions such as the range of stability (for conditionally stable nonlinear systems) and the properties of the response of an unstable system.

Although several interesting aspects of nonlinear models of two-phase flow have been investigated using analytical methods, the most commonly used practical approach to such models is via direct integration of the governing equations in the time domain. The purpose of this paper is to present the result of a study aimed at analyzing the effect of various modeling assumptions such as drift-flux parameters and subcooled boiling on the stability and dynamics of parallel boiling channels

FLOW-INDUCED OSCILLATIONS IN BOILING CHANNELS

Let us consider a system of parallel boiling channels connected between two large plena, one at the inlet and the other at the exit, as shown in Figure 1. If the pressure drop between the plena remains constant even if the flow rates at the inlet to some channels oscillate, each oscillating channel can be analyzed separately using the (given) constant pressure drop as a boundary condition. A similar effect can be obtained by connecting a heated boiling channel in parallel with a single-phase adiabatic bypass channel (see Figure 2). If the bypass flow

rate is much larger than that at the inlet of the boiling channel, the pressure drop between the plena will remain basically constant even if the channel inlet flow is subjected to oscillations. Figure 3 shows the effect of the nonlinearities on the transient response of an unstable boiling channel where the solution converges to a limit cycle (self-sustained oscillations). Assuming that subcooled liquid fluid enter the heated channel, the total length of the channel can be divided into two sections, a single-phase nonboiling section at the bottom and a two-phase boiling section in the upper part. Using a one-dimensional model of time-dependent flow and heat transfer phenomena along the channel, the moving boiling boundary can be evaluated as the location where the liquid enthalpy reaches the onset-of boiling enthalpy, $h_l(z_B) = h_{l,B}$. This characteristic enthalpy is calculated differently, depending on the boiling model used in the analysis. For example, if subcooled boiling is neglected, $h_{l,B} = h_f$, whereas if subcooled boiling is accounted for, $h_{l,B}$ is typically defined as the enthalpy at the location of the onset of significant void, $h_{l,B} = h_{l,d}$. In order to analyze the effects of subcooled boiling and phasic slip between the liquid and vapor phases on the predicted dynamic response of a boiling channel, a drift-flux model has been used in the present analysis (Zuber and Findlay, 1965).

The actual form of the one-dimensional model of two-phase flow depends on the specific modeling assumptions made and the form of closure relations used (Podowski, 1994). Specifically, the number of first principle equations may vary from six for a full two-fluid model to three for a homogeneous equilibrium model (HEM). In any case, the continuity equations for both phases are usually used, either in their basic form or by transforming them into the following equations:

Volumetric Flux Continuity Equation

$$\frac{\partial j}{\partial z} = \Gamma v_{fg} - \left[v_g \alpha \frac{d\rho_g}{dp} - v_f (1-\alpha) \frac{d\rho_f}{dp} \right] \frac{\partial p}{\partial t} - \left[v_g j_g \frac{d\rho_g}{dp} + v_f j_f \frac{d\rho_f}{dp} \right] \frac{\partial p}{\partial z} \quad (1)$$

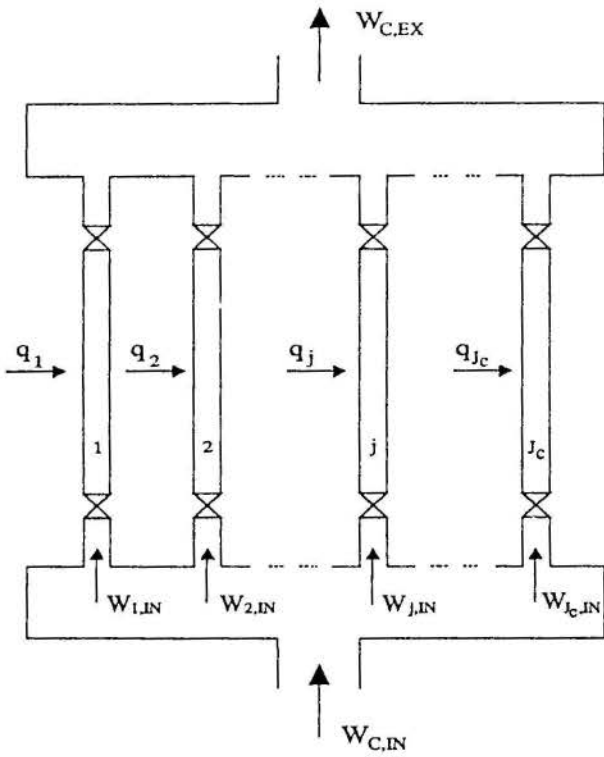


Figure 1 - A schematic of the multi-parallel-channel systems.

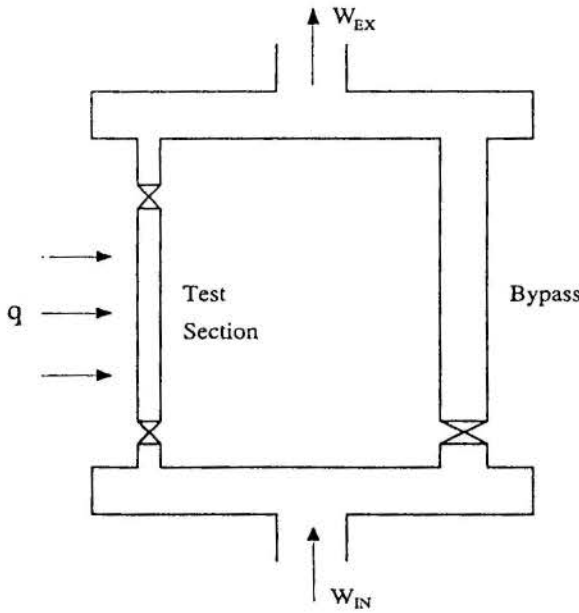


Figure 2 - Two-parallel-channel boiling system schematic.

Void Propagation Equation

$$\frac{\partial \alpha_v}{\partial t} + \frac{\partial (u_g \alpha)}{\partial z} = v_g \left[\Gamma - \frac{d\rho_g}{dp} \left(\alpha \frac{\partial p}{\partial t} - j_g \frac{\partial p}{\partial z} \right) \right]. \quad (2)$$

All flow parameters are averaged over the flow cross sectional area, and the remaining notation is conventional (Lahey and Moody,1977).

It has been assumed in Eq. (1) that $\rho_l = \rho_f$. In Eqs. (1) and (2), Γ is the volumetric phase change rate. In the case when thermodynamic equilibrium between the liquid and vapor phases is assumed (e.g. in saturated boiling, when it can be assumed $T_l = T_v = T_{sat}$), Γ can be evaluated analytically as a function of the wall heat flux, variable system pressure and local void fraction (Podowski,1994). Since a one-dimensional framework does not allow for a rigorous mathematical treatment of local lateral phenomena, a phenomenological closure law is normally used to express the wall heat flux partitioning between nonboiling and boiling components (Lahey and Moody,1977). In the analysis of boiling channel dynamics, the major thermodynamic nonequilibrium effect between the phases is concerned with subcooled boiling. The mathematical formulation used to account for this phenomenon depends on the modeling assumptions. Two commonly used options which are accounted for in the overall model, are: (a) a profile-fit model (Levy,1966) in which the flow quality, $x = G_g/G$, is related to the equilibrium quality, x_e , using an algebraic relationship of the form, $x = x_e - x_{e,d} \Psi(x_e/x_{e,d})$, where $x_{e,d}$ is the equilibrium quality at the significant void detachment point and Ψ is obtained from an experimental fit, and, (b) a mechanistic model (Lahey and Moody,1977) using a first principle mixture energy conservation equation, given by

Mixture Energy Conservation Equation

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_f h_l (1 - \alpha) + \rho_g h_g \alpha] + \frac{\partial}{\partial z} [\rho_f j_l h_l + \rho_g j_g h_g] = \frac{q'}{A_{XS}} + \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (3)$$

where h_l is the liquid cross-section-averaged enthalpy.

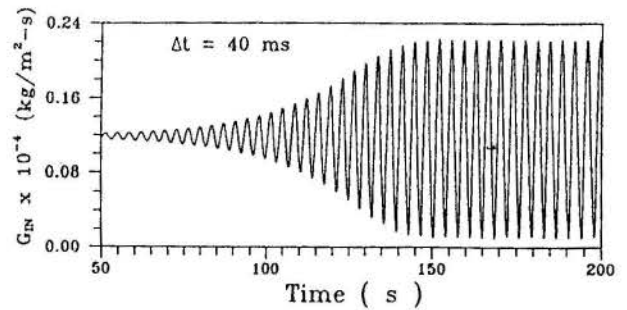


Figure 3 - Response of an unstable boiling channel to a perturbation in the wall heat flux.

The volumetric phase change rate, Γ , for the subcooled boiling models and the bulk boiling model, can be obtained by combining the two-phase continuity equations with the mixture energy equation, to yield

$$\Gamma = \Gamma_0 + \Gamma_p, \quad (4)$$

where Γ_0 is the wall-heat-induced evaporation rate, and Γ_p is the phase change rate (evaporation and condensation) due to pressure variations. The latter term is given by

$$\Gamma_p = \frac{1}{h_{fg}} \left[1 - \rho_f (1 - \alpha) \frac{dh_f}{dp} - \rho_g \alpha \frac{dh_g}{dp} \right] \frac{dp}{dt} \quad (5)$$

In the bulk boiling region, Γ_0 is given by

$$\Gamma_0 = \frac{q'}{A_{XS} h_{fg}} \quad (6)$$

In the profile-fit model, Γ_0 is calculated as an explicit function of the equilibrium quality in the boiling region (Levy, 1966):

$$\Gamma_0 = \frac{q'}{A_{XS} h_{fg}} (1 - x_{e,d} \frac{dY'}{dx_e}) \quad (7)$$

For the mechanistic subcooled boiling model, Γ_0 is calculated by energy partitioning into that required to form vapor, transferred via single-phase convection and pumping (Lahey and Moody, 1977):

$$\Gamma_0 = \frac{1}{A_{XS} h_{fg}} \left\{ q' \left[\frac{h_l - h_{l,d}}{h_f - h_{l,d}} \right] \left[\frac{\rho_g h_{fg}}{\rho_g h_{fg} - \rho_f (h_f - h_l)} \right] - H_0 \frac{\alpha}{v_{fg}} (T_{sat} - T_l) \right\} \quad (8)$$

where $h_{l,d}$ and $x_{e,d}$ are the enthalpy and quality at significant void detachment point, respectively.

In the case of the drift-flux model, the phasic slip is expressed using an algebraic closure law (Zuber and Findlay, 1965):

$$\alpha = \frac{j_g}{C_0 j + V_{gj}} \quad (9)$$

where C_0 and V_{gj} are the concentration parameter and the drift-flux velocity, respectively, so that the mixture momentum equation is sufficient to close the model. This equation can be written as:

Linear Momentum Equation

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\rho_f j_f^2}{1 - \alpha} + \frac{\rho_g j_g^2}{\alpha} \right] + g [\rho_f (1 - \alpha) + \rho_g \alpha] + [\phi_{lo}^2 \frac{f_{lo}}{D_H} + \sum_n k_n \phi_n (z - z_n)] \frac{G^2}{2\rho_f} + \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \quad (10)$$

The drift-flux parameters C_0 and V_{gj} are in general obtained from correlations such as the Bankoff's correlation (Bankoff, 1960) and the EPRI correlations (Chexal and Lellouche, 1985). In the case that $C_0 = 1$ and $V_{gj} = 0$, there is no slip between liquid and vapor phases.

Let's consider a system consisted of N individual channels as shown in Figure 1 and also that the coolant enters the system as subcooled liquid, therefore the individual channels are divided into two regions: single-phase liquid and two-phase mixture. The total pressure drop, Δp_n , in channel- n is given by

$$\Delta p_n = \Delta p_{1\phi,n} + \Delta p_{2\phi,n}, \quad n = 1, \dots, N \quad (11)$$

where $\Delta p_{1\phi,n}$ and $\Delta p_{2\phi,n}$ are the channel single-phase and two-phase pressure drops, respectively.

The governing equations for single-phase liquid flow can be derived from the two-phase flow equations above, by setting α , Γ and j_g to zero, and $\phi_{lo}^2 = \phi_n = 1$. These equations can be used in the calculations for the single-phase region of the channels.

For a given total flow rate into a multi-parallel-channel system, W_T , the flow rates into individual channels, W_n , are calculated simultaneously for all channels by using the common-pressure-drop boundary condition:

$$\Delta p_n = \Delta p_m = \Delta p_C, \quad (n = m = 1, \dots, N) \quad (12)$$

The inlet flow rates into individual channels satisfy:

$$\sum_{n=1}^N W_n = W_T \quad (13)$$

where Δp_n is the total pressure drop in channel- n .

The numerical methodology used to solve the combined mass, energy and momentum equations allows for varying the degree of implicitness, both spatial and temporal, in order to optimize the efficiency of the method (i.e., good accuracy combined with fast convergence). This methodology has been presented in detail before by Rosa (1992, 1995), therefore it will not be repeated herein.

RESULTS AND ANALYSIS

The model discussed above has been implemented numerically as a FORTRAN code, DYNBOSS (Rosa, 1994) (**DYNAMICS OF NONLINEAR BOILING SYSTEMS**). Since the main purpose of this model has been to provide an accurate tool for the analysis of oscillatory transients and instabilities in boiling systems, the model testing included both the numerical methodology and the modeling concepts. The former issue has been considered in previous works (Rosa, 1992, 1995). Regarding the latter issue, the parallel channel model in DYNBOSS has been compared against other models and experimental data. In particular, the results of a comparison against two frequency-domain models/computer codes, NUFREQ-NP (Peng et al, 1984) and LINSTAB (Podowski and Zhou, 1993), are shown in Figure 4. Both results present marginal stability lines for a uniformly heated channel using the $N_{SUB} - N_{PCH}$ map, where N_{PCH} and N_{SUB} are, respectively, the phase change number and the subcooling number, defined as

$$N_{SUB} = \frac{(h_f - h_{IN}) v_{fg}}{v_f h_{fg}}, \quad N_{PCH} = \frac{q' L_H v_{fg}}{u_{IN,0} A_{XS} h_{fg}} \quad (14)$$

In both NUFREQ-NP and LINSTAB the marginal stability line (MSL) is obtained by analytically solving the linearized governing equations and using them to obtain system transfer function(s). Since predicting the marginal stability conditions is very demanding test for any time-domain direct-integration code using a full nonlinear model of two-phase flow (for example, see Rohatgi et al, 1994), the agreement shown in Figure 5 and Figure 6 clearly demonstrates the consistency and accuracy of the present method.

The testing of physical models in DYNBOSS included a comparison of the results obtained using different modeling assumptions against each other and against experimental data. The numerical calculations were performed for the two-channel

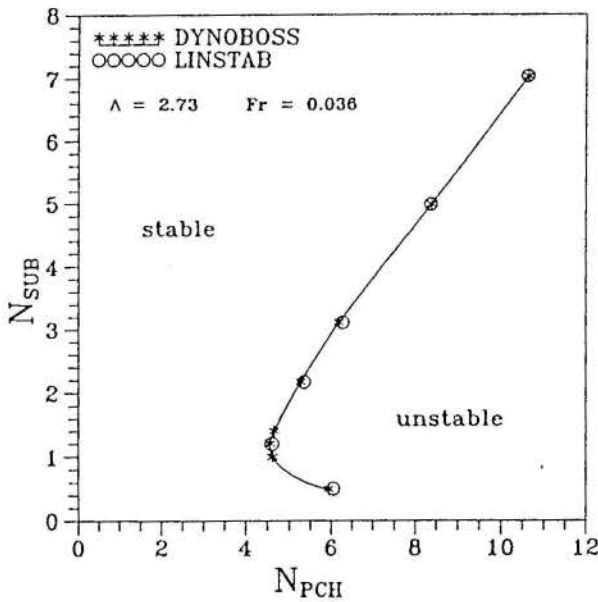


Figure 4 - Comparison of the marginal stable line (MSL) calculated by the linear code LINSTAB and the nonlinear code DYNOBOSS.

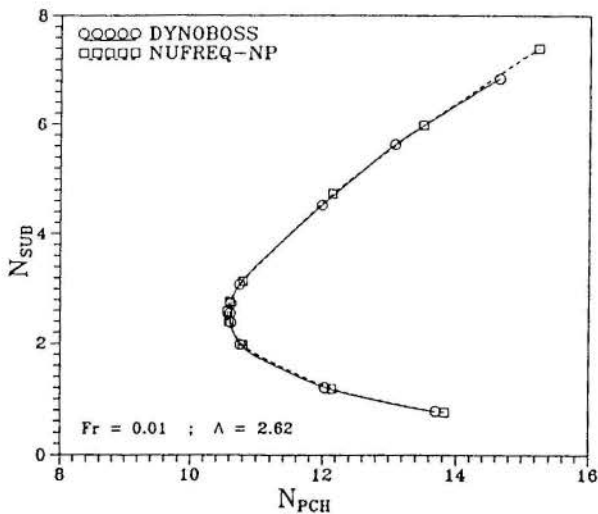


Figure 5 - Comparison of the MSL calculated by the linear code NUFREQ-NP and the nonlinear code DYNOBOSS.

system shown in Figure 2. This is a simulation of the apparatus used by Saha(1974) in his experiments.

The impact of different models of subcooled boiling and phasic slip on the predicted onset of instability conditions in parallel channel systems is illustrated in Figure 6, including a comparison against experimental data of Saha(1974). The inclusion of subcooled boiling for high and intermediate subcooling number (N_{SUB}) does not affect the predicted stability threshold in a significant manner whereas for low subcooling number it has an important stabilizing effect and its inclusion significantly improves the predictive capabilities of the present model. It is also interesting to see that the predictions

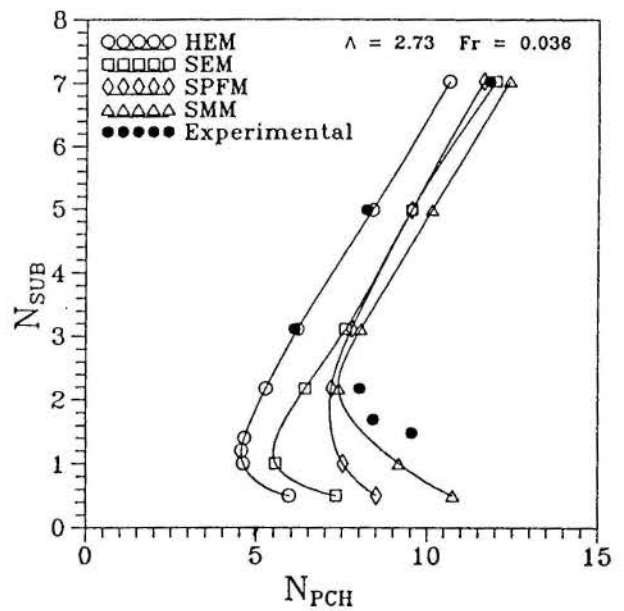


Figure 6 - Comparison of the MSL calculated using: homogeneous equilibrium model (HEM); equilibrium model with phasic slip (SEM); profile-fit model with phasic slip (SPFM); mechanistic model with phasic slip (SMM); $C_0 = 1.12$; $V_{gj} = 0.1$ m/s. Also shown are the experimental results by Saha(1974).

using different models of subcooled boiling yield substantially different results for low subcooling number ($N_{SUB} < 2$), with the mechanistic model apparently capturing the transient nature of the phenomena involved more accurately than the profile-fit model. As can be seen, phasic slip between liquid and vapor phases of two-phase flow has a significant stabilizing effect over the entire range of operating conditions analyzed. The effect of phasic slip is accounted for in DYNOBOSS by using the EPRI correlations (Chexal and Lellouche,1985) for the drift-flux parameters C_0 and V_{gj} .

Figure 7 shows the effect of subcooled boiling on the response of a boiling channel near the marginal stability line for various operating conditions. As can be seen, ignoring subcooled boiling has a destabilizing effect on the predictions. On the other hand, a comparison between the profile-fit and mechanistic models of subcooled boiling indicates that they yield similar results for low subcooling numbers but larger differences develop when N_{SUB} increases. It is interesting to notice that the mechanistic model always shows more stable oscillations than the other two models.

Figure 8 shows the effect of kinematic non-equilibrium (slip) on the response of a boiling channel for the same operating conditions as in Figure 6. As can be seen, the inclusion of phasic slip (SEM) has always the effect of stabilizing the boiling channel as compared with the homogeneous model (HEM).

The results shown so far have assumed constant and uniform drift-flux parameters (C_0 and V_{gj}) along the two-phase flow region of the channel which is valid for the purpose of showing the effect of the thermodynamic state of both phases and also to show the qualitative effect of kinematic non-equilibrium between both phases on the dynamics and stability of a boiling channel. A more rigorous analysis of the stability and dynamics of boiling channels requires the calculation of the drift-flux parameters not only along the two-phase region of the

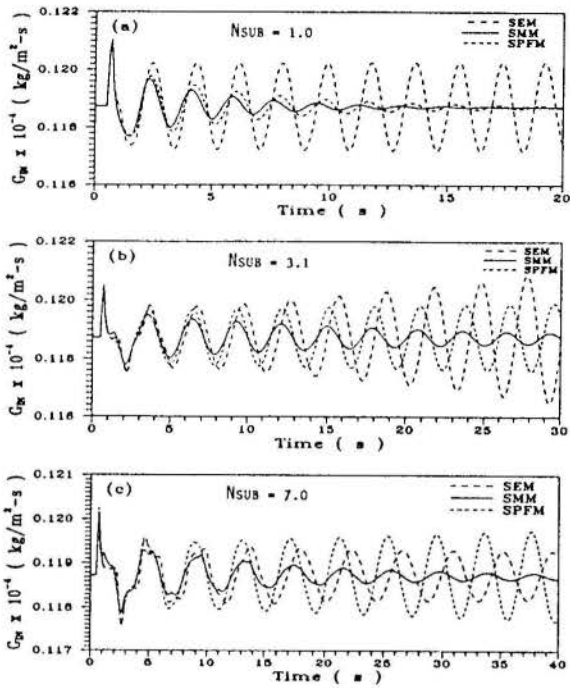


Figure 7 - The response of a boiling channel to a perturbation in the wall heat flux for three different models of two-phase flow with phasic slip ($C_0 = 1.12$; $V_{gJ} = 0.1$ m/s).

- (a) $N_{SUB} = 1.0$, $N_{PCH} = 540$; (b) $N_{SUB} = 3.1$, $N_{PCH} = 758$;
(c) $N_{SUB} = 7.0$, $N_{PCH} = 1183$.

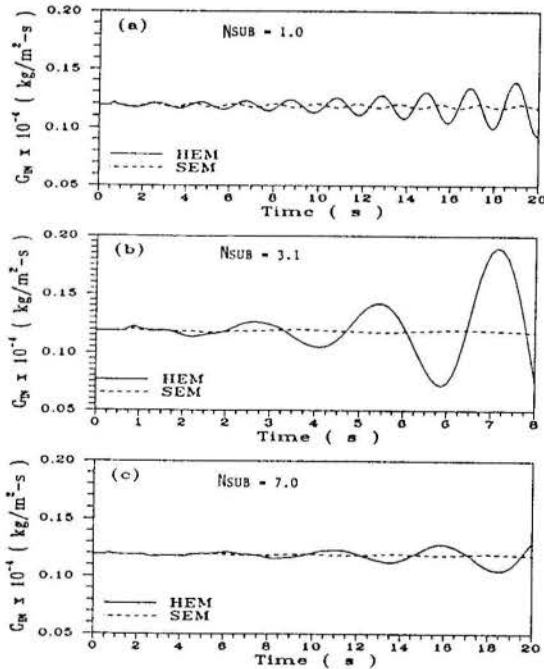


Figure 8 - The response of a boiling channel to a perturbation in the heat flux; thermodynamic equilibrium without phasic slip (HEM) and with phasic slip (SEM); ($C_0 = 1.12$; $V_{gJ} = 0.1$ m/s).

- (a) $N_{SUB} = 1.0$, $N_{PCH} = 540$; (b) $N_{SUB} = 3.1$, $N_{PCH} = 758$;
(c) $N_{SUB} = 7.0$, $N_{PCH} = 1183$.

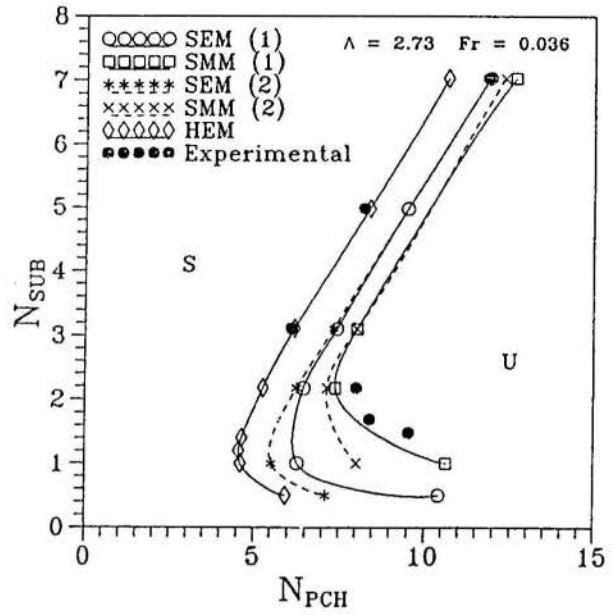


Figure 9 - The effect of space- and time-dependent drift flux parameters of two-phase flow in the calculated MSLs for a boiling channel: (1) space- and time-dependent drift-flux parameters, (2) average steady-state parameters. Also shown are the MSLs calculated by the homogeneous equilibrium model and the experimental data by Saha(1974).

channel but also as function of time. Therefore, the marginal stability lines have been recalculated using the EPRI correlations for drift-flux parameters for the thermodynamic equilibrium and mechanistic subcooled boiling models. The results of calculations using the space- and time-dependent drift-flux parameters for the same cases as in the previous stability maps are shown in Figure 9. Also are shown the calculations by using the constant and space-averaged drift-flux parameters for steady-state operating conditions calculated from the EPRI correlations. As can be seen in Figure 9, the calculations with the averaged steady-state parameters agree well with the ones with the space- and time-dependent drift-flux parameters for medium/high values of the subcooling number and both two-phase flow models analyzed. The effect of space and time dependence of drift-flux parameters becomes more important for low subcooling numbers where it indicates a more stable channel than the case for constant and average parameters. The space- and time-dependent parameters did not improve the agreement with the experimental data for medium values of the subcooling number but it seems to provide a better agreement in the low subcooling range mainly if subcooled boiling is considered. Since calculations with space and time-dependent drift-flux parameters are considerably more time-consuming than for constant and uniform parameters and since both calculations showed good agreement in most of the range of operating conditions analyzed, the averaged drift-flux parameters can be used successfully for estimating the marginal stability boundary in time domain calculations.

CONCLUSIONS

Thermally induced density wave oscillations in uniformly heated boiling channels have been analyzed numerically using the one-dimensional drift-flux model of two-phase flow. Two different approaches to modeling of subcooled boiling in the

channels have been considered: a mechanistic model and a profile-fit model. The overall model has been validated against linear stability analysis codes and experimental data. For the range of operating conditions studied, phase slip between liquid and vapor phases of the two-phase flow has shown a significant stabilizing effect on the system for the entire range of operating conditions analyzed. Subcooled boiling has shown little impact on the stability of boiling channels for intermediate/high values of subcooling number but has shown a stabilizing effect for small subcooling number ($N_{SUB} < 2$). Also, the effect of using space- and time-dependent values of the concentration parameter and drift-flux velocity instead of average values has shown a stabilizing effect for small subcooling numbers improving, in this way, the predictive capability of the model.

REFERENCES

- Chexal, B. and Lellouche, G. 1985, "A Full range Drift-Flux Correlation for Vertical Flows", *ANS Proceedings of the 1985 National Heat Transfer Conference*, Denver.
- Levy, S., 1966, "Forced Convection Subcooled Boiling - Prediction of vapor Volumetric Fraction", GEAP-5157, General Electric Company.
- Lahey, R. T., Jr. and Moody, F., 1977, "The Thermal-Hydraulics of Boiling Water Reactors", ANS.
- Peng, S. J., Podowski, M. Z., Lahey, R. T., Jr. and Becker, M., 1984, "NUFREQ-NP: A Computer Code for the stability Analysis of Boiling Water Nuclear Reactors", *Nucl. Sci. & Eng.*, 88, 3.
- Podowski, M. Z. and Zhou, J., 1993, "Hydrodynamic Stability Analysis of an Industrial Two-Phase Thermosyphon Heat Rejection System", *ANS Transactions*, Vol. 66.
- Podowski, M. Z., 1994, "Instabilities in Two-Phase Flow Systems", in *Boiling Heat Transfer - Modern Developments and Advances*, R. T. Lahey, Jr.-ed., Elsevier Publishing Corporation.
- Rohatgi, U. S., Mallen, A. N., Cheng, H. S. and Wulff, W., 1994, "Validation of the Engineering Plant Analyzer Methodology with Peach Bottom 2 Stability Tests", *Nuc. Eng. Des.*, 151.
- Rosa, M. A. P. and Podowski, M. Z., 1992, "Nonlinear Effects in Two-Phase flow Dynamics", *Nuc. Eng. Des.*, 146, p. 277-288.
- Rosa, M. A. P., 1994, "Nonlinear Dynamics and Stability Analysis of Two-Phase Flow Systems, with Application to Boiling Water Nuclear Reactors", Ph.D. Thesis, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY.
- Rosa, M. A. P., 1995, "A Numerical Analysis of the Dynamics and Stability of Multi-Parallel Boiling Channel Systems", XIII *Congresso Brasileiro e II Congresso Ibero Americano em Engenharia Mecânica* (COBEM-CIDIM/95).
- Saha, P., 1974, "Thermally Induced Two-Phase Flow Instabilities, Including the Effect of Thermal Non-Equilibrium Between Phases", Ph.D. Thesis, Georgia Institute of Technology.
- Zuber, N. and Findlay, J. A., 1965, "Average Volumetric Concentration in Two-Phase Flow Systems", *Journal of Heat Transfer*.



MODELING KINETIC UNDERCOOLING THROUGH PHASE-FIELD EQUATIONS WITH NON-LINEAR DYNAMICS



Alvaro L. Fazenda and Jerônimo S. Travelho
 Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada - LAC
 Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE
 12225-970 - S. J. dos Campos - SP - Brazil
Maurício Fabbri¹
 Núcleo de Desenvolvimento Tecnológico - NDT
 Universidade São Francisco - USF
 13.251-900 - Itatiba - SP - Brazil

SUMMARY

We extend the phase-field formulation to solidification processes with a non-linear kinetic coefficient. The dynamics is appropriate to distinguish between the "random" and "defect-driven" models of interface attachment, which is relevant for the development of micro-macro numeric simulations. Quantitative validation of the model is provided, through comparison with a classical deforming-grid numerical technique. Our results further stress the power of the phase-field method, in the sense that its free-energy density-functional approach is easily generalized to encompass the detailed physics at the solidification front.

INTRODUCTION

During any non-stationary solidification process, the temperature at the solid-liquid interface is lower than the equilibrium melting-point. This "kinetic undercooling", ΔT , provides the drive force for the interface movement, and its detailed dependence on the interface speed v is dictated by the atomic attachment of the particles at the solid front (Chalmers, 1964). The "rough" or "random" model, which assumes an uniform interface of equivalent available sites, implies $v \propto (\Delta T)$, whereas growth by dislocations gives $v \propto (\Delta T)^2$. Kinetic undercooling is an important effect during rapid solidification, and, allied with anisotropic effects, may be of fundamental importance for the understanding of dendrite sidebranching. On the other side, the interface morphology during solidification is governed by the dynamic interplay between the destabilizing effect of bulk undercooling in the liquid phase and the stabilizing effect of surface tension (Kurz and Fisher, 1992). Under these conditions, the direct application of the classical transport equations is inadequate, and requires the development of complicated numeric techniques to keep track of the interface local curvature and speed.

The phase-field (PF) methods (Caginalp, 1989) provide very attractive alternatives to the cumbersome classical front-tracking approaches. Currently an area of active research (Warren, 1995), their power comes from an *ab-initio* formulation based on an adequate density functional, which treats the phase state of the material on the same ground as temperature, concentration, or any other intensive thermodynamic coordinate. In the PF techniques, the solid-liquid interface is determined *a posteriori*, as a level curve of the global solution, where the kinetic and Gibbs-Thompson interface conditions are automatically satisfied; they are therefore applicable to two and three dimensional geometries, essentially without any additional effort.

The current phase-field formulations adopt a linear model for the temporal evolution of the order parameter, which implies a linear relationship between the local interface temperature and speed (Kobayashi, 1993). Fabbri and Voller (1995), by adopting a non-linear transformation in the coupling term of the phase-temperature equations, were able to simulate a square-law kinetic effect, thus resembling the dislocation growth mechanism at the

microscopic level; such modification, however, violates the Gibbs-Thompson condition, which imposes a linear relationship between the interface undercooling and the local interface curvature - it is therefore not directly applicable to multidimensional problems with a non-planar solid-liquid interface.

We here show that the PF evolution equation can be written in a general form, adequate to handle the multidimensional kinetic undercooling problem, while maintaining intact the Gibbs-Thompson condition at the interface. Quantitative validation of the equations are given by a one-dimensional numeric simulation, where the PF results are checked against the predictions of a classical deforming-grid technique. Our results show that the generalized PF equations, in the sharp-interface limit, give the correct solutions to the corresponding modified Stefan problem.

A GENERALIZED PHASE-FIELD FORMULATION

A comprehensive introduction to PF methods can be found in the references, and a domestic version is available (Fabbri, 1994). Here we describe only the essential pertinent facts.

In the phase-field method a phase variable $p(\vec{x}, t)$ is introduced, the values of which describe the phase state of the material; we choose the value +1 to corresponding to liquid, and -1 to solid. The S-L interface is defined by points at which $p=0$. In practice, there is always a transition layer of width ϵ between the solid and liquid phases, which can be made as small as desired, in order to approximate the sharp physical interface. Caginalp & Sokolowsky (1991) and Fabbri & Voller (1996) have shown, however, that the use of a suitable large numerical value for ϵ does not compromise the solutions of the PF equations. In equilibrium, the spatial profile of $p(\vec{x}, t)$ is made to minimize the total free-energy \mathcal{F} of the system (or any other thermodynamically consistent functional). In terms of a first-order expansion in the field p , and the temperature u , \mathcal{F} is written as:

$$\mathcal{F} = \int \left\{ \frac{1}{2} \xi^2 |\nabla p|^2 + F(p, u) \right\} d^3r \quad (1)$$

¹Permanent address: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, Laboratório Associado de Sensores e Materiais - LAS, C.P.515, 12225-970, S.J.Campos, SP, Brazil.

, where $F(p,u)$ is a double-well potential having local minima at $p=\pm 1$, and ξ is a characteristic length of the order ϵ . In the current linear PF models, the time evolution of p obey a simple linear-time relaxation law. We here propose that the time derivative of the phase-field can be given a generalized dependence on the variation of \mathcal{F} :

$$\left[\frac{\tau}{\Delta p} \frac{\partial p}{\partial t} \right]^\beta = - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta p} = \frac{1}{\Delta p} (\xi^2 \nabla^2 p + F(p,u)) \quad (2)$$

We have made the right and left terms non-dimensional by normalizing with respect to Δp , a convenient but otherwise arbitrary order-parameter scale. τ is a characteristic relaxation time parameter, and the brackets are interpreted as the power signed function:

$$[a]^\beta \Delta |a|^\beta \text{sgn}(a) \quad (3)$$

The evolution exponent β can be given a convenient value, in order to reproduce the desired microinterface dynamics. The linear ("rough") model is recast with $\beta=1$, in which case the asymptotic analysis of Caginalp (1989) can be employed to relate the PF parameters to the actual(measured) physical properties of the medium (see also Caginalp and Xie, 1993). The Allen-Cahn relation (1979), which relates the surface tension coefficient σ to the actual form of the potential $F(p,u)$, still holds in the general case:

$$\sigma = \frac{\sqrt{2}}{2} \epsilon \int_{-1}^{+1} \sqrt{F(p,u)} dp \quad (4)$$

The local dynamics at the solid-liquid interface is dependent on the actual form of the potential $F(p,u)$. In order that the PF equations reproduce the correct Gibbs-Thompson dependence on the local curvature, it is necessary that $\partial F/\partial u$ be only a function of p (the potential must be a linear function of u). This requirement is fulfilled by a convenient four degree polynomial in p (Kobayashi, 1993):

$$F(p,u) = W \int_{-1}^p (1-\phi^2)[\phi + \gamma u] d\phi \quad (5)$$

W is a constant defining the entropy scale, such that $\Delta S =$ entropy of melting $= \gamma W/6$. The constant γ can be any number compatible with $F(p,u)$ having three distinct roots at any temperature.

The interface kinetics can be made an appropriate function of the interface velocity v by adjusting the time-evolution exponent β . This can be seen as follows. Assume that the local solution of Eq.(2), around the interface, behave like a wave packet (soliton) of the form $p(\bar{x} - \bar{v}t)$. Then the normal interface velocity $v = \bar{v} \cdot \bar{n}$ satisfies a non-linear eigenvalue problem in the wave coordinate $\eta = \bar{x} \cdot \bar{n} - vt$:

$$\frac{d^2 p}{d\eta^2} + \frac{\Delta p}{\xi^2} \left(-v \frac{\alpha \xi^2}{\Delta p} \frac{dp}{d\eta} \right)^\beta + \frac{1}{\xi^2} F(p,u) = 0 \quad (6)$$

We have written $\tau = \alpha \xi^2$, introducing the coefficient α , which, for $\beta=1$, can be shown to be equal to the more familiar kinetic coefficient employed in sharp-interface (Stefan) classical solidification models. Linearizing p around the interface position ($p \approx 0$), we get at once:

$$u = - \frac{1}{\rho} \frac{4 \Delta p}{3 \Delta S} \left(\frac{\alpha \xi}{2 \Delta p} \right)^\beta v^\beta \quad (7)$$

ρ is a parameter related to the actual interface thickness, which in principle can be found exactly through a complete asymptotic analysis of the eigenvalue problem, Eq.(6); we here determine the value of ρ by numerical fitting the PF results to the deforming grid solutions.

THE PROTOTYPE MODIFIED STEFAN PROBLEM

In order to validate the generalized PF equations quantitatively, we refer to the one-dimensional solidification of a pure substance with melting temperature T_m and latent heat L , where an explicit kinetic undercooling effect is prescribed at the solid-liquid (SL) interface (the

so-called modified Stefan problem). We consider a slab $0 < x \leq \ell$ of material initially at temperature $T_{hot} > T_m$; at $t=0$ the extremity at $x=0$ is lowered to $T_{cold} < T_m$. The temperature and the position $\Gamma(t)$ of the SL interface are solutions of a free-boundary classical heat conduction problem; there are not known analytic solutions. Taking the heat conductivities of the liquid and solid as k_1 and k_2 respectively, unit densities and specific heats, and calling $v = d\Gamma/dt$, the temperature field $T(x,t)$ satisfies (Θ is a kinetic constant):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial t} = k_1 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{for } x > \Gamma(t) \quad (a) \\ \frac{\partial T}{\partial t} = k_2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{for } x < \Gamma(t) \quad (b) \\ T = T_m - \Theta^\beta v^\beta \quad \text{at } x = \Gamma(t) \quad (c) \\ k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{\Gamma} - k_2 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{\Gamma} = \rho L v \quad (d) \\ T(x,0) = T_{hot} \quad (e) \\ T(0,t) = T_{cold} \quad T(\ell,t) = T_t \quad (f) \end{array} \right. \quad (8)$$

The boundary condition at the right end, T_p , is taken to be equal to the local analytic solution of the simple Stefan problem, in the absence of kinetic effects (the Neuman solution, see Carslaw and Jaeger, 1959).

NUMERICAL METHODS

Phase-Field Equations. The phase equation for $p(x,t)$, Eq.(2), must be supplemented by the transport equations for the other thermodynamic coordinates involved. In the case of heat conduction in a pure substance, the temperature field obey a simple Fourier law with a source term to account for the releasing of latent heat at the SL interface. In one dimension, the coupled system of non-linear e.d.p.'s read:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\Delta p)^{1-\beta} \left[\alpha \xi^2 \frac{\partial p}{\partial t} \right]^\beta = \xi^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + W(1-p^2)(p + \gamma T) \quad (a) \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (b) \end{array} \right. \quad (9)$$

We solve this set of equations by a simple explicit fixed-grid scheme; in this case, numerical stability requires very small time-steps, but this is not a concern in the one-dimensional simulations we describe here. For higher dimensions, a total implicit control-volume technique, tridiagonal by lines-columns, is a better alternative (Fabbri and Fabbri & Voller, 1994, 95, 96). More sophisticated algorithms, with adaptative meshes that conform to the stiff solid-liquid interface, are under development.

Deforming-grid technique. Fabbri and Voller (1995) have developed a liquid-fraction based deforming grid numerical scheme, suitable for the modified Stefan problem with generalized kinetic undercooling. Essentially, the method is an enthalpy-based dynamic discretization, which evolves so as to maintain the interface position sitting always over a mesh: node, at the end of each time-step. It is not directly applicable to multidimensional problems, but yields precise numeric solutions for any (one-dimensional) Stefan problem in a few seconds using a 486/66MHz personal computer, and is not subjected to the usual oscillations displayed by the usual enthalpy methods (which require interpolations over a fixed-grid).

SLAB SIMULATIONS

Triggering of undercooling In order to avoid the initial infinite interface speed, we consider an initial time interval t_0 , during which solidification occurs without kinetic undercooling. The analytic (Neuman) solutions at time t_0 are then employed as the initial conditions for the full modified Stefan problem. This procedure also introduces a natural scale for the actual undercooling at the SL interface. Adopting the melting point at $T_m=0$, the initial degree of undercooling, at $t=t_0$, is

$$T^0 = \frac{-8}{3\Delta S} \left(\frac{\alpha \xi}{4} \right)^\beta v_0^\beta \quad (10)$$

v_0 is the SL interface speed at $t=t_0$, and we have adopted $\Delta p=2$ for the order parameter scale. By choosing a unit-length slab ($l=1$), $T_{hot}=0.015$ and $T_{cold}=-0.085$ (which were the values employed by Caginalp & Socolovsky (1991) and Fabbri & Voller (1995)), the eigenvalue of the simple Stefan problem is 0.396618, which gives $v_0=0.561807$. The kinetic coefficient α is then obtained from the phase-field parameter ξ and the required values of T^0 . These values also fixes the kinetic constant Θ which appear in the classical equations, Eq.8.

Phase-field and numeric parameters. The fixed-grid discretization here adopted only makes sense when the mesh spacing Δx is smaller than the interface thickness, and we accordingly have adopted $\xi=1.25\Delta x$ in all runs. The unit-length slab is covered by a mesh size of $N=500$ intervals; this yields a numeric interface thickness ξ of 0.002, which we found to be enough to attain convergence of all numeric results within less than 1%. Note that the PF methods aim at studying complicated solidification morphologies in multidimensional problems, and therefore such a thin mesh is required if one employs a simple fixed-grid discretization to resolve the many length scales with appear in dendrites (Warren & Boettinger, 1995, and Braun et. al, 1994). Finally, by choosing the entropy scale $\Delta S=4$, and $W=8$, we fix the temperature coupling constant $\gamma=3.0$.

RESULTS

Fig.1 sows the interface progression, as predicted by the linear ($\beta=1$) PF equations, in comparison to the deforming grid solutions. The PF solutions obtained for $T^0=-0.001$ are also compared to the analytic Neuman solution to the Stefan problem, and, as expected, the kinetic effects are almost absent at such low level of undercooling; nevertheless, this provides a good indication that our simple explicit

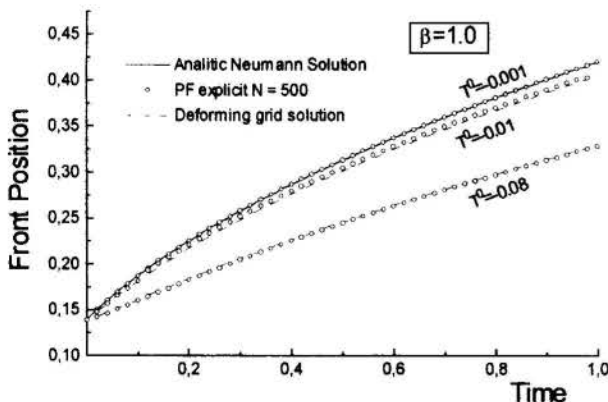


Figure 1 - Interface progression as predicted by the linear PF model, as compared to the deforming grid classical solutions and, for low undercooling, to the analytic Neuman solution.

discretization of Eq.(2) is enough for our purposes here.

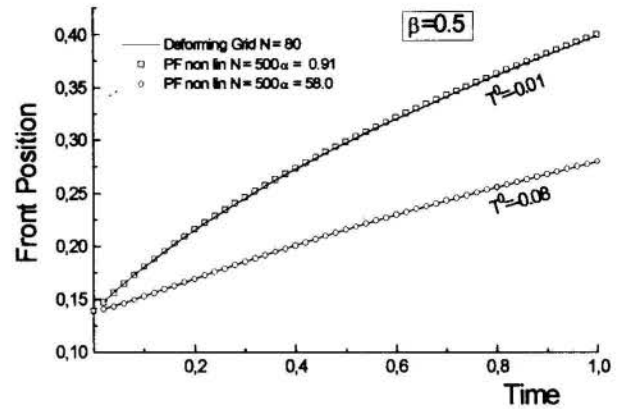


Figure 2 - Same of Figure 1, now employing the PF equations with generalized non-linear dynamics.

Figure 2 shows the results of the generalized PF model, for the dislocation model growth with $\beta=1/2$. The values for the kinetic coefficient α were obtained by numerical fitting, yielding consistently the same value $\rho = 1.41 \approx \sqrt{2}$ for all values of T^0 .

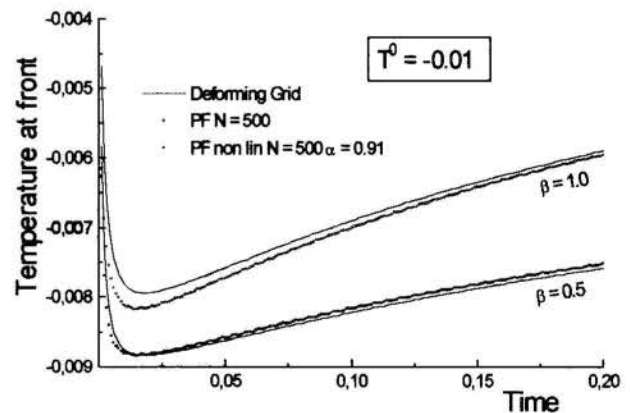


Figure 3 - Behavior of the numerical solutions obtained with the PF models, for the temperature at the phase front.

Figures 3 and 4 depict the temperature at the SL interface, for two distinct values of the initial undercooling T^0 , as predicted by the linear ("rough") and square-root ("dislocation-driven") models. The quantitative results of the generalized PF model, obtained also with the stretching factor $\rho = \sqrt{2}$, are rather impressive.

CPU times for each run were around one-hour at a 150MHz pentium PC. The use of a totally implicit discretization would allow for a time-step roughly a thousand times greater, but would require nearly a ten-step relaxed iteration to solve the tridiagonal non-linear system of equations; the gain would still be around two orders of magnitude in CPU time. The calculations would then be feasible for two-dimensional domains.

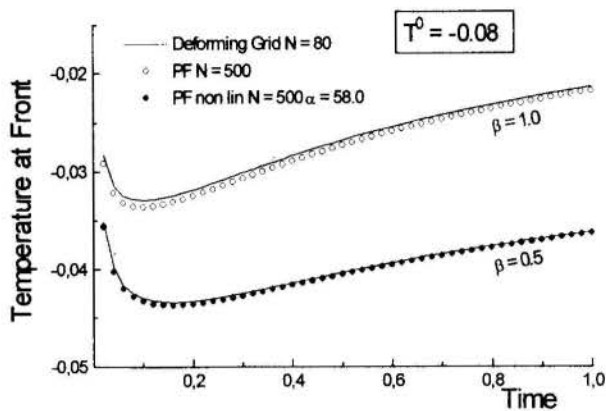


FIGURE 4 - Same of Fig.3, for a high level of initial undercooling.

CONCLUSIONS

We have shown that including a non-linear relaxation dynamics in PF models allows for the simulation of distinct particle attachment models, without interfering with the local Gibbs-Thompson curvature condition. This should be of interest, if not of fundamental importance, for the study of the interface morphology during a generalized solidification process. We are currently carrying this work further, by developing better mesh strategies for two-dimensional simulations, as well as refined relaxation procedures for implicit methods, and by studying more closely the related non-linear eigenvalue problem under generalized interface kinetics. It is also in order to stress that PF methods are becoming a feasible and reliable alternative for the simulation of transport problems involving solidification (Warren, 1995); and near future issues will most probably concern with the inclusion of fluid flow phenomena, the handling of non-isothermal alloy solidification (Wheeler et al, 1992; Caginalp and Jones, 1995), and the development of thermodynamically consistent functionals (Penrose and Fife, 1993).

REFERENCES

- Allen, S.M. and Cahn, J.W., 1979, "A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening", *Acta Metall.* **27**, 1085-1095.
- Braun, R.J., McFadden, G.B. and Coriell, S.R., 1994, "Morphological instability in phase-field models of solidification", *Phys.Rev.* **E49(5)**, 4336-4352.
- Caginalp, G., 1989, "Stefan and Hele-Shaw type models as asymptotic limits of the phase-field equations", *Phys.Rev.* **A39(11)**, 5887-5896.
- Caginalp, G. and Socolovsky, E.A., 1991, "Computation of sharp phase boundaries by spreading: the planar and spherically symmetric cases", *J.Comp.Phys.* **95**, 85-100.
- Caginalp, G. And Xie, W., 1993, "Phase-field and sharp-interface alloy models", *Phys.Rev.* **E48(3)**, 1897-1909.
- Caginalp, G. And Jones, J., 1995, "A derivation and analysis of phase-field models of thermal alloys", *Annals of Phys.* **237**, 66-107.
- Carslaw, H.S. and Jaeger, J.S., 1959, "Conduction of heat in solids", 2d ed., Clarendon Press, Oxford.
- Chalmers, B., 1964, "Principles of Solidification", John Wiley, NY.
- Fabrizi, M., 1994, "The Phase-Field method in engineering: behavior under various solidification regimes", *Proceedings, 5th Thermal Sciences Brazilian Meeting*, 329-333.

Fabrizi, M. and Voller, V.R., 1995, "Numerical solution of plane-front solidification with kinetic undercooling", *Num.Heat Transf.* **27(4)**, 467-486.

Fabrizi, M. and Voller, V.R., 1996, "The phase-field method in the sharp-interface limit: A comparison between model potentials", *J.Comp.Phys.* (accepted).

Kobayashi, R., 1993, "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth", *Physica D* **63**, 410-423.

Kurz, W. and Fisher, D.J., 1992, "Fundamentals of Solidification", Trans-Tech Publications, Switzerland.

Penrose, O. And Fife, P.C., 1993, "On the relation between the standard phase-field model and a 'thermodynamically consistent' phase-field model", *Physica D* **69**, 107-113.

Warren, J.A., 1995, "How does a metal freeze? - A phase-field model of alloy solidification", *IEEE Comp.Sci.Eng.* **2(2)**, 39-49.

Warren, J.A. and Boettinger, W.J., 1995, "Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method", *Acta metall. mater.* **43(2)**, 689-703.

Wheeler, A.A., Boettinger, W.J. and McFadden, G.B., 1992, "Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys", *Phys.Rev.* **A45(10)**, 7424-7439.



SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA PROBLEMAS DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE EM GEOMETRIA AXI-SIMÉTRICA.



Diniz, A.J.; Maia, C.R.M.; Zapparoli, E.L.
 Departamento de Engenharia Mecânica - FEIS - UNESP
 Av. Brasil, 56 - 15385-000 - Ilha Solteira(SP)
 (*) I.T.A. - CTA - 12225.000 - São José dos Campos(SP)

RESUMO

Neste trabalho apresenta-se soluções analíticas para problemas de transferência de calor com mudança de fase em geometria de revolução axi-simétrica. Foi aplicado, como método de solução, a Técnica da Transformada Integral Generalizada. O sistema de equações diferenciais ordinárias obtido é resolvido numericamente para a obtenção da distribuição de temperatura. Os parâmetros que envolvem o deslocamento e a velocidade da fronteira móvel são então calculados e comparados com aqueles apresentados na literatura.

INTRODUÇÃO

O processo de transferência de calor com mudança de fase a alta temperatura são encontrados em muitas aplicações tecnológicas, Steg, (1962) e Yovanovich, (1974). Para estes casos, o problema de difusão é inerentemente não linear e envolve o movimento da fronteira, o que não é previamente conhecido, Chung and Hisiao (1985).

Diversos resultados foram obtidos através de soluções analíticas aproximadas ou numéricas e são encontradas, inclusive, nas literaturas de ciência matemática e física, Lacaze (1967) e Chung (1985). Com respeito ao desenvolvimento analítico, observa-se que a Técnica da Transformada Integral Clássica, TTIC, constituiu-se numa ferramenta poderosa para este tipo de problema, Vallerami (1974). Porém, mais recentemente, a Técnica da Transformada Integral Generalizada, TTIG, que é uma extensão da TTIC, vem sendo aplicado com sucesso em problemas mais complexos, Özisik e Murray (1974), Diniz et al (1991) e Cotta (1993).

No presente trabalho, a equação da difusão em processos ablativos é resolvida através da TTIG, tanto no período pré-ablativo como no período ablativo, para problemas com geometria de um corpo rombudo aximétrico, submetidos a condições de fluxo de calor transiente no contorno.

O fenômeno ablativo é simplificado pela hipótese de Stefan, que considera o material sublimado descarregado para atmosfera. A distribuição de temperatura, deslocamento e velocidade ablativa são então calculados e comparados com aqueles apresentados na literatura.

ANÁLISE

Considere o problema de condução de calor em um corpo de revolução axi-simétrico, com propriedades físicas constantes, temperatura inicial T_0 e sujeito a uma condição de fluxo de calor transiente $Q(\tau)$ na fronteira, conforme ilustrado na Figura (1). Durante o processo de transferência de calor dois períodos são identificados: um período antes da mudança de fase, envolvendo um processo pré-ablativo, por onde o material protetor é aquecido até o ponto de fusão e um período ablativo, onde a massa fundida é removida totalmente para o ambiente, conforme a hipótese de Stefan, Lacaze (1967).

As equações para distribuição de temperatura ao longo da camada do material, com as variáveis na forma adimensional, são as que se seguem:

Período Pré-Ablativo

$$Z^2(\xi) \frac{\partial \theta(\xi, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + D(\xi) \frac{\partial \theta(\xi, \tau)}{\partial \xi} \quad (1)$$

onde:

$$D(\xi) = \frac{F(\xi)}{R(\xi) + H \cos \alpha(\xi)} + \frac{G(\xi)}{1 + Z(\xi)}, \quad (2)$$

sendo que,

$$F(\xi) = \frac{d}{d\xi} (R(\xi)) + H \frac{d}{d\xi} (\cos(\alpha(\xi))) \quad (3)$$

$$G(\xi) = H \frac{dK[\xi]}{d\xi} \quad \text{e} \quad Z(\xi) = 1 + HK(\xi).$$

As condições inicial e de contorno são:

$$\theta(\xi, \tau) = 0, \quad 0 < \tau < \tau_f, \quad \theta \leq \xi \leq 1 \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial \theta(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial \theta(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = -Q(\tau), \quad \tau > 0 \quad (5)$$

onde τ_f é o instante que determina o início da fusão.

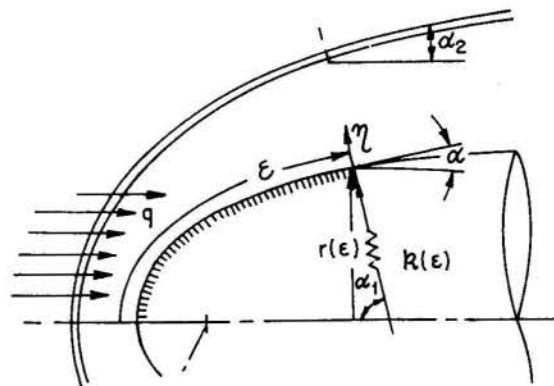


Figura (1) Geometria estudada.

Para tornar as equações (5) homogêneas, a seguinte transformação de variáveis é realizada:

$$\theta^*(\xi, \tau) = \theta(\xi, \tau) + \left[\frac{\xi^2}{2} - \xi \right] Q(\tau) \quad (6)$$

Substituindo a equação (6) em (1) tem-se:

$$Z^2(\xi) \frac{\partial \theta^*(\xi, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial \theta^*(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + D(\xi) \frac{\partial \theta^*(\xi, \tau)}{\partial \xi} + P(\xi, \tau) \quad (7)$$

onde:

$$P(\xi, \tau) = \left[-Z^2(\xi, \tau) \left(\frac{\xi^2}{2} - \xi \right) \frac{dQ(\xi, \tau)}{d\tau} \right] + [1 + (\xi - 1)D(\xi)]Q(\tau)$$

e as condições inicial e de contorno são dadas por:

$$\theta^*(\xi, \tau) = - \left(\frac{\xi^2}{2} - \xi \right) Q(\tau), \quad 0 < \tau < \tau_f, \quad 0 < \xi < 1 \quad (8)$$

$$\left. \frac{\partial \theta^*(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial \theta^*(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = 0, \quad \tau > 0. \quad (9)$$

A equação (7), que representa o problema antes da mudança de fase, é resolvida aplicando-se a TTIG, Özisik e Murray (1974), definindo-se o seguinte par de transformada integral e fórmula de inversão:

$$\tilde{\theta}_i^*(\tau) = \int_0^1 \psi_i(\xi) Z^2(\xi) \theta^*(\xi, \tau) d\xi \quad (10)$$

$$\theta^*(\xi, \tau) = \sum_{i=0}^{\infty} \psi_i(\xi) N_i^{-1} \tilde{\theta}_i^*(\tau) \quad (11)$$

onde $\psi_i(\xi) = \cos(\mu_i \xi)$ e $\mu_i = i\pi$, são respectivamente, as autofunções e os autovalores, e

$$N_i = \int_0^1 \cos^2(i\pi \xi) d\xi$$

é a norma da autofunção.

Substituindo a equação (10) na equação (7), obtém-se o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{\partial \tilde{\theta}_i^*(\tau)}{\partial \tau} + \mu_i^2 \tilde{\theta}_i^*(\tau) + g_i^*(\tau) = g_i^{**}(\tau) \quad (12)$$

onde:

$$g_i^*(\tau) = \int_0^1 \left[\theta^*(\xi, \tau) L \psi_i(\xi) - \psi_i(\xi) L \theta^*(\xi, \tau) \right] d\xi \quad (13)$$

$$g_i^{**}(\tau) = \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\theta}_j^*(\tau) A_{ij}(\tau) + g_i(\tau) \quad (14)$$

com:

$$g_i(\tau) = \int_0^1 \psi(\xi) P(\xi, \tau) d\xi \quad (15)$$

$$A_{ij}(\tau) = \frac{1}{N_1} \int_0^1 \psi(\xi) D(\xi) \frac{d\psi_i(\xi)}{d\xi} d\xi \quad (16)$$

e o operador L definido como:

$$L = - \frac{\partial^2(\quad)}{\partial \xi^2}$$

Aplicando-se a transformada integral na condição inicial, tem-se:

$$\tilde{\theta}_i^* = Q(0) \int_0^1 \left[1 + HK(\xi) \right] \left(\xi - \frac{\xi^2}{2} \right) \cos(i\pi \xi) d\xi \quad (17)$$

Da solução da equação (12) obtém-se o campo de temperatura da fase pré-ablativa:

$$\theta(\xi, \tau) = \theta_{av}(\tau) + \left(\frac{\xi^2}{2} - \xi \right) Q(\tau) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\psi_i(\xi)}{N_i} \tilde{\theta}_i^*(\tau) \quad (18)$$

onde $\theta_{av}(\tau)$ é o potencial médio que é definido em Mikhailov e Özisik (1984).

Depois de obtido o campo de temperatura na fase pré-ablativa, que consiste na condição inicial para a fase ablativa, procede-se a resolução das equações (1) a (5) para $\hat{\theta} = \theta - 1$. A fase ablativa envolve a determinação da posição do contorno em movimento. A posição é definida pela espessura $S(\tau)$ do material não fundido e o seu movimento define a velocidade de ablação, que é identificada pela equação de restrição.

Período Pré-Ablativo

$$Z^2 \frac{\partial \hat{\theta}(\xi, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \hat{\theta}(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + D(\xi) \frac{\partial \hat{\theta}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \quad (19)$$

para $t > t_f$, $S(\tau) < \xi < 1$, onde:

$$D(\xi) = \left[\frac{F(\xi)}{R(\xi) + H \cos \alpha(\xi)} - \frac{G(\xi)}{1 + Z(\xi)} \right],$$

com $F(\xi)$, $G(\xi)$ e $Z(\xi)$ dados pela equação (3).

Com as condições inicial e de contorno:

$$\hat{\theta}(\xi, \tau) = \theta(\xi, \tau) - 1 \quad \text{em} \quad \tau = \tau_f; \quad (20)$$

$$\left. \frac{\partial \hat{\theta}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = 0, \quad \left. \hat{\theta}(\xi, \tau) \right|_{\xi=S(\tau)} = 1 \quad (21)$$

com a equação de restrição:

$$\frac{\partial \hat{\theta}(\xi, \tau)}{\partial \xi} = v \frac{dS(\xi)}{d\tau} + Q(\xi), \quad \xi = S(\tau) \quad (22)$$

Para facilitar o desenvolvimento das equações anteriores, defini-se uma nova coordenada espacial, $\xi^* = 1 - \xi$. Assim denota-se a posição da fronteira de $\xi = S(\tau)$ por $\xi_f^*(\tau) = 1 - S(\tau)$.

Com isso, as equações (19) a (22) são reescritas na seguinte forma:

$$Z^2(\xi^*) \frac{\partial \hat{\theta}(\xi^*, \tau)}{\partial \tau} + L \hat{\theta}(\xi^*, \tau) = D(\xi^*) \frac{\partial \hat{\theta}(\xi^*, \tau)}{d\xi^*} \quad (23)$$

para $\tau > \tau_f$ e $0 < \xi^* < \xi_f^*(\tau)$, onde L é o operador matemático dado por:

$$L = - \frac{\partial^2}{\partial \xi^{*2}}$$

e as condições de contorno:

$$\left. \frac{\partial \hat{\theta}(\xi^*, \tau)}{\partial \xi^*} \right|_{\xi^*=0} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \hat{\theta}(\xi^*, \tau) \right|_{\xi^*=\xi_f^*(\tau)} = 0 \quad (24)$$

Com a nova coordenada espacial, a equação de restrição é reescrita como:

$$\frac{\partial \hat{\theta}(\xi^*, \tau)}{\partial \xi^*} - v \frac{d\xi_f^*(\tau)}{d\tau} = Q(\tau) \quad (25)$$

Para aplicar a TTIG, adota-se o seguinte problema auxiliar de autovalor transiente:

$$L \phi(\xi^*, \tau) = \lambda^2(\xi^*, \tau) \phi(\xi^*, \tau), \quad (26)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$\left. \frac{\partial \phi(\xi^*, \tau)}{\partial \xi^*} \right|_{\xi^* = 0} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \phi(\xi^*, \tau) \right|_{\xi^* = \xi_f^*(\tau)} = 0 \quad (27)$$

Da solução do problema auxiliar de autovalor obtém-se as autofunções e os autovalores:

$$\phi(\xi^*, \tau) = \cos(\lambda_i \xi^*); \quad \lambda_i(\tau) = \frac{(2i-1)\pi}{2\xi_f^*(\tau)} \quad (28)$$

para $i = 1, 2, 3, \dots$ e das propriedades da ortogonalidade obtém-se a norma da autofunção:

$$\hat{N}_i = \int_0^{\xi_f^*(\tau)} \cos^2(\lambda_i \xi^*) d\xi^* = \frac{\xi_f^*(\tau)}{2} \quad (29)$$

A autofunção normalizada é então dada por:

$$K_i(\xi^*, \tau) = \frac{\phi(\xi^*, \tau)}{\sqrt{N_i(\tau)}} \quad (30)$$

Multiplicando-se a equação(26) por $\hat{\theta}(\xi^*, \tau) \cdot [N_i(\tau)]^{-1/2}$, a equação (23) pela autofunção normalizada, somando membro a membro e aplicando sobre o resultado o operador integral $\int [\] d\xi^*$, tem-se:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\xi_f^*(\tau)} Z^2(\xi^*) K_i(\xi^*, \tau) \frac{\partial \hat{\theta}(\xi^*, \tau)}{\partial \tau} d\xi^* + \\ & + \lambda_i^2(\tau) \int_0^{\xi_f^*(\tau)} \hat{\theta}(\xi^*, \tau) K_i(\xi^*, \tau) d\xi^* = \\ & = - \int_0^{\xi_f^*(\tau)} [K_i(\xi^*, \tau) L \hat{\theta}(\xi^*, \tau) \\ & - \hat{\theta}(\xi^*, \tau) L K_i(\xi^*, \tau)] d\xi^* + \\ & + \int_0^{\xi_f^*(\tau)} K_i(\xi^*, \tau) D(\xi^*) \frac{\partial \hat{\theta}(\xi^*, \tau)}{\partial \xi^*} d\xi^* \quad (31) \end{aligned}$$

Define-se agora, o seguinte par transformada integral e transformada inversa:

$$\tilde{\theta}_i(\tau) = \int_0^{\xi_f^*(\tau)} K_i(\xi^*, \tau) \hat{\theta}(\xi^*, \tau) d\xi^* \quad (32)$$

e

$$\hat{\theta}(\xi^*, \tau) = \sum_{i=1}^{\infty} K_i(\xi^*, \tau) \tilde{\theta}_i(\tau) \quad (33)$$

Tomando-se a equação (32) e substituindo na equação (31), tem-se, após algumas manipulações, o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\sum_{j=1}^{\infty} B_{ij} \frac{d\tilde{\theta}_j(\tau)}{d\tau} + \lambda_i^2(\tau) \tilde{\theta}_i(\tau) + \sum_{j=1}^{\infty} A_{ij} \tilde{\theta}_j(\tau) = 0; \quad (34)$$

com:

$$B_{ij} = \int_0^{\xi_f^*(\tau)} Z^2(\xi^*) d\xi^*$$

onde, para $i \neq j$, tem-se:

$$A_{ij} = \frac{1}{\xi_f^*(\tau)} (2i-1)\pi [A_{ij}^*]$$

$$A_{ij}^* = \left[\frac{1}{\xi_f^*(\tau)} \frac{d\xi_f^*(\tau)}{d\tau} B_{ij}^{**} + \int_0^{\xi_f^*(\tau)} D(\xi^*) \text{sen}(J\xi^*) \cos(I\xi^*) d\xi^* \right] \quad (35)$$

sendo que:

$$B^{**} = \frac{1}{2} \left[\int_0^{\xi_f^*(\tau)} Z^2(\xi^*) \xi^* \text{sen}[(1-J)\xi^*] d\xi^* + \bar{B}^{**} \right],$$

onde:

$$\bar{B}^{**} = \int_0^{\xi_f^*(\tau)} Z^2(\xi^*) \xi^* \text{sen}[(1+J)\xi^*] d\xi^* \quad (36)$$

$$I = (2j-1) [2\xi_f^*(\tau)]^{-1}; \quad J = (2j-1) [2\xi_f^*(\tau)]^{-1} \quad (37)$$

Para $i = j$, tem-se:

$$\begin{aligned} A_{ij}(\tau) = & \xi_f^*(\tau)^{-2} (2j-1) \pi \left[\frac{1}{\xi_f^*(\tau)} \frac{d\xi_f^*(\tau)}{d\tau} B^{***} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \int_0^{\xi_f^*(\tau)} D(\xi^*) \text{sen}(2I\xi^*) d\xi^* \right] \quad (38) \end{aligned}$$

com

$$B^{***} = \int_0^{\xi_f^*(\tau)} Z^2(\xi^*) \text{sen}(2I\xi^*) d\xi^*,$$

para $i, j = 1, 2, 3, \dots$

A condição inicial é obtida substituindo a equação (32) nas equações (19) e (21):

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}_i(\tau_f) = & \frac{2\sqrt{2}}{(2i-1)\pi} \left\{ [\theta_{av}(\tau_f) - Q(\tau_f)] \right. \\ & \left[1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{8}{(2i-1)^2 \pi^2} \right) \right]^{-1} + Q(\tau_f) \right\} + \\ & + \frac{4\sqrt{2}}{\pi} (2i-1) (-1)^{i+1} \sum_{R=1}^{\infty} \tilde{\theta}_R(\tau_f) \frac{(-1)^R}{(2i-1)^2 - 4R^2} \quad (39) \end{aligned}$$

A equação de restrição, equação (25), que apresenta a velocidade ablativa, é escrita na forma transformada, como segue:

$$\frac{d\xi_f^*(\tau)}{d\tau} = \frac{Q(\tau)}{v} - \frac{\pi\sqrt{2}}{2v} \left[\frac{1}{\xi_f^*(\tau)} \right]^{3/2} \sum_{i=1}^{\infty} (2i-1) \tilde{\theta}_i(\tau) (-1)^{i+1} \quad (40)$$

As equações (34) e (40) formam um sistema de equações diferenciais ordinárias acoplada de ordem infinita, cuja solução fornece o perfil de temperatura no sólido, a profundidade ablativa $S(\tau)$, do material sublimado e a velocidade de ablação

$$V(\tau) = \frac{d\xi_f^*(\tau)}{d\tau}$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para fins computacionais, a expansão referente ao sistema acoplado dado pelas equações (34) e (40) é truncada para uma ordem N finita. Com o uso das rotinas DGEAR e DECADRE da Biblioteca IMSL (1979), foi implementado um algoritmo para a determinação dos parâmetros ablativos de interesse. A evolução do perfil de temperatura antes, durante e após a mudança de fase é apresentado na Figura (2). Para fins de verificação, foi analisado o caso em que o raio é grande para a simulação do problema da placa plana. O parâmetro τ_f que indica o início do processo de fusão, e corresponde com aquele obtido por Chung (1985) e Diniz et al (1990), $\tau_f = 0,21$.

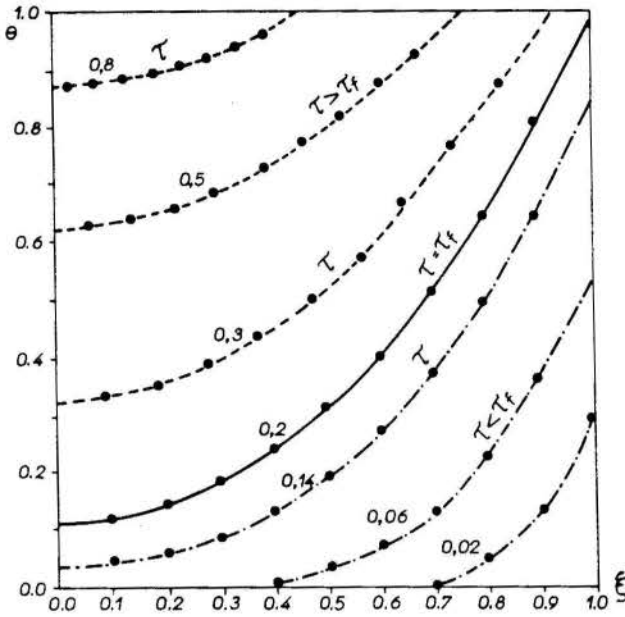


Figura (2) Perfil de temperatura quando simulado placa plana. $T_f=0,196$.

Os resultados obtidos para o deslocamento da fronteira móvel $S(\tau)$ e a taxa de ablação $V(\tau)$ são apresentados na Figura (3) e são comparados com aqueles obtidos por Diniz et al (1990) e Chung (1985), quando simulado como placa plana.

CONCLUSÃO

De acordo com os valores obtidos, verifica-se que a técnica adotada é eficiente na solução do problema de difusão de calor e massa, uma vez que os parâmetros de interesse, τ_f , $S(\tau)$ e $V(\tau)$, são confirmados com aqueles apresentados na literatura.

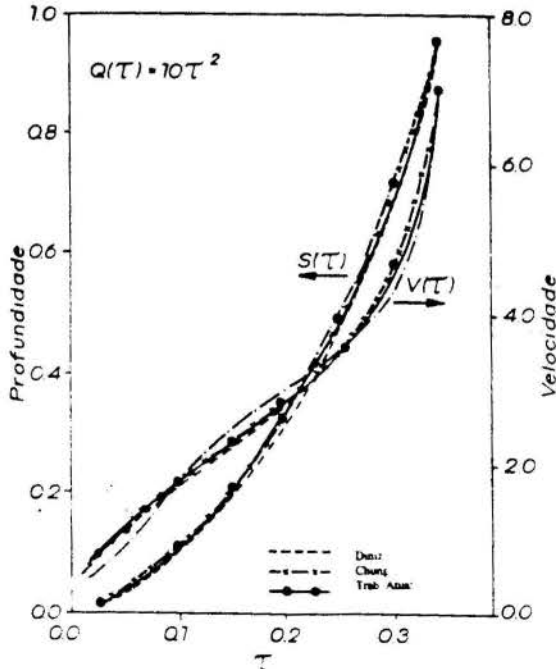


Figura (3) Valores da profundidade e velocidade ablativa. Comparando com a placa plana, para $\tau_f=0,196$ e $Q=2$.

NOMENCLATURA

$\theta(\xi, \tau)$ = temperatura adimensional $= (T - T_0) / (T_f - T_0)$;

τ = tempo adimensional $= \frac{\alpha t}{\ell^2}$

H = coordenada do eixo normal à superfície da geometria de revolução $= \eta / \ell$

R = raio adimensional do cilindro da geometria de revolução $= \frac{r(\epsilon)}{\ell}$

$K(\xi)$ = Raio de curvatura adimensional da curva geratriz de revolução $= K / \ell$

$\alpha(\xi)$ = ângulo tangente à superfície no pé da normal.

BIBLIOGRAFIA

- Anderson, D.A., Tannehill, J.C. and Pletcher, R.H., 1984, "Computational Fluids Mechanics and Heat Transfer", McGraw-Hill, N.Y.
- Chung, B.T.F. and Hsiao, J.S., 1985, "Heat Transfer With Ablation in a Finite Slab Subjected to Time-Variant Heat Fluxes, AIAA Journal, vol.23, nº 1, pp.145-150.
- Cotta, R.M., 1993, "Integral Transforms in Computational Heat and Fluid", CRC Press, Inc. 2000 Corporate Blvd, N.N., Boca Raton, Florida, U.S.
- Diniz, A.J., Silva, J.B.C., Zapparoli, E.L., 1991, "Condução de Calor com Proteção Térmica em Corpos de Revolução", XI COBEM, dezembro, São Paulo, Brasil.
- Diniz, A.J., Aparecido, J.B. and Cotta, R.M., 1990, "Heat Conduction With Ablation in a Finite Slab", Heat and Technology, vol.8, nº 3-4, Bologna, Italy.
- Goodman, T.R., 1958, "The Heat Balance Integral and its Application to Problems Involving a Change of Phase", Transactions of the ASME, vol.80, pp.335-342.
- Hildebrand, F.B., 1962, "Advanced Calculus for Applications", PRENTICE-HALL MATHEMATICS SERIES, Inc., Englewood Cliffs, N.J.
- IMSL Library, 1979, Edition 7, GNB Building, 7500 Ballaire Blvd, Houston, Texas 77036.
- Lacaze, H., 1967, "La Protection Thermique Par Ablation", Doc-Air-Espoce, nº 105 - Jecillet.
- Mikhailov, M.D. and Özisik, M.N., 1984, "Unified Analyses and Solutions of Heat and Mass Diffusion, John Wiley & Sons, New York.
- Nakahashi, K., 1980, "A Study of Transient Ablation of Blunt Bodies", Institut of Space and Aeronautical Science, Report nº 581, Tokyo, July.
- Özisik, M.N. and Murray, R.L., 1974, "On the Solution of Linear Diffusion Problems With Variable Boundary Condition Parameters", J. Heat Transfer, vol.96, pp.48-51.
- Özisik, M.N., 1980, "Heat Conduction, John Wiley, New York.
- Steg, L. and Lew, H., 1962, "Hypersonic Ablation; In Agard Meeting on High-Temperature-Aspects of Hypersonic Fluid Dynamics", vol.68, part 6, pp.629-680.
- Vallerani, E., 1974, "Integral Technique Solutions to a Class of simple Ablations Problems", Meccanica, june.
- Yovanovich, M.M., 1974, "Heat Transfer With Thermal Control Applications", Ablation, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol.39, pp.375-489.

ABSTRACT

Heat transfer within bodies followed of phase change is of major interest in several engineering applications situations. This

problems is essentially a simple special case of ablations, that involve a moving boundary at a rate to be determined as part of the solution.

Heat conduction by phase change in axisymmetric bodies subjected to transient boundary heat flux is analytically studied by the application of the Generalized Integral Transform Technique.

Results of interest for the problems of phase change are the ablation depth and the speed of the moving boundary.



SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE MUDANÇA DE FASE USANDO FORMULAÇÃO EM UM DOMÍNIO COM ACOMPANHAMENTO DA FRENTE



Renata S. Crespo

Depto. de Eng. Mecânica - Univ. Federal do Espírito Santo
29060-970 - Vitória - ES - Brasil

Clovis R. Maliska

Depto. de Eng. Mecânica - Univ. Federal de Santa Catarina
88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil

RESUMO

Este trabalho propõe um método para simulação numérica de problemas de mudança de fase, baseado principalmente na idéia de dar um melhor tratamento numérico à frente de mudança de fase. O novo método leva a excelentes soluções unidimensionais, sendo capaz de prever a posição da interface com erros médios da ordem de 0,5% com relação à solução exata. O método é estendido ao caso bidimensional, introduzindo a utilização de coordenadas generalizadas e malha móvel. São propostos dois tipos de malhas móveis, gerando duas metodologias diferentes, porém, com a mesma concepção.

INTRODUÇÃO

O grande número de aplicações práticas é a principal motivação para o estudo da mudança de fase (mdf) sólido/líquido, como, por exemplo, em processos metalúrgicos, ou em instalações de armazenamento de energia por meio de material de mudança de fase. Trata-se de um problema numérico importante, classificado na categoria dos problemas de "fronteira móvel", devido à existência da interface sólido/líquido se movendo no domínio durante a solução. Existem dois tipos principais de solução, o método da temperatura, no qual a posição da frente é determinada e o problema resolvido separadamente em dois domínios, com a aplicação de condições na interface; e o método da entalpia, no qual não se conhece a posição da frente e o problema é resolvido com formulação única para todo o domínio. No método da entalpia a existência da mdf só é "noticiada" por meio do termo-fonte da equação da energia, surgindo, então, uma infinidade de métodos baseados na maneira de tratar este termo-fonte. O método proposto não se enquadra nestes dois tipos clássicos. Possui uma nova concepção, tratando-se de um método em um domínio, como o método da entalpia, mas com o acompanhamento da interface, como o método da temperatura, porém, sem os inconvenientes da aplicação de condições de interface. Por isto foi denominado *one-domain front-tracking method (ODFT)*. A concepção do novo método é apresentada para solução unidimensional, com comparação de resultados com relação à solução exata. Uma extensão do método para geometrias bidimensionais é apresentada, sendo propostos dois tipos de malhas móveis, gerando metodologias diferentes. Soluções bidimensionais são obtidas para o caso sem convecção na fase líquida.

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

A formulação utilizada é a mesma do método da entalpia, porém com a temperatura como variável dependente da equação de conservação de energia, ficando

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) \quad (1)$$

onde c é o calor específico, λ é o calor latente de fusão e f é a fração de líquido, ou seja, f é a relação entre a entalpia latente e o calor latente do material, $f=H/\lambda$.

A IDEIA BÁSICA DA NOVA PROPOSTA

O novo método propõe um tratamento numérico para a frente de mdf que forneça um nível maior de detalhamento junto à interface, permitindo uma solução mais precisa do problema. As modificações se encontram basicamente na maneira de discretizar a equação junto à interface, no cálculo da temperatura no volume em mdf, e no posicionamento da interface. A seguir estes aspectos são discutidos para a geometria unidimensional.

A Discretização da Equação. A Eq. (1) discretizada no tempo para um volume elementar, mostrado na Fig. 1, fica

$$\rho c (T_P - T_P^0) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} - (q_e - q_w) = \rho \lambda (f_P^0 - f_P) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} \quad (2)$$

onde

$$q_e = \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e, \quad q_w = \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \quad (3)$$

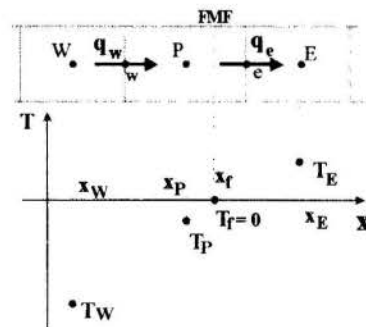


Figura 1 - Volume em mudança de fase

Os fluxos nas faces do volume em mdf comumente são calculados da mesma forma que nos demais volumes do domínio, utilizando um esquema de diferenças centrais simples (d.c.s.), como mostrado na Eq. (4). No novo método, utiliza-se a posição da interface para o cálculo dos fluxos de calor nas faces do volume em mdf, como apresentado na Eq. (5), uma vez que a temperatura da frente, T_f é conhecida e usualmente tomada como referência, resultando $T_f=0$.

$$\begin{cases} q_e = k_p \frac{T_E - T_p}{\Delta x_e} \\ q_w = k_p \frac{T_p - T_w}{\Delta x_w} \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} q_e = k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \\ q_w = k_- \frac{T_f - T_w}{x_f - x_w} \end{cases} \quad (5)$$

Esta aproximação dos fluxos levando em consideração a interface, Eq. (5), foi utilizada inicialmente por Tacke (1985). Em Crespo (1996) mostra-se que a equação da energia é melhor aproximada com a utilização das Eqs. (4-5), como feito por Tacke. É importante observar que, com esta aproximação, os coeficientes da equação discretizada passam a depender da posição da interface, x_f , nos volumes vizinhos ao em mdf.

A Temperatura no Volume em Mudança de Fase. Para a temperatura no volume em mdf utiliza-se o valor obtido por interpolação linear com relação aos vizinhos, ao invés do valor proveniente da solução da equação da energia neste volume, ou do valor da temperatura de mudança de fase, como feito por Voller (1990). A equação da energia é usada para o cálculo da fração de líquido no volume e, conseqüentemente, a posição da interface. Com relação à Fig. 1, o cálculo de T_p é feito como a seguir,

$$T_p = \begin{cases} \frac{x_p - x_f}{x_E - x_f} T_E & \text{se } x_f / x_p < 1 \\ \frac{x_p - x_f}{x_w - x_f} T_w & \text{se } x_f / x_p > 1 \end{cases} \quad (6)$$

A Posição da Interface. A Eq. (2) representa um balanço de energia no volume elementar P de tal forma que o primeiro termo representa a variação da energia sensível no intervalo de tempo Δt , o segundo termo mostra um balanço de fluxos de calor nas faces do volume e o termo-fonte contabiliza a variação da energia latente no volume. Conhecido um perfil de temperatura, podem-se calcular os termos do lado esquerdo da Eq. (2) e obter o valor da fração de líquido no instante atual, f_p . O cálculo da variação sensível, VAR, no volume em mdf é feito pela variação da energia sensível, ES, integrada no volume, uma vez que a temperatura no centro deste volume não representa um valor médio e sim pontual, obtido por interpolação linear. A Fig. 2 mostra uma representação gráfica da variação sensível no volume, que é calculada usando as Eqs (7-9) a seguir.

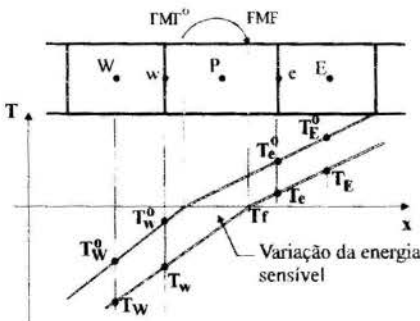


Figura 2 - Variação da energia sensível num volume em mdf

$$ES = \rho c [\bar{T}_w (x_f - x_w) + \bar{T}_e (x_e - x_f)] \quad (7)$$

onde

$$\begin{aligned} \bar{T}_w &= \frac{T_f + T_w}{2} = \frac{T_w}{2} = \frac{1}{2} \frac{x_f - x_w}{x_f - x_w} T_w, \\ \bar{T}_e &= \frac{T_f + T_e}{2} = \frac{T_e}{2} = \frac{1}{2} \frac{x_e - x_f}{x_e - x_f} T_e. \end{aligned} \quad (8)$$

$$VAR = \frac{(ES - ES^0)}{\Delta t} \quad (9)$$

O valor E^0 é armazenado do tempo anterior no caso da frente permanecer no mesmo volume. Caso contrário, a energia sensível existente em um volume que não estava em mdf é calculada como

$$ES^0 = \rho c T_p^0 \Delta x_p \quad (10)$$

A nova posição da interface é facilmente obtida a partir da nova fração de líquido calculada no balanço para geometria unidimensional. De acordo com a Fig. 2, pode-se dizer que

$$x_f = x_e - f_p \Delta x_p \quad (11)$$

Como no método proposto os fluxos nas faces do volume em mdf são calculados com relação à posição da interface é interessante que uma primeira avaliação de x_f seja feita para cada tempo, com a finalidade de reduzir o número de iterações necessárias para a convergência. Utiliza-se simplesmente a aproximação de velocidade de deslocamento constante para a interface a fim de prever a sua nova posição após um avanço de tempo.

GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO

O desempenho do novo método para problemas bidimensionais será mostrado para a categoria de problemas nos quais se pode alinhar uma das coordenadas da malha à frente de mdf. A solução numérica adotada utiliza malha estruturada, e, portanto, os volumes elementares da malha discreta são delimitados por linhas coordenadas. A necessidade de alinhamento da malha à posição da frente de mdf surge por questões numéricas, para facilitar:

- o cálculo das derivadas com relação à posição da interface,
- o cálculo da posição da interface a partir do valor da fração de líquido nos volumes em mdf, resultante do balanço de energia nestes volumes.

Surge a necessidade de utilização de coordenadas generalizadas para que seja possível o alinhamento da malha à posição da interface e também para o tratamento de geometrias arbitrárias. Além disto, utiliza-se malha móvel para que o alinhamento se dê mesmo com o movimento da interface no tempo. Isto é, a malha se alinha à interface à medida que esta se deforma ao longo do tempo. São propostos dois tipos de malha móvel:

- **malha coincidente com a interface.** É a malha móvel comumente utilizada nas soluções pelo método da temperatura, existindo uma mesma linha da malha sempre coincidente com a interface, separando as duas fases. Tem o inconveniente de possuir número fixo de malhas em cada domínio, que se expande ou comprime à medida que o domínio cresce ou diminui.

- **malha ajustável**, que não necessariamente coincide com a interface, apenas, de tempos em tempos se ajusta à posição desta, tornando-se aproximadamente paralela. Neste caso, a frente de mdf caminha pela malha discreta, mudando de volume após alguns avanços de tempo. Assim sendo, não existe mais a restrição de número constante de malhas em cada domínio. Porém, como geralmente, à medida que a interface caminha ela vai se deformando, a malha deve se ajustar para manter um certo paralelismo entre uma das linhas coordenadas e a interface.

A Malha Coincidente Com a Interface. Como se vê na Fig. 3, existe uma coluna de volumes em mdf, que são limitados pela posição da interface no instante anterior e pela atual. A temperatura nestes volumes é conhecida, igual à temperatura de mdf, feita nula como referência. A equação da energia é, então, utilizada para calcular o volume de material que mudou de fase, ou seja, para posicionar corretamente a interface. Este método é semelhante ao método de Yoller (1990), mas agora, com malha móvel, permitindo que a temperatura seja feita nula somente no volume de material que realmente se encontra em mdf.

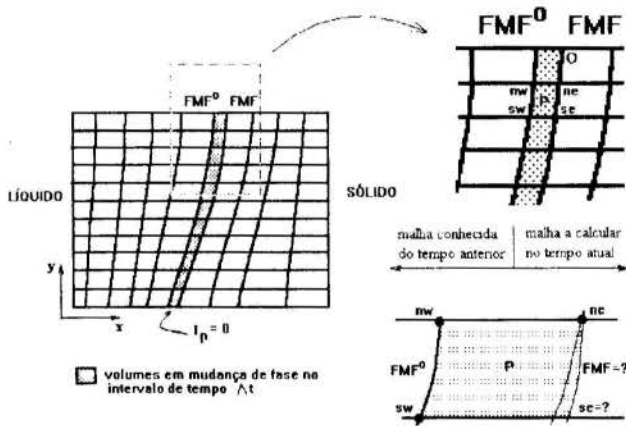


Figura 3 - Malha coincidente com a interface

Com base na Fig. 3, verifica-se que a parte da malha que se encontra até a posição da interface no tempo anterior (FMF^0) só se move uma vez para cada avanço de tempo, não necessitando ser convergida junto com a solução. A linha coincidente com a interface é ajustada por método iterativo, e as linhas após a interface são distribuídas de maneira algébrica, geralmente com espaçamento constante, sobre o restante do domínio. A geração da malha parte de um dos pontos onde a interface encontra um contorno, por exemplo, o ponto "o" representado na Fig. 3, no qual a interface encontra a face norte do domínio. Então, a malha é gerada de cima para baixo, encontrando para cada volume em mdf a posição do ponto "se", em função dos demais, "nw", "sw", "ne". O valor do jacobiano inverso, que representa a porção de material que muda de fase no avanço de tempo Δt , é obtido do balanço de energia nos volumes em mdf, uma vez que para eles a fração de líquido atual é igual a um. Através do cálculo das derivadas que compõem a definição do jacobiano da transformação obtém-se uma equação para a ordenada do ponto "se" com relação às coordenadas dos demais pontos de vértices do volume cujo jacobiano é conhecido. Este procedimento encontra-se detalhado em Crespo (1996).

A Malha Ajustável. O segundo método se assemelha mais ao método unidimensional descrito inicialmente. A posição da

interface é acompanhada em cada linha que liga os centros de volume. A nova posição da interface é obtida da fração de líquido, calculada para os volumes em mdf através do balanço de energia. Para relacionar a fração de líquido à posição da interface, considera-se que esta é paralela a uma das linhas coordenadas, no caso linhas ξ , como mostrado na Fig. 4.

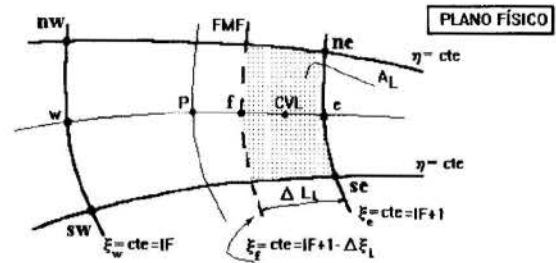


Figura 4- Relação entre a fração de líquido e a posição da interface

A fração de líquido é a relação entre a área de líquido, A_L , e a área total do volume P , A_P , dada por

$$f = A_L/A_P \quad (12)$$

Conforme mostrado em Maliska (1995), a área no plano físico está relacionada à área no plano transformado pelo inverso do jacobiano da transformação, I . Como arbitra-se o valor unitário à área do volume no plano transformado, o inverso do jacobiano é a própria área do volume no plano físico. Então, resulta

$$f = I_{CVL}/I_P \quad (13)$$

Considerando que as variações são lineares dentro do volume, conclui-se que as derivadas para o volume de líquido podem ser dadas por

$$(x_\xi)_{CVL} = \Delta \xi_L (x_\xi)_P \quad (14)$$

$$(y_\xi)_{CVL} = \Delta \xi_L (y_\xi)_P$$

$$(x_\eta)_{CVL} = \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) x_{\eta,e} + \Delta \xi_L x_{\eta,w} \right] \quad (15)$$

$$(y_\eta)_{CVL} = \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) y_{\eta,e} + \Delta \xi_L y_{\eta,w} \right]$$

O inverso do jacobiano no centro do volume líquido fica

$$I_{CVL} = \Delta \xi_L \left\{ x_{\xi,P} \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) y_{\eta,e} + \Delta \xi_L y_{\eta,w} \right] - \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) x_{\eta,e} + \Delta \xi_L x_{\eta,w} \right] y_{\xi,P} \right\} \quad (16)$$

Observa-se que se $x_{\eta,e} = x_{\eta,w}$ e $y_{\eta,e} = y_{\eta,w}$ existe proporcionalidade entre as áreas, o que é expresso pela Eq. (16), resultando

$$I_{CVL} = \Delta \xi_L I_P \quad (17)$$

Substituindo a Eq. (16) na expressão da fração de líquido, Eq. (13), obtém-se uma equação de segundo grau para $\Delta \xi_L$. Com o valor de $\Delta \xi_L$, pode-se determinar o valor da coordenada ξ da frente de mdf no volume, isto é, o valor de ξ_f , como representado

na Fig. 4. As coordenadas do ponto f , que posiciona a interface no plano físico, são obtidas a partir do valor de ξ_f

$$\begin{aligned} x_{f,P} &= \frac{x_{nw} + x_{sw}}{2} + x_{\xi,P} (\xi_{f,P} - IF) \\ y_{f,P} &= \frac{y_{nw} + y_{sw}}{2} + y_{\xi,P} (\xi_{f,P} - IF) \end{aligned} \quad (18)$$

O método admite um certo desalinhamento entre a interface e a malha. Estabeleceu-se um critério para o realinhamento da malha à posição da interface, utilizando o chamado “fator de desalinhamento”, FD , que é a maior diferença entre os valores de ξ_f da coluna de volumes em mdf . Assim, quanto menor o desalinhamento admitido, melhor será a aproximação do cálculo da posição da interface, pois, para ele considerou-se a interface perfeitamente alinhada à malha. Em contrapartida, mais correções da malha serão necessárias, aumentando o tempo de processamento para a solução do problema. Quando o FD atinge o valor máximo admissível, a primeira linha $\xi = cte$ após a interface é recalculada a fim de ficar paralela a esta. As linhas anteriores não são ajustadas e as demais linhas após esta primeira são redistribuídas no restante do domínio.

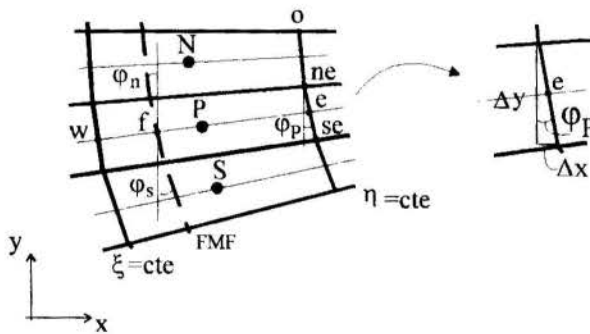


Figura 5 - Cálculo do ângulo da interface

O alinhamento da malha à posição da interface é feito encontrando-se o ângulo de inclinação da interface com relação ao eixo y , por exemplo, e fazendo a primeira linha após a interface paralela a ela. Partindo-se de um dos extremos da linha, denominado ponto “ o ” na Fig. 5, os demais pontos são obtidos por meio do ângulo conhecido da interface. A Fig. 5, mostra os ângulos da interface e da malha, tal que

$$\varphi_p = \frac{\varphi_n + \varphi_s}{2} = \text{tg}^{-1} \left(\frac{\Delta x}{\Delta y} \right) \quad (19)$$

RESULTADOS

Para a geometria unidimensional, as soluções obtidas com o presente método ($ODFT$) são comparadas à solução exata de Neumann (Carslaw & Jaeger, 1959), e à solução obtida usando o método da entalpia desenvolvido por Voller, apresentado em Voller (1990) e Voller & Swaminathan (1993). Os gráficos apresentam as soluções com relação ao tempo adimensional dado em termo do Fourier, $Fo = \alpha t / L^2$, onde α é a difusividade térmica e L o comprimento característico do problema. As soluções são obtidas para diversos valores do número de Stefan,

definido genericamente como $Ste = (c_L T_L - c_S T_S) / \lambda$, onde c é o calor específico do material, T a temperatura, λ o calor latente de fusão e os subíndices L e S se referem respectivamente à fase líquida e à sólida. Para a geometria bidimensional as soluções são comparadas novamente com soluções obtidas com o método de Voller (1990) e com alguns dados da literatura.

Resultados Unidimensionais com Propriedades Contínuas.

A Fig. 6 compara históricos de temperatura na posição $x=0,175$, e a Fig. 7 apresenta a posição da interface no tempo para vários valores de Ste . Os avanços de tempo foram $\Delta Fo = 0,002$ em todos os casos, menos para $Ste=5,0$, quando utilizou-se $\Delta Fo = 0,001$.

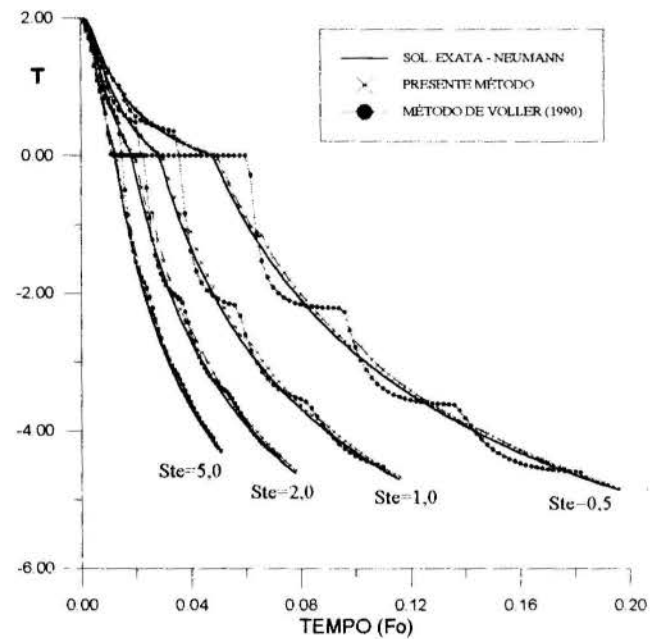


Figura 6 - Histórico de temperatura no ponto $x=0,175$

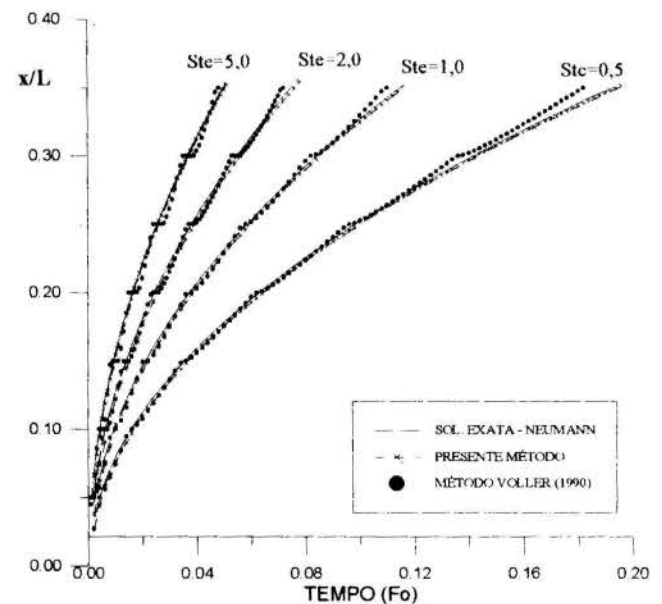


Figura 7 - Posição da interface no tempo

Verifica-se que o fato do método de Voller fazer a temperatura nula no volume em mdf cria uma série de "degraus" na curva de temperatura, cada um correspondendo a um volume da malha. Esta é uma característica das soluções com o método da entalpia. Também na curva de posição da interface é possível distinguir os volumes da malha, uma vez que o método, de uma forma geral, tende a atrasar a posição da interface no início dos volumes e acelerá-la no final dos volumes. Este comportamento é facilmente observado na Fig. 7, lembrando que a malha é uniforme com $\Delta x=0,05$. Já para o método com acompanhamento da interface - *ODFT* o erro é praticamente constante, independentemente da posição da interface na malha. A Tabela 1 compara os erros médios percentuais nos cálculos da posição da interface, obtidos pela média dos módulos dos erros da solução em cada tempo, descartando-se os dois primeiros.

Tabela 1 - Erro médio percentual na posição da interface

Ste	0,5	1,0	2,0	5,0
Voller	1,54%	1,57%	2,30%	3,22%
ODFT	1,12%	1,25%	1,68%	1,73%

Não houve qualquer cuidado adicional para redução dos erros ou otimização da solução. Particularmente o novo método melhora em muito o seu desempenho com um refinamento dos avanços de tempo no início da solução, quando os gradientes são maiores. Mesmo assim, verifica-se que os erros percentuais médios são significativamente menores para tempos de processamento de mesma ordem.

Resultados Unidimensionais com Propriedades Descontínuas

A fim de mostrar a habilidade do método *ODFT* em resolver problemas com diferentes propriedades térmicas nas fases, utiliza-se o problema teste proposto por Lee & Tzong (1991), para o qual $Ste=0,5$; $k_s/k_l=5,0$ e $c_s/c_l=0,5$.

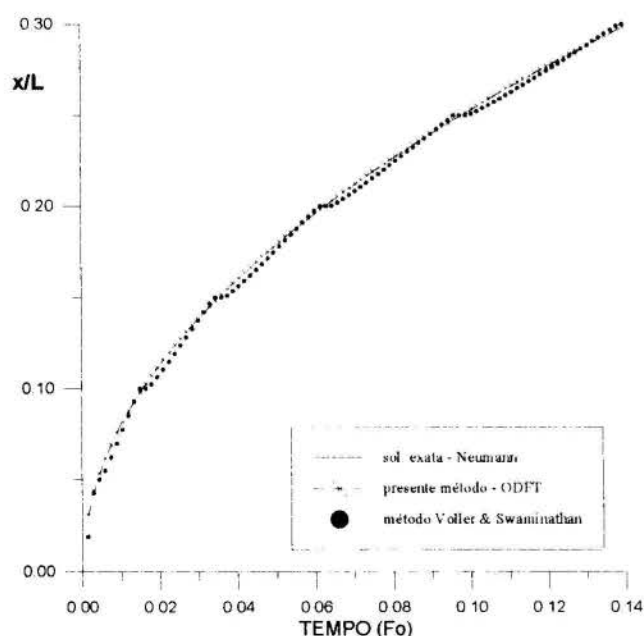


Figura 8 - Posição da interface no problema com variáveis descontínuas

Voller & Swaminathan (1993) utilizam este mesmo problema para apresentação de resultados da aproximação, utilizando a transformação de Kirchhoff, que possibilita a resolução de problemas com propriedades descontínuas usando o método da entalpia de Voller (1990). Os resultados do presente trabalho são comparados aos obtidos com o método de Voller & Swaminathan (1993) e à solução exata na Fig. 8. Verifica-se que o comportamento das soluções é parecido com o caso de propriedades constantes. No caso de propriedades descontínuas a solução numérica é mais rigorosa, por isto, utilizou-se um avanço de tempo menor, $\Delta Fo=0,00015$, resultando em um erro percentual médio menor para o novo método *ODFT*, $E%=0,52\%$, e maior para o método de Voller, $E%=1,71\%$.

Resultados Bidimensionais

O problema da mdf em um prisma quadrado infinito, a partir das suas faces, é muito conveniente para testar o desempenho de novos métodos de solução e tem sido utilizado por muitos autores. Utiliza-se neste trabalho especificamente o problema resolvido por Crowley (1978) e posteriormente por diversos autores, entre eles Kim & Kaviany (1990), para o qual $Ste=1/1,561=0,6406$, tratando-se da solidificação de um material inicialmente à temperatura de mdf, sendo, portanto um problema de Stefan. O problema é resolvido em um octante, devido à sua simetria. Inicialmente obtém-se a solução do problema usando **malha fixa** no domínio, com linhas $\eta=cte$ na direção radial e linhas $\xi=cte$ iniciando paralelas à parede do prisma e se tornando circulares. Mostra-se em Crespo(1996) que as soluções obtidas com as malhas 10×10 , 20×10 e 20×20 são praticamente coincidentes, distanciando-se apenas no final da solidificação do domínio. Dois trabalhos apresentam valores para o tempo total de solidificação. Em termos do tempo adimensional ($Fo=\alpha t/L^2$) Crowley [1978] obteve 0,625, e Kim & Kaviany [1990] apresentam o valor de 0,626, utilizando uma malha de 20×20 volumes no octante. A Tabela 2 mostra uma comparação do tempo total de solidificação (Fo_T) do domínio para as três malhas com o método *ODFT* e com o método de Voller (1990). Os avanços de tempo utilizados foram os mesmos para todos os métodos, valendo $\Delta Fo=0,001$ nos vinte primeiros passos e passando para $\Delta Fo=0,002$ até o fim da solução. Os tempos de CPU são para solução em um microcomputador tipo 486/66mhz.

Tabela 2 - Comparação das soluções com malha fixa

malha	Método <i>ODFT</i>		Método Voller	
	Fo_T	CPU(s)	Fo_T	CPU(s)
10x10	0,616	22	0,615	19
20x10	0,626	48	0,620	38
20x20	0,624	93	0,620	76

O mesmo problema é resolvido com **malha móvel** no método *ODFT*. Inicialmente utilizando a **malha ajustável** com 10×10 volumes, para três valores de fator de desalinhamento $FD=0,05$, $0,15$ e $0,3$.

Tabela 3 - Comparação entre soluções com malha ajustável

FD	N. MALHAS	Fo_T
0,05	9	0,615
0,15	7	0,613
0,30	5	0,613

A tabela 3 apresenta os tempos totais de solidificação nos três casos e o número de malhas utilizadas ao longo da solução, isto é, a inicial mais as ajustadas pelo método. A Fig. 9 mostra as curvas de posição x da interface na fronteira norte e na diagonal, comparadas à solução com malha fixa 10×10 volumes no domínio. Como previsto, à medida que se aumenta o FD a solução se deteriora, pois o método considera que a interface é paralela a linhas ξ . Este fato pode ser verificado através da solução com $FD=0,3$. Percebe-se que em certos momentos a solução junto à diagonal fica bastante alterada, concluindo-se que este valor de FD é muito elevado.

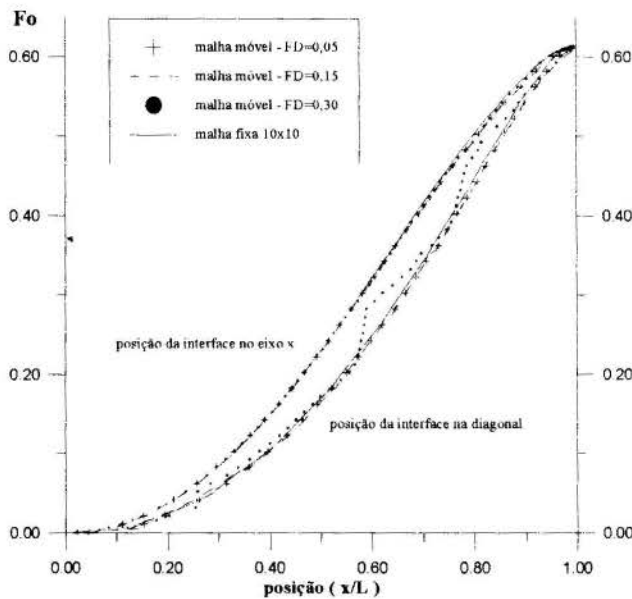


Figura 9 - Previsão da posição da frente com malha ajustável.

A solução usando **malha coincidente com a interface** também foi obtida para malha 10×10 , só que inicialmente comprimida, se expandindo à medida que o domínio sólido aumenta.

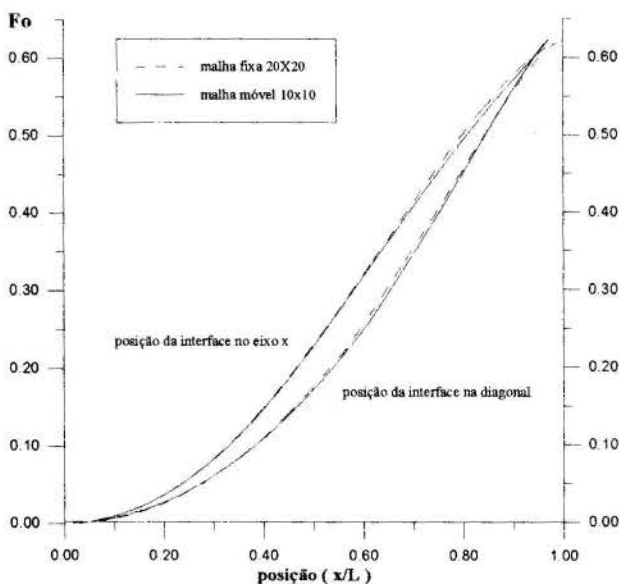


Figura 10 - Solução para malha coincidente com interface

A Fig. 10 mostra as curvas de posição x da interface na fronteira norte e na diagonal, comparadas à solução com malha fixa 20×20 volumes no domínio. Verifica-se uma excelente concordância entre as soluções. Porém, o método apresentou problema no final do domínio, onde a interface tende a se reduzir a um ponto. Por isto, o cálculo do tempo total de solidificação com este método fica prejudicado neste caso. Mas esta é apenas uma peculiaridade da geometria deste problema específico, não configurando um problema do método propriamente dito.

CONCLUSÕES

Um novo método é proposto, o qual não se enquadra em nenhuma das duas linhas em que se vinha historicamente pesquisando. Este é um fato novo na área, que poderá permitir grandes avanços futuros. O método em um domínio com acompanhamento da frente - *ODFT* apresenta excelentes resultados unidimensionais e boas soluções bidimensionais. Dois novos algoritmos para adaptação da malha à posição da interface foram desenvolvidos, mostrando bons resultados.

REFERÊNCIAS

- Carslaw, H. S.; Jaeger, J. C.; "Conduction of Heat in Solids", Clarendon Press, Oxford (1959)
- Crespo, R. S.; "Solução Numérica de Problemas de Mudança de Fase Usando Formulação em Um Domínio com Acompanhamento da Frente", Tese de Doutorado - UFSC (1996)
- Crowley, A. B.; "Numerical Solution of Stefan Problems", Int. J. Heat Mass Transfer, V21, p215-219 (1978)
- Kim, C.-J., Kaviani, M.; "A Numerical Method for Phase-Change Problems With Convection and Diffusion", Int. J. Heat Mass Transfer, V35, p457-467 (1992)
- Lee, S. L., Tzong, R. Y.; "An Enthalpy Formulation for Phase Change Problems With a Large Thermal Diffusivity Jump Across the Interface", Int. J. Heat Mass Transfer, V34, p1491-1502 (1991)
- Maliska, C. R.; "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, RJ, Brasil (1995)
- Tacke, K.-H.; "Discretization of the Explicit Enthalpy Method for Planar Phase Change", Int. J. Num. Meth. Engng., V21, p543-554 (1985)
- Voller, V. R.; "Fast Implicit Finite-Difference Method for the Analysis of Phase Change Problems", Num. Heat Transfer, B, V.17, p155-169, (1990)
- Voller, V. R., Swaminathan, C. R.; "Treatment of Discontinuous Thermal Conduction in Control-volume Solutions of Phase-Change Problems", Num. Heat Transfer, B, V.24, p161-180, (1993)

ABSTRACT

The method proposed in this work advances a new idea, where a better treatment is giving to the moving front without the inconvenience of applying conditions at the interface. The method is able of predicting the position of the moving front with 0.5% error when compared whit analytical solutions. The method is generalized using curvilinear coordinate systems and moving grids. Two moving grid methods are proposed. One-dimensional and two-dimensional problems are solved and compared with available results in the literature.



ANÁLISE TRIDIMENSIONAL DA SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS ATRAVÉS DE UMA ABORDAGEM NUMÉRICA BASEADA NA ANALOGIA ENTRE SISTEMAS TÉRMICOS E CIRCUITOS ELÉTRICOS

Carlos A. dos Santos; Noé Cheung; Jaime A. Spim Junior; Amauri Garcia

Cx.P. 6122 - CEP. : 13083-970 Campinas - SP - Brasil Tel.: (019) 239.7966 //
239.7952 - Fax: (019) 239.3722



RESUMO

O presente trabalho apresenta uma modificação na formação das malhas do Método de Diferenças Finitas (MDF), objetivando um mapeamento de peças que envolvam geometria cilíndrica e esférica. O modelo proposto foi aplicado sobre um sistema composto por molde cilíndrico com base semi esférica e resfriado à temperatura ambiente, considerando condições de convecção natural. Utilizou-se como metal base uma liga de alumínio comercial (7075). Os resultados experimentais obtidos, comparados com os resultados teóricos, apresentaram boa concordância física comprovando a eficiência do modelo.

INTRODUÇÃO

A modelagem matemática é um recurso poderoso na simulação, definição de estratégias de controle e otimização de processos de manufatura, e em particular naqueles que envolvem a transformação líquido/sólido tais como: lingotamento estático e fundição, lingotamento contínuo, soldagem, purificação e crescimento de cristais.

Muitos modelos matemáticos utilizados na análise da transferência de calor têm sido documentados (Battle, 1992; Lally, 1990; Lewis, 1990), Contudo, poucos autores têm se preocupado com sua efetiva implementação em sistemas de computador, analisando paralelamente a eficiência do modelo na descrição global do sistema físico em conjunto com sua aplicação prática em uma máquina. Utilizando-se de uma analogia de circuitos elétricos de malhas passivas, formada exclusivamente por resistores de passagem do fluxo de energia e capacitores de acúmulo energético, desenvolveu-se uma manipulação matemática que trabalhando com as malhas nodais do Método de Diferenças Finitas, permitiu um acompanhamento global de todo o corpo físico, inserindo nas malhas geradas maleabilidade e flexibilidade, observando que nas malhas numéricas devido à analogia, vale toda a teoria aplicada em circuitos elétricos, simplificando assim o problema em questão.

ANÁLISES MATEMÁTICAS E O MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS (M.D.F.)

O fenômeno de transferência de calor envolvido no problema da solidificação é representado pela Equação de Diferenças Parciais, conhecida como a Equação Geral da Condução de Calor em Regime Transitório, dada em sua forma bidimensional por (Welty, 1976; Ozisik, 1977; Incropera, 1981):

$$\rho \cdot \left(c - H \cdot \frac{\partial f_s}{\partial T} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = k \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

onde ρ , c , k e H correspondem respectivamente à densidade [kg/m^3], calor específico [J/kg.K], condutividade térmica [W/m.K] e calor latente de fusão [J/kg] da liga submetida à solidificação. O termo f_s equivale à fração solidificada no material, T a temperatura [K], t o tempo relativo à solidificação [s] e x e y as coordenadas de espaço [m].

A representação numérica do modelo, tem como ponto de partida a análise de uma liga binária, a qual contém duas fases características (sólido e líquido) separadas por uma fase mista ou intermediária definida entre a 'Temperatura Solidus (T_S)' até a 'Temperatura Liquidus (T_L)' da liga. Em geral esta fase é denominada de 'fase pastosa'.

A fração sólida formada pode ser função de uma série de parâmetros envolvidos no sistema de fundição. No entanto em inúmeros casos é razoável assumir a variação da fração sólida como função apenas da temperatura, isto é:

$$f_s = F(T) \quad \text{para } T_S < T < T_L \quad (2)$$

A formulação correta de $F(T)$ consiste na dependência dos constituintes internos da liga e da forma com que interagem na solidificação do sistema. As formulações mais importantes são dadas por: 1- Regra da Alavanca; 2- Modelo de Scheil; 3- Modelo de Brody e Flemings; 4- Modelo de Clyne e Kurz; 5- Modelo de Onaka (Spim, 1996).

Na faixa de transformação das ligas metálicas ($T_S \leq T \leq T_L$) tem-se que os parâmetros físicos envolvidos no material serão dados por uma relação percentual entre a quantidade de líquido e a quantidade de material solidificado dentro desta faixa de temperatura (Voller, 1991). Assim tem-se que nesta região os parâmetros físicos assumem:

$$\rho_P = (\rho_S - \rho_L) \cdot f_s + \rho_L \quad (3)$$

$$k_P = (k_S - k_L) \cdot f_s + k_L \quad (4)$$

$$c_P = (c_S - c_L) \cdot f_s + c_L - H \cdot \frac{\partial f_s}{\partial T} \quad (5)$$

A Solução da Equação Geral da Condução de Calor pelo M.D.F.

Substituindo os termos de Diferenças Finitas na Eq. (1), esta transforma-se em:

$$\rho \cdot c_f \cdot \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = k \cdot \left(\frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2 \cdot T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \dots \right) \quad (6)$$

para: $c_f = \left(c + H \cdot \frac{\partial f_s}{\partial T} \right)$ (7)

O sobreíndice *n* representa a indicação do tempo instantâneo, e *n + 1* o tempo instantâneo acrescido de Δt .

A Analogia do M.D.F. com os Circuitos Elétricos

Na literatura não é difícil encontrar livros ou periódicos que apresentam as relações básicas dos elementos envolvidos em um sistema térmico com elementos passivos de um sistema elétrico (resistores e capacitores) (Spim, 1992), conforme as Eq. (8), (9), (10) e (11) e visto nas Figuras 1 e 2 (Welty, 1976 e Ozisik, 1977).

$$Ct_{i,j} = \rho_{i,j} \cdot c_{fi,j} \cdot Vol_{i,j} \quad (8)$$

onde: $Vol_{i,j} = \Delta x_i \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z$ (9)

Na Figura 1, tem-se que:

- $T_{i,j}^n$ = Temperatura de 'i,j' no tempo Instantâneo 't';
- q_E = Fluxo de Entrada; q_S = Fluxo de Saída;
- q_q = Fluxo de Carga de $Ct_{i,j}$ e
- q_D = Fluxo de Descarga de $Ct_{i,j}$;

$$Rt_{i,j} = \frac{Dist}{2 \cdot k_{i,j} \cdot At_x} \quad (10)$$

$$Rt_{o,j} = \frac{1}{h_o \cdot At_x} \quad (11)$$



Figura 1 - Representação Física do Capacitor Térmico

Na Figura 2, tem-se que:

- T_{Amb} = Temperatura Ambiente;
- $k_{i,j}$ = Condutividade Térmica do Ponto 'i,j';
- h_o = Coeficiente de Convecção térmica;

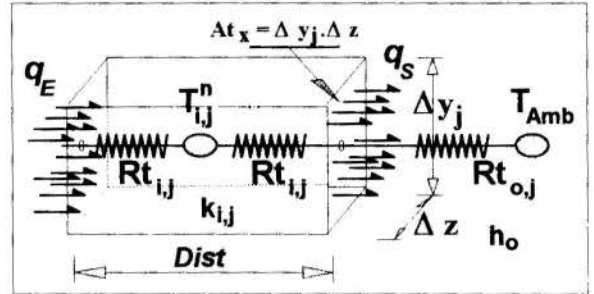


Figura 2 - Representação Física das Resistências Térmicas do Sistema

Trabalhando a Eq. (6), e relacionando cada termo com a equação da resistência térmica ($Rt_{i,j}$), vista anteriormente na Eq. (10), conforme a Eq. (12):

$$At_x \cdot k \cdot \frac{(T_{i+1,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1})}{\Delta x} = \frac{(T_{i+1,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1})}{Rt_{i,j \leftarrow i+1,j}} \quad (12)$$

onde o termo: $Rt_{i,j \leftarrow i+1,j}$ representa a resistência térmica na linha de passagem do fluxo, no sentido do ponto "i+1,j" para o ponto "i,j". Pela Figura 3 pode-se observar que este termo é dado pelo somatório das resistências térmicas envolvidas no interior do elemento "i,j" - (do centro para a interface - At_x) e do elemento "i+1,j" - (da interface - At_x para o centro), conforme a Eq. (13):

$$Rt_{i,j \leftarrow i+1,j} = Rt_{i,j} + Rt_{i+1,j} = \frac{\Delta x_{i,j}}{2 \cdot k_{i,j} \cdot At_x} + \frac{\Delta x_{i+1,j}}{2 \cdot k_{i+1,j} \cdot At_x} \quad (13)$$

Observar que se forem agrupados os termos ao lado direito da Eq. (13), esta chegará em:

$$Rt_{i,j \leftarrow i+1,j} = \frac{1}{2 \cdot At_x} \cdot \left(\frac{\Delta x_i}{k_{i,j}} + \frac{\Delta x_{i+1}}{k_{i+1,j}} \right) = \frac{1}{2 \cdot At_x} \cdot \frac{k_{i+1,j} \cdot \Delta x_i + k_{i,j} \cdot \Delta x_{i+1}}{k_{i+1,j} \cdot k_{i,j}} \quad (14)$$

onde na Eq. (14), tem-se que:

$$k_m = \frac{k_{i+1,j} \cdot \Delta x_i + k_{i,j} \cdot \Delta x_{i+1}}{k_{i+1,j} \cdot k_{i,j}} \quad (15)$$

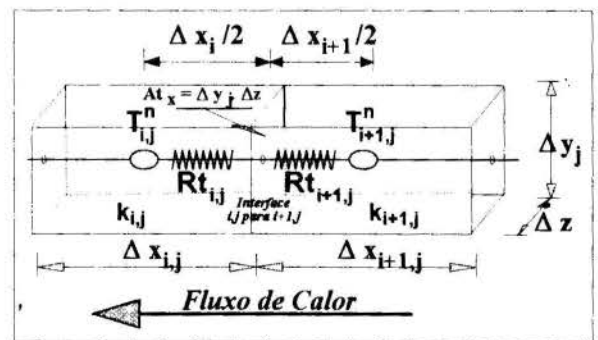


Figura 3 - Representação Física da Passagem do Fluxo de Calor pela Resistências Térmicas do Sistema

o termo k_m corresponde à condutividade da média ponderada entre a condutividade do ponto $i+1,j$ ($k_{i+1,j}$) e do ponto i,j ($k_{i,j}$) (Kingery, 1976). A Eq. (15) é conhecida e aplicada para a maioria dos materiais com mais de uma fase.

Desta forma a Eq. (6), por substituição dos termos de resistência térmica, transforma-se em:

$$\tau_{i,j}^n = -\frac{\Delta t}{\tau_{i+1,j}} \cdot \tau_{i+1,j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\tau_{i-1,j}} \cdot \tau_{i-1,j}^{n+1} - \dots - \frac{\Delta t}{\tau_{i,j+1}} \cdot \tau_{i,j+1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\tau_{i,j-1}} \cdot \tau_{i,j-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{i,j}}\right) \cdot \tau_{i,j}^{n+1} \quad (16)$$

O parâmetro τ introduzido na Eq. (16) equivale ao parâmetro de relaxamento de um circuito elétrico passivo, dado pelo produto do capacitor térmico (Ct) pela resistência de linha (Rt). A Eq. (16) representa a forma "Implícita" do M.D.F.

A solução para a Eq. (16) é dada pela montagem de um sistema linear do tipo:

$$\Delta t \cdot [M_\tau] \cdot \{T_{i,j}\}^{n+1} = \{T_{i,j}\}^n \quad (17)$$

Aplicação Prática do Modelo Proposto com a Analogia do M.D.F. e os Circuitos Elétricos

Em consideração a uma análise vetorial sobre a linha do fluxo de energia, introduziu-se um sistema de coordenadas para definir pontos no espaço tridimensional através de 3(três) vetores linearmente independentes e ortogonais, onde a primeira análise parte da notação dos sistemas clássicos de coordenadas: cilíndrico e esférico, conforme a Figura 4 (Spim, 1994).

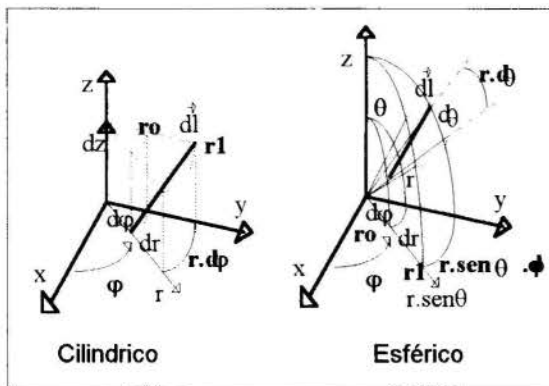


Figura 4 - Sistema de Coordenadas Cilíndrico e Esférico

Para a Figura 4, tem-se que o volume finito do elemento de diferença para cada sistema de coordenadas, é dado por:

$$Vol = \frac{r_1^2 - r_0^2}{2} \cdot d\phi \cdot dz \quad \Rightarrow \text{(Cilíndrico)} \quad (18)$$

$$Vol = \left(\frac{r_1^3 - r_0^3}{3} \right) \cdot (1 - \sqrt{1 - d\theta^2}) \cdot d\phi \quad \Rightarrow \text{(Esférico)} \quad (19)$$

e \vec{dl} a representação vetorial da linha de passagem do fluxo de calor, dado na forma (Hayt,1975):

$$\vec{dl} = dr \cdot \vec{ar} + r \cdot d\phi \cdot \vec{a\phi} + dz \cdot \vec{az} \quad \Rightarrow \text{Cilíndrico} \quad (20)$$

$$\vec{dl} = dr \cdot \vec{ar} + r \cdot d\phi \cdot \vec{a\phi} + r \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta \cdot \vec{a\theta} \quad \Rightarrow \text{Esférico} \quad (21)$$

A equação que define o elemento de resistência da linha de deslocamento, por onde atravessa o fluxo de energia, é dada por uma relação integral, na seguinte forma (Hayt,1975):

$$R_{es} = \frac{1}{\sigma} \int_{\text{comp}} \frac{d\alpha}{\iint_{\text{área}} \frac{h_2 \cdot h_3}{h_1} d\beta \cdot d\gamma} \quad (22)$$

onde: R_{es} = Resistência total da linha de condução do fluxo de energia;

σ = Condutibilidade da região por onde atravessa o fluxo de energia;

$d\alpha$ = diferencial de comprimento

$d\beta$ e $d\gamma$ = diferenciais de área

e os termos para h_1, h_2 e h_3 são definidos na equação genérica do vetor diferencial de deslocamento, como:

$$\vec{dl} = h_1 \cdot d\alpha \cdot \vec{a\alpha} + h_2 \cdot d\beta \cdot \vec{a\beta} + h_3 \cdot d\gamma \cdot \vec{a\gamma} \quad (23)$$

Desta forma, relacionando-se a Eq. (20) e a Eq. (21) com a Eq. (23), obtêm-se os coeficientes métricos (h_1, h_2 e h_3) para cada sistema de coordenadas, e pela Eq. (22) pode-se calcular a resistência de passagem do fluxo de energia na linha de condução. Observa-se que a generalidade das Eqs. (22) e (23), permite que estas sejam aplicadas em qualquer sistema de coordenadas. Sendo assim, o método apresentado é facilmente expansível para sistemas de geometria complexa.

APLICAÇÃO DO MODELO PROPOSTO EM UM SISTEMA DE FUNDIÇÃO

Pelo equacionamento apresentado anteriormente pode-se trabalhar com os elementos da malha de diferenças finitas para estruturas de geometrias radiais, conforme segue. Suponha um sistema de solidificação Metal/Molde, onde sobre este acopla-se uma malha em diferenças finitas, formada por elementos elétricos conforme observado nas Figuras 05 e 06. Nestas Figuras tem-se a representação esquemática da malha elétrica passiva, onde observa-se nos detalhes da malha a praticidade do mapeamento global do sistema. O modelo funcional concentra-se no cálculo setorial dos resistores e capacitores e da montagem das equações globais do sistema numérico.

Para a Figura 5, tem-se que:

- T_{amb} = Temperatura Ambiente [K];

- T_{ref} = Temperatura de Refrigeração (Molde) [K];

- R_{tamb} = Resistência Térmica referente a Temperatura Ambiente [K/W];

- R_{tref} = Resistência Térmica referente a Temperatura de Refrigeração (Molde) [K/W];

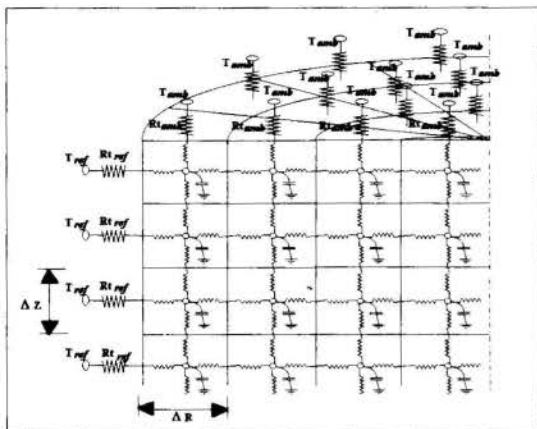


Figura 5 - Malha Passiva (Capacitores + Resistores) da Região Cilíndrica da Peça

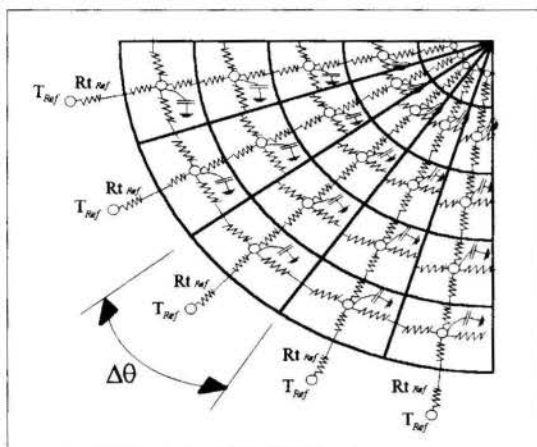


Figura 6 - Malha Passiva (Capacitores + Resistores) da Região Esférica da Peça

INSTRUMENTAÇÃO EXPERIMENTAL

Para a aferição do modelo em laboratório de pesquisa, utilizou-se um molde de Aço 1020, com geometria cilíndrica e base esférica, conforme apresentado na Figura 7.

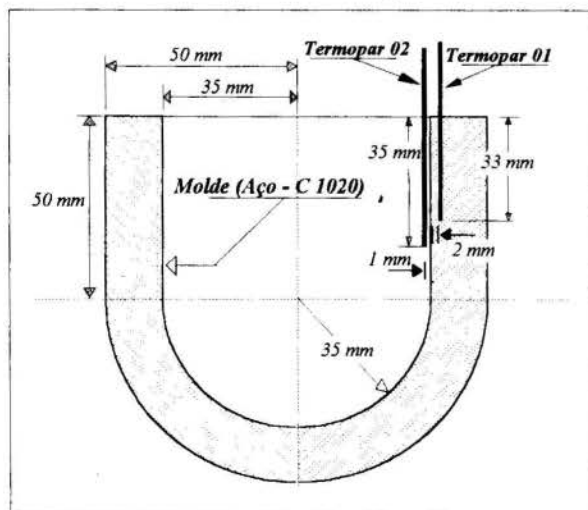


Figura 7 - Sistema de Aferição Experimental do Modelo e Disposição dos Termopares de Medida.

O metal base foi fundido no interior do molde e superaquecido (aproximadamente 150 °C acima da *Temperatura Liquidus*) através de resistências elétricas montadas sobre uma casca cerâmica de mesma geometria do molde, retirada após o metal líquido ter atingido a temperatura desejada. Posteriormente, um termopar localizado na parede do molde, disposto próximo a superfície interna, e um termopar localizado no interior do metal próximo a parede do molde, conforme visto na Figura 7, registraram temperaturas de resfriamento do sistema. Os resultados obtidos foram comparados com os resultados gerados no modelo numérico. O acompanhamento dos resultados de ensaio foram obtidos por meio de termopares "Tipo K" (Chromel-Alumel), A captura dos dados de ensaio foi realizada por meio de um registrador de dados microprocessado.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

A retirada de calor do molde para o meio ambiente e no topo do sistema, na interface do metal líquido com o meio ambiente, é dado pelo coeficiente convectivo do gás ambiente, sendo este estimado através de cálculos analíticos referentes as variáveis do sistema Ambiente/Molde e Ambiente/Metal, conforme dado abaixo (Welty,1976). O cálculo do Coeficiente Convectivo na Interface Ambiente/Molde e Ambiente/Metal (no topo do sistema), deve levar em conta os mecanismos de radiação e convecção combinados, onde:

$$h_{Amb} = h_{rad} + h_{conv} \quad (24)$$

sendo:

h_{Amb} = Coeficiente Convectivo na Interface do Metal ou Molde com o Ambiente [$W/m^2.K$];

h_{rad} = Coeficiente de Convecção Radiativa [$W/m^2.K$]; e

h_{conv} = Coeficiente de Convecção do Gás-Ambiente [$W/m^2.K$];

Para o cálculo do coeficiente radiativo tem-se que (Welty,1976; Ozisik,1977; Incropera, 1981):

$$h_{rad} = \sigma \cdot \epsilon \cdot (T_{Parede} + T_{Amb}) \cdot (T_{Parede}^2 + T_{Amb}^2) \quad (25)$$

onde:

σ = Constante de 'Stefan-Boltzman' [$= 5,667 \times 10^{-8} W/m^2.K^4$];

ϵ = Coeficiente de emissividade radiativa do material de Parede - Para o aço $\epsilon \cong 0,8$ e para o Al $\epsilon \cong 0,2$

T_{Parede} = Temperatura da superfície do material de Interface com o Ambiente;

T_{Amb} = Temperatura do Ambiente;

Para o cálculo do coeficiente de convecção, sabe-se que:

$$h_{conv} = \frac{k_{gás} \cdot Nu}{\chi} \quad (26)$$

onde o número de Nusselt (Nu), é dado na forma:

$$Nu = C \cdot (Gr \cdot Pr)^n \quad (27)$$

'Gr' é o número de Grashof:

$$Gr = \frac{g \cdot \beta \cdot \chi^3 \cdot (T_{Parede} - T_{Amb})}{\eta_{gas}^2} \cdot \rho_{gas}^2 \quad (28)$$

e 'Pr' o número de Prandtl:

$$Pr = \frac{\eta_{gas}}{k_{gas}} \cdot c_{gas} \quad (29)$$

onde as constantes 'C' e 'n' são dadas na literatura (Ozisik, 1977). Os elementos ρ_{gas} , η_{gas} , k_{gas} e c_{gas} correspondem a Densidade [kg/m³], Viscosidade [kg/m.s], Condutividade Térmica [W/m².K] e Calor Específico [J/kg.K] do gás ambiente, responsável pela retirada de calor no sistema Molde/Ambiente. Os valores destas constantes para o ar são dados na literatura (Perry, 1963).

Na Eq. (28) g corresponde a aceleração da gravidade ($\cong 9,81 \text{ m/s}^2$), β equivale ao coeficiente de expansão volumétrica de um fluido, sendo que para gases, este é dado por boa aproximação como: $\beta = 1/T_{\infty}$ onde T_{∞} é a temperatura do gás, e χ é a dimensão característica da superfície (Ozisik, 1977).

A Figura 8 mostra a evolução da temperatura dos pontos experimentais em comparação com os simulados pelo modelo proposto. Onde observa-se uma boa concordância em relação aos resultados fornecidos na simulação, tanto no termopar de monitorização no interior do metal (termopar n° 2) quanto no termopar inserido na parede do molde (termopar n° 1). As discrepâncias observadas na simulação em relação aos resultados experimentais, podem ser justificadas pelo fato de se utilizar no modelo numérico, valores constantes do coeficiente de retirada de calor na interface Molde/Ambiente e Metal/Molde, além da dificuldade de se encontrar na literatura valores precisos para as propriedades termofísicas de ligas em função da temperatura. Na prática sabe-se que estes elementos variam ao longo do tempo e em função da temperatura, entretanto a maneira como estes elementos variam dependem de parâmetros complexos ao sistema de fundição, como a taxa de contração do metal no interior do molde e a formação do 'gap' na interface Metal/Molde. Contudo o modelo proposto representou bem o sistema em estudo permitindo maleabilidade as malhas do M.D.F. facilitando a programação do modelo.

Simulou-se também a evolução da *Isoterma 'Solidus'* da parede do molde até o centro da peça, conforme pode ser visto na Figura 9. Nesta observa-se que a isoterma solidus tende a caminhar mais rapidamente na região esférica do que na região cilíndrica. Este fenômeno é observado na literatura (Santos, 1993). A Figura 10, traz a evolução do perfil de temperatura nas secções cilíndrica e esférica, conforme as secções de referência da Figura 11, sendo que nesta figura fica mais nítida a tendência de resfriamento mais rápido na região esférica do molde.

Com as simulações apresentadas observa-se que o modelo mostrou-se consistente e prático mesmo em situações de solidificação de ligas onde o resfriamento sofre inflexões em função das características da região pastosa, e depende da forma correta de evolução do calor latente em função da fração sólida dentro desta região.

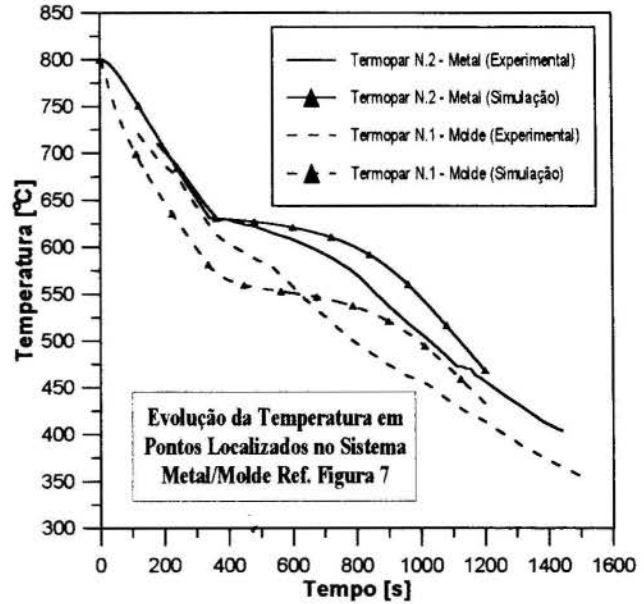


Figura 8 - Comparação entre o Sistema Experimental para Resultados da Solidificação no Molde Cilíndrico de Base Semi-Esférica com os Resultados Gerados no Modelo Proposto.

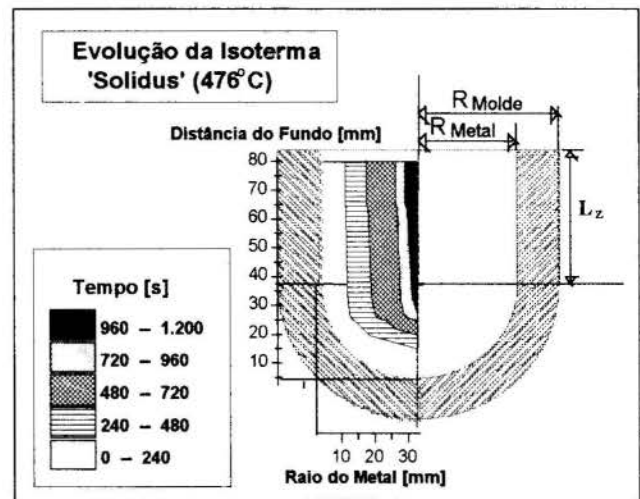


Figura 9 - Evolução da *Isoterma 'Solidus'* no Interior do Molde (Resultados de Simulação)

CONCLUSÃO

O modelo proposto neste trabalho foi aferido sob condições físicas tridimensionais através de um sistema de fundição constituído por um molde cilíndrico com base semi-esférica, e utilizando-se a liga de alumínio 7075 como metal de referência. A concordância observada entre os resultados experimentais e as simulações teóricas obtidas demonstraram que o modelo proposto pode se constituir em uma ferramenta eficiente e maleável na análise de problemas na produção de peças de geometria complexas na indústria de fundição.

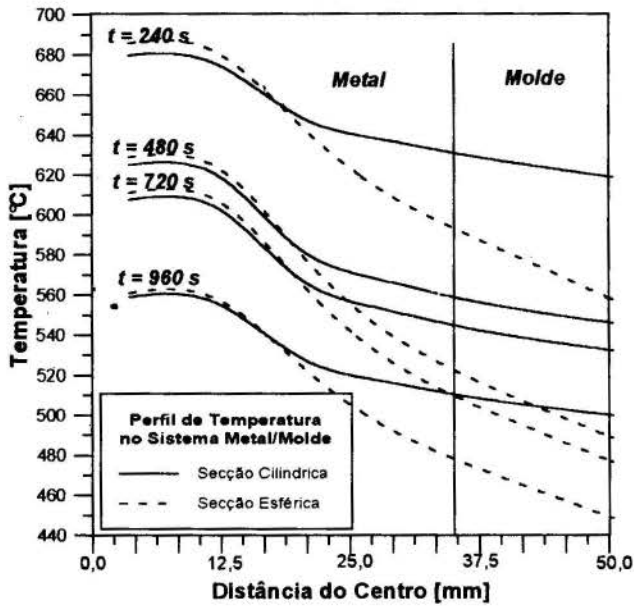


Figura 10 - Evolução dos Perfis de Temperatura no Interior da Seção Cilíndrica e Esférica - Referência a Figura 11.

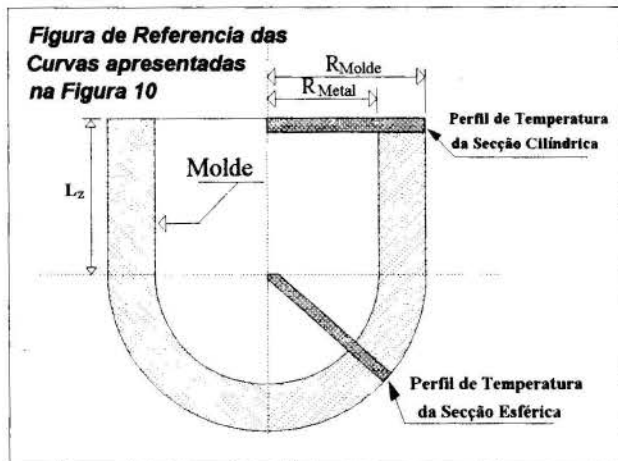


Figura 11 - Referência a Seção Cilíndrica e Esférica para as Curvas da Figura 10.

ABSTRACT

The present work proposes a modification on the distribution of elements from the mesh, which permits a versatile analysis of solidification of cylindrical and spherical sections. In order to assess the model performance an experimental set-up consisting of a cylindrical steel mold over a spherical basis was used. An aluminum alloy - 7075 were solidified in such system, with the mold exposed to normal environment temperatures. The results of theoretical simulations are in good agreement with the physical reality of the metal/mold system.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, e à FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo apoio gerado ao longo deste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BATTLE, T. P., 1992; "Mathematical Modelling of Solute Segregation in Solidifying Materials", *International Materials Reviews*, V.37, n°6, pp. 249-270,;
- HAYT Jr., W. H. & Kemmerly, J. E., 1975, "Análise de Circuitos em Engenharia", *McGraw-Hill do Brasil*;
- INCROPERA, F. P. & Witt, D. P., 1981, "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", 3° Ed., *John Wiley & Sons, New York*;
- KINGERY, W. D. ; Bowen, H. K. & Uhlmann, D. R., 1976, "Introduction to Ceramics", 2° Ed., *John Wiley & Sons, New York*;
- LALLY, B. ; Biegler, L. & Henein, H., 1990; "Finite Difference Heat-Transfer Modelling for Continuous Casting", *Metallurgical Transaction B*, V.21B, pp. 761-770;
- LEWIS, R.W. et ali, 1990; "Solidification in Castings by Finite Element Method", *The Institute of Metals*, pp. 482-489;
- OZISIK, M. N.,1977; "Basic Heat Transfer", *McGraw-Hill, New York* ;
- PERRY, J. H., 1963; "Chemical Engineers Handbook", 42^o Ed., *McGraw-Hill Book Company*,;
- SANTOS, R. G. & Garcia, A., 1993, "Comportamento Térmico e Microestrutural na Solidificação Radial", *Anais do 48^o Congresso Anual da Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais - ABM*, V. II, pp. 591-602;
- SPIM Jr., J. A.,1996, Aplicação da Modelagem Matemática na Definição Integral da Solidificação para Projeto ou Reprogramação de Sistemas de Fundição", *Tese de Doutorado, UNICAMP/FEM/DEMA*;
- SPIM Jr., J. A. & Garcia, A., 1994; "Análise Numérica de Seções Radiais na Fundição de Geometrias Complexas", *Anais, 11^o Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais - CBECIMAT*, V. 2, pp. 1439-1442,;
- SPIM Jr., J. A. & Garcia, A., 1992; "Modelagem Numérica da Solidificação Baseada na Analogia entre Sistemas Térmicos e Elétricos", *Anais, 10^o Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais - CBECIMAT*, V.2, pp. 594-597;
- VOLLER, V. R. & Swaminathan, C. R., 1991; "General Source-Based Method for Solidification Phase Change", *Numerical Heat Transfer, Part b*, V. 19, pp(175-189),;
- WELTY, J. R.,1976; Engineering Heat Transfer", *J. Wiley and Sons, Inc. New York*;



SIMULATION OF THE TRANSIENT THERMAL BEHAVIOUR OF A FINITE SLAB IN A STEFAN PROBLEM, BY THE NETWORK METHOD.

Francisco Alhama, Juan F. López-Sánchez,
Mariano Alarcón, Carlos F. González-Fernández¹

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 heat conduction and the moving solid-liquid interphase in a finite slab, with polynomial temperature dependent thermal conductivity, has been digitally simulated by the network method. In this approach, a network model for that process is proposed, and using advanced electrical circuit simulation programs, digital simulations of the behaviour of the system have been obtained.

INTRODUCTION

The solid-liquid phase change phenomenon appears not only in nature, but also in many industrial or technological processes. Because of the strong nonlinearity due to the presence of a moving solid-liquid interphase, an exact solution to the Stefan problem is nearly impossible, except for a few cases restricted to semi-infinite media (Carslaw and Jaeger, 1954). To more complex cases, various approximate analytical and numerical methods have been proposed (Fukusako and Ski, 1987; Dursunkaya and Nair, 1990). In this work we have an interest in the analysis of this problem by means of the network method, which is an useful alternative to the general numerical methods to obtain the thermal response of many 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 the response by an adequate 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 a variety of problems such as diffusion, convection and electromigration through membranes phenomena, 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 for academic purposes or to make very restricted analog systems. Nevertheless the network method, considering the formal equivalence,

pretends to simulate the behaviour of the systems but avoiding the limitations that the physical implementation of any circuit has, specially on manufacture tolerance requirements. 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 the electrical circuits have. From a more specific point of view, the network method admits different distribution of initial temperatures, boundary condition functions of the time or the temperature and variable thermal properties in a routine way.

NETWORK MODEL

The system considered in this work is a one-dimensional finite slab of thickness L , with an initial uniform temperature T_0 , which is below its melting temperature, T_f . It is assumed that a constant temperature, $T_d > T_f$, is maintained at the left surface ($x=0$); the right surface is maintained at the initial temperature. If l_f is the solid-liquid interphase location, the mathematical models corresponding to the solid and liquid phases are given by the following equations:

Solid phase:

$$\rho_s c_s (\partial T / \partial t) = \partial (k_s \partial T / \partial x) / \partial x; \quad t > 0, \quad l_f \leq x < L \quad (1)$$

Liquid phase:

$$\rho_l c_l (\partial T / \partial t) = k_l (\partial^2 T / \partial x^2); \quad t > 0, \quad 0 < x \leq l_f \quad (2)$$

The initial and boundary conditions are:

$$T(x, t=0) = T_0 \quad (3)$$

$$T(x=0, t \geq 0) = T_d \quad (4)$$

$$T(x=L, t \geq 0) = T_0 \quad (5)$$

$$T(x=l_f, t \geq 0) = T_f \quad (6)$$

and the conditions at the solid-liquid interphase:

$$k_l (\partial T / \partial x) - k_s (\partial T / \partial x) = \rho_s \lambda (\partial l_f / \partial t) \quad (7)$$

¹ To whom correspondence should be addressed.

where x and t are the space and time respectively, ρ_s and ρ_l are the densities, c_s and c_l the specific heats of solid and liquid phases, λ the latent heat of fusion, and T_l and T_s the temperatures of liquid and solid phases.

The thermal conductivity of the solid, k_s , has been assumed variable with the temperature in the form

$$k_s = k_0 + k_1T + k_2T^2 + k_3T^3 + \dots + k_nT^n \quad (8)$$

where k_j ($j=0, 1, 2, \dots, n$) are constants, while the thermal conductivity of the liquid, k_l , is also a constant.

The general procedure for obtaining the network model representative of a transport process consists of dividing the physical region of interest into volume elements. In this way, for the compartment i , of thickness Δx , according to the Fourier's law, Eq. (1) can be written as

$$\rho_s c_s (dT_i/dt) = -\Delta j/\Delta x = (j_{i-,\Delta} - j_{i+,\Delta})/\Delta x \quad (9)$$

$j_{i,\Delta}$ being the fluxes coming to and leaving the compartment i ,

$$j_{i,\Delta} = \pm k_{s(i,\Delta)} (T_i - T_{i,\Delta}) / (\Delta x/2) \quad (10)$$

Using Eq. (10), Eq. (9) is given by

$$\rho_s c_s (dT_i/dt) = (1/\Delta x) [k_{s(i,\Delta)} (T_{i-,\Delta} - T_i) / (\Delta x/2) - k_{s(i+,\Delta)} (T_i - T_{i+,\Delta}) / (\Delta x/2)] \quad (11)$$

$T_{i,\Delta}$ and T_i being the temperatures at the ends and at the central point of the compartment i , respectively (Fig.1). The

conductivities $k_{s(i,\Delta)} = k_s(T_{i,\Delta})$ are the values of k_s at those ends. Substituting Eq. (8) into Eq. (11) yields the following equation

$$\begin{aligned} \rho_s c_s \Delta x (dT_i/dt) = & (T_{i-,\Delta} - T_i) / (\Delta x/2k_0) + 2(T_{i-,\Delta} - T_i) [(k_1/\Delta x) T_{i-,\Delta} + \\ & + (k_2/\Delta x) (T_{i-,\Delta})^2 + \dots + (k_n/\Delta x) (T_{i-,\Delta})^n] - \\ & - (T_i - T_{i+,\Delta}) / (\Delta x/2k_0) - 2(T_i - T_{i+,\Delta}) [(k_1/\Delta x) T_{i+,\Delta} + \\ & + (k_2/\Delta x) (T_{i+,\Delta})^2 + \dots + (k_n/\Delta x) (T_{i+,\Delta})^n] \end{aligned} \quad (12)$$

This equation can be written as

$$j_{i-,\Delta} - j_{i+,\Delta} - j_{i,\Delta} + j_{i,\Delta} - j_{i,b} = 0 \quad (13)$$

where

$$j_{i,\Delta} = \pm (T_i - T_{i,\Delta}) / (\Delta x/2k_0) \quad (14)$$

$$j_{i,\Delta} = \rho_s c_s \Delta x (dT_i/dt) \quad (15)$$

$$j_{i,a} = 2(T_{i-,\Delta} - T_i) [(k_1/\Delta x) T_{i-,\Delta} + (k_2/\Delta x) (T_{i-,\Delta})^2 + \dots + (k_n/\Delta x) (T_{i-,\Delta})^n] \quad (16)$$

$$j_{i,b} = 2(T_i - T_{i+,\Delta}) [(k_1/\Delta x) T_{i+,\Delta} + (k_2/\Delta x) (T_{i+,\Delta})^2 + \dots + (k_n/\Delta x) (T_{i+,\Delta})^n] \quad (17)$$

Eq. (12) can be considered as a Kirchhoff's current law and the temperature T as a variable satisfying Kirchhoff's voltage law, because T is a continuous and single-valued variable. Then, it is possible to analyse the heat conduction process by an electric network been j and T its characteristic

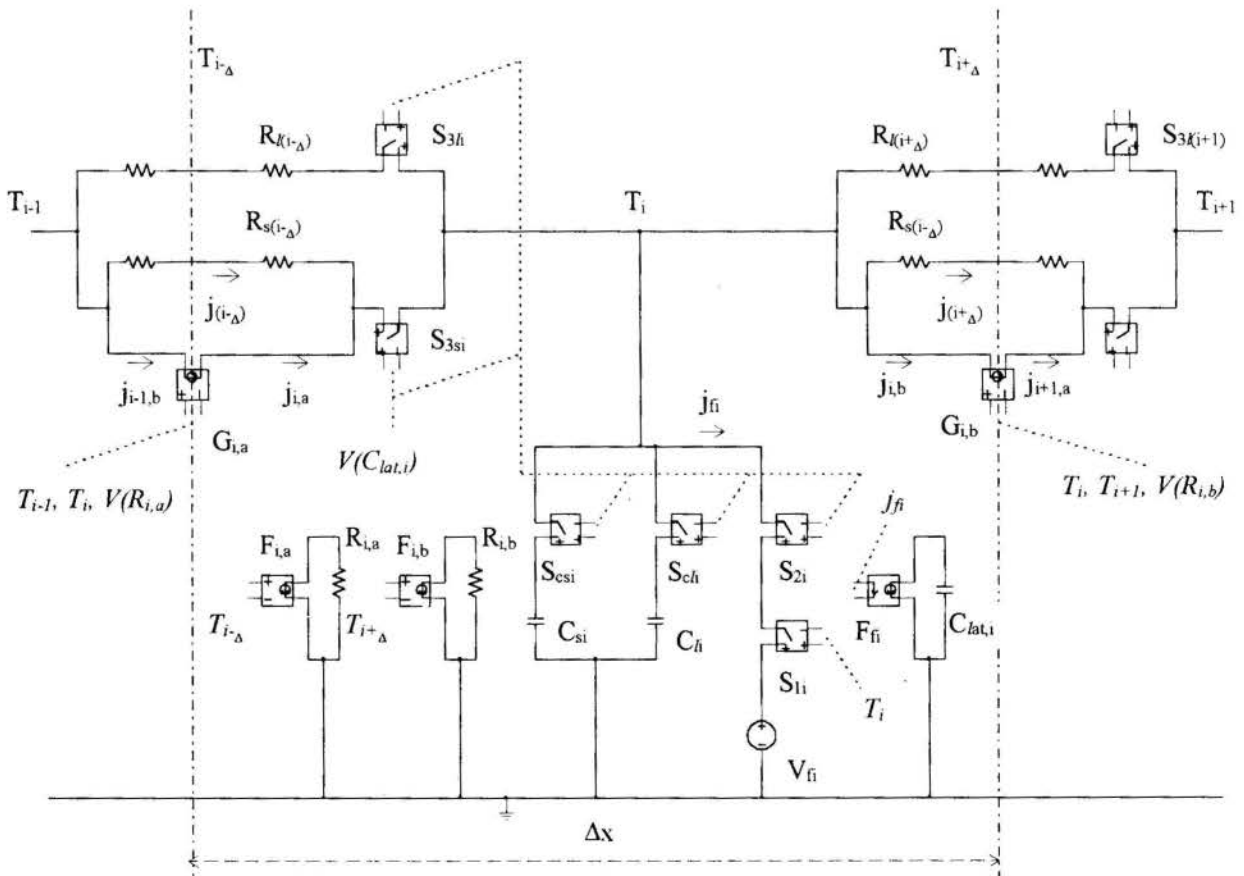


Figure 1. Network model for transient heat conduction in a volume element of a phase-change material.

variables. In this sense, Eqs. (14-17) define resistors with resistance $R_{s(i,\Delta)} = \Delta x/2k_0$, a capacitor with capacitance $C_{si} = \rho_s c_s \Delta x$, and two multivariable voltage-dependent current sources $G_{i,a}$ and $G_{i,b}$, of outputs $j_{i,a}$ and $j_{i,b}$ respectively, which are connected according to the Kirchhoff's current law, Eq. (13). Moreover, from the topology, $T_{i,\Delta} \equiv T_{i-1+\Delta}, T_{i+\Delta} \equiv T_{i+1-\Delta}$, and $|j_{i,\Delta}| \equiv |j_{i-1+\Delta}|, |j_{i+\Delta}| \equiv |j_{i+1-\Delta}|$; so $(T_{i,\Delta} - T_i) = (T_{i-1} - T_{i-1+\Delta}), (T_i - T_{i+\Delta}) = (T_{i+1-\Delta} - T_{i+1})$, and from Eqs. (16, 17), $|j_{i,a}| = |j_{i-1,b}|$, and $|j_{i,b}| = |j_{i+1,a}|$. The above results let the sources $G_{i,a}$ and $G_{i,b}$ be connected between points $i-1$ and i , and i and $i+1$, respectively, as it is shown in Fig. 1, reducing the number of sources of the network.

The voltage-dependent current source $G_{i,a}$ is controlled by two functions, $V_{i,a}^* = (T_{i,\Delta} - T_i)$ and $V_{i,a}^{**} = 2[(k_1/\Delta x)T_{i,\Delta} + (k_2/\Delta x)(T_{i,\Delta})^2 + \dots + (k_n/\Delta x)(T_{i,\Delta})^n]$. The first, $V_{i,a}^*$, is obtained directly from its associated nodes, while $V_{i,a}^{**}$ is evaluated by an 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 $G_{i,b}$ requires an auxiliary circuit with a voltage-dependent current source, $F_{i,b}$, of output $V_{i,b}^{**} = 2[(k_1/\Delta x)T_{i+\Delta} + (k_2/\Delta x)(T_{i+\Delta})^2 + \dots + (k_n/\Delta x)(T_{i+\Delta})^n]$, and the resistor $R_{i,b} = 1$; the other control voltage for $G_{i,b}$, $V_{i,b}^* = (T_{i+\Delta} - T_i)$, is obtained directly from the circuit.

The branches of the circuit corresponding to the liquid phase are similar to those of the solid phase without the current sources $G_{i,a}$ and $G_{i,b}$, and their auxiliary circuits, because k_l does not depend on temperature.

The switches of the network, are controlled by voltages and they activate the corresponding branches of the circuit associated to the solid or liquid phase, as the interphase moves. If the material of the cell i is solid, only S_{3si}, S_{csi} and S_{2i} are switched on. When T_i becomes equal to T_f , S_{3si} and S_{csi} switch off, and S_{1i} and S_{3li} switch on, connecting the constant voltage source, V_{fi} , of output T_f , and the resistor branch of the circuit associated to the liquid phase. In this way, the temperature of the volume element i is T_f during the melting process of all the material of the cell, according to Eq. (6); moreover, in this cell Eq. (7) is satisfied, j_{fi} been $\rho_s \lambda (\partial l / \partial t)$. Then, the fusion process is quantified by the auxiliary circuit F_{fi} and $C_{lat,i}$; F_{fi} is a current-dependent current source of output j_{fi} , which flows through the branch of the V_{fi} , and $C_{lat,i}$ is a capacitor with capacity equal to unity. When the charge of this capacitor is equal to the heat necessary for the fusion of the cell, S_{2i} switches off, disconnecting V_{fi} , and S_{ci} switches on, connecting the capacitor associated to the liquid phase. The network model describes now the transient heat conduction process in the liquid.

In Fig. 1, italics near the controlled sources and switches are used to identify the controlled variables associated with these components.

The network model for the entire physical region is obtained connecting in series N elemental circuits as that in Fig. 1, enclosed in the Δx area. Fig. 2 shows the global 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_{si} in the network model (the initial potential of the capacitors C_{li} is T_f , because this is the temperature of the cell when the C_{li} are connected). The constant temperatures T_d and T_o , at $x=0$ and $x=L$ respectively, Eqs. (4, 5), are modelled by constant voltage sources of outputs T_d and T_o (Fig. 2). Different boundary conditions such as constant flow, harmonic variations, time-dependent functions or any other, may be implemented easily by means of their analogical electrical components.

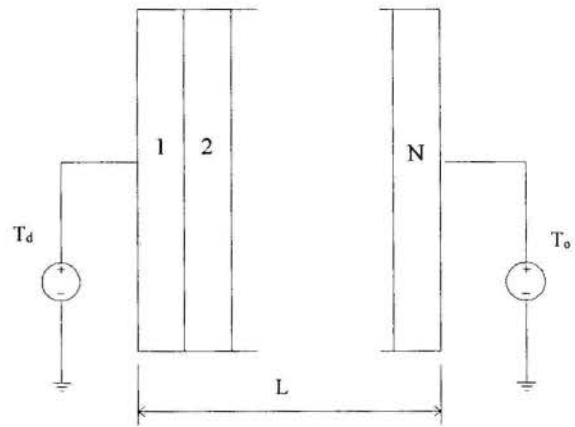


Figure 2. Network model for transient heat conduction in the entire physical region. Boundary and initial conditions are explicit in the model.

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 whole model considered. The digital simulation of the behaviour of a melting slab, under the conditions specified by the mathematical model, has been carried out using the following values of the parameters: $c_s \rho_s = 2 \cdot 10^5$ J/m³·K, $c_l \rho_l = 1.8 \cdot 10^5$ J/m³·K, $k_0 = 5 \cdot 10^{-2}$ W/m·K, $k_1 = 10^{-3}$ W/m·K², $k_2 = \dots = k_n = 0$, $k_l = 4.2 \cdot 10^{-2}$ W/m·K, $L = 1$ m, $N = 20$ cells, $T_d = 10$ K, $T_o = 0$ K, $T_f = 1$ K, latent heat of melting, $\lambda = 3 \cdot 10^3$ J/kg. According to these values $C_{si} = 10^4$ F, $C_{li} = 9 \cdot 10^3$ F, $R_{s(i,\Delta)} = R_{s(i+\Delta)} = 0.5 \Omega$, and $R_{l(i,\Delta)} = R_{l(i+\Delta)} = 0.6 \Omega$.

Simulations are carried out on a SUN Sparcstation 2, 4/50 GX.

Figure 3 shows the temporal dependence of the temperature at the cells number 6, 11 and 16, selected as typical.

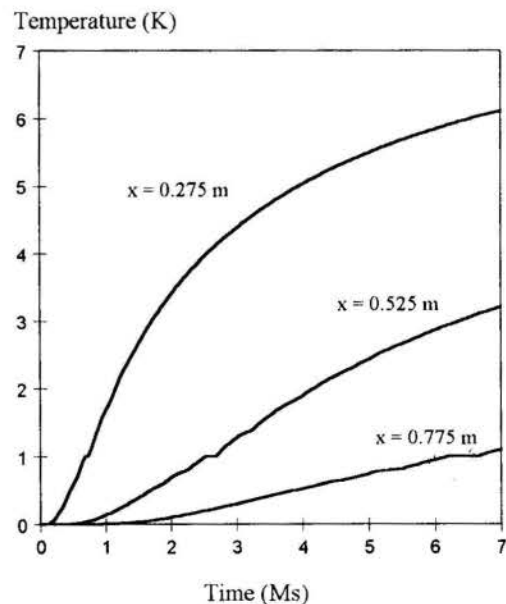


Figure 3. Temporal profiles of temperatures at $x = 0.275$ m ($i = 6$), $x = 0.525$ m ($i = 11$) and $x = 0.775$ m ($i = 16$).

Each curve shows a horizontal zone for the fusion temperature, $T_f = 1$ K, corresponding to the interval time of fusion of the cell which increases as l_f moves. Weak anomalies on monotonous growth of these curves around this zone, are due to the influences of melting of the adjacent cells.

Figure 4 shows the temporal variations of the current $j_{\bar{n}}$, flowing during the fusion of the cells, at $x = 0.275$ m, $x = 0.525$ m and $x = 0.775$ m. Although the current $j_{\bar{n}}$ is very different in these cells, the areas under the curves are equal because they represent the absorbed heat during the fusion in each cell.

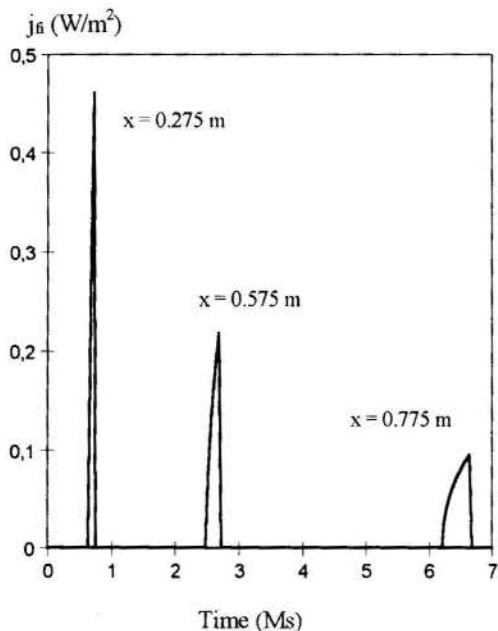


Figure 4- Temporal variations of the current $j_{\bar{n}}$, flowing during the fusion of the cells.

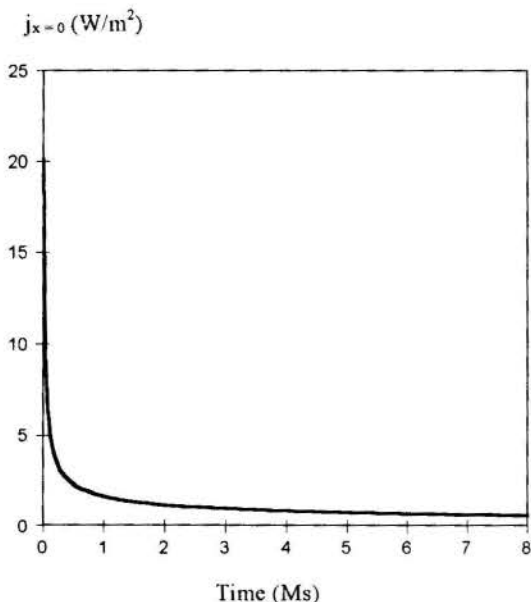


Figure 5. History of the heat flux at $x=0$.

The time variation of the heat flux at $x = 0$ is given in Fig. 5. The current becomes stationary at $t \cong 2 \cdot 10^6$ s. Finally,

Fig. 6, shows spatial distribution of the temperature at the times 0.2, 0.4, 0.6 and 0.8 Ms.

Computing time depends on the maximum time required at the process. For $t = 0.8$ Ms, CPU time is 550 s.

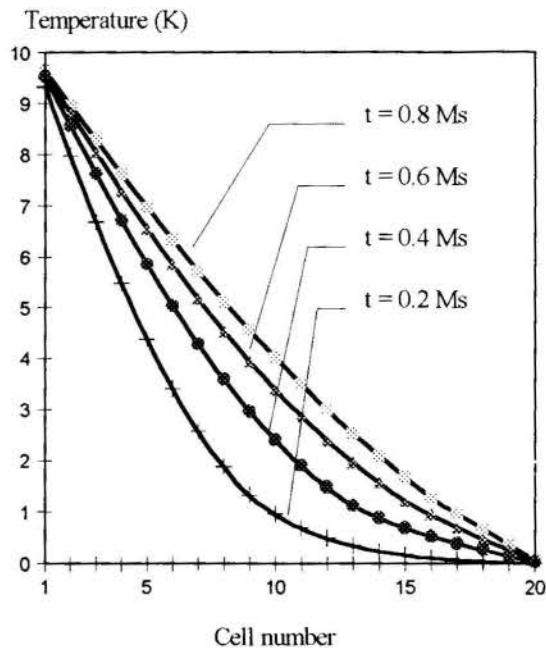


Figure 6. Spatial distribution of the temperature.

REFERENCES

- Carslaw, H. S., and Jaeger, J. C., 1954, "Conduction of Heat in Solids", Oxford University Press, Oxford, U.K.
- Dursunkaya, Z. and Nair, S., 1990, "A Moving Boundary Problem in a Finite Domain", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 57, pp. 50-56.
- Fukusako, S. and Seki, N., 1987, "Fundamental Aspects of Analytical and Numerical Methods on Freezing and Melting Heat-Transfer problems", *Annual Review of Numerical Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Vol. 1, T. C. Chawla, ed. Hemisphere Publishing Corporation, New York, pp. 351-402.
- 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.



MELTING-SOLIDIFICATION IN PHASE CHANGE MATERIAL PACKAGE WITH NONUNIFORM FILLER



Valeri V. Vlassov

Division of Space Mechanics and Control - DEM
National Institute for Space Research - INPE
12227-010 - São José dos Campos - SP - Brazil

SUMMARY

Theoretical and experimental study of phase change materials (PCM) package are presented. Three dimensional model of elementary cell case was developed. The enthalpy approach were used to deal with complex surface of interface in PCM. The finite volume method was used for numerical simulation. The approach, based on numerical method of splitting (fractional) steps was used. The absolutely stable implicit scheme, namely 3D version of prediction-correction technique, was applied. The method was extended to enthalpy equation and to composite media case. The experimental study includes several transient melting tests with electric skin heater on the base plate. Numerical solution was used to explain obtained experimental results.

INTRODUCTION

Ability of phase change materials (PCM) to store and release large latent heat, at approximately constant temperature during melting-solidification, opens perspectives for Spacecraft thermal control. The container with PCM can be used in thermal control systems of satellites for passive temperature stabilization of equipment in condition of periodically varied heat loads (Abhat and Groll, 1974). Following modes for PCM space application seems to be perspective.

- The preventing the electronic equipment from overheating during high power dissipation and overcooling during no operation in condition of low sink temperature.
- To prevent overheating or overcooling failures for one-duty cycle electronic equipment - for example for launchers or reentry vehicles.
- Thermal stabilization for cyclically operating equipment with combination of uncontrolled passive radiators.
- Thermal stabilization of space radiator system for a satellite orbiting the earth.
- A cooler for some sensors, accomplished with independent local radiator, thermal diode and PCM capacitor, stored "cold" during shadow orbit cycles of satellites.
- Thermal stabilization of high precision instruments for scientific experiments.
- Utilizing in fluid loop thermal control systems to damp the temperature variations in outlet of external radiator.
- Passive thermal control of structures remotod from the main Spacecraft (antennas, solar arrays etc.).
- Thermocontactors which utilize the volume change during melting of the PCM to activate thermal contact using a flexible bellow container.
- PCM combinations with heat pipes and capillary pumped loops to provide insensitivity to variation of input and output heat conditions.

Usually, the PCM has relatively low thermal conductivity. A high conductivity metal filler, imbedding to PCM bulk, offers the principal advantages: to increase the effective thermal

conductance and to provide the sufficient area for heat exchange between the heat input plate and the fusion material.

It is very important to define the optimal design parameters of the package. The big amount of filler will ensure small temperature raise of the base plate during melting. On the other hand, the total volume of phase change material will be decreased. It causes lost of overall thermal capacity during phase change and decline in specific mass characteristic of the package.

The choice of optimal design parameters have to be based on the careful analysis of processes in the bulk of PCM. The elementary cell of the package might consist of PCM itself, filler and base plate. Thus, the problem can be classified as multi-dimensional thermal conduction in composite media with phase change (melting-solidification) in one of the fraction. Boundary conditions are of the 2nd and 3rd types on the external boundaries of the package, and of the 4th type - on the internal boundaries.

Some of these subproblem were being studied separately, but no reference was found for the whole problem. Traditional approach here was experimental investigation of integral performance of manufactured PCM packages. But this approach does not give enough information about internal processes. More detailed investigation is needed.

The theoretical problem of melting-solidification process without fillers is known as Stefan's or Neumann's one, depending on initial and boundary conditions. To solve the multi-dimension Stefan-related problems two principal approaches are usually applied. One of them is interface tracking methods and another is enthalpy based ones. The selection of the approach depends of the relates to physical features of the problem and complexity of interface configuration. Shamsunder (1978) showed that temperature-based methods yield more accurate results, but enthalpy methods are easier to use, particularly in multidimensional case (Shamsunder and Sparrow, 1975, and Hunter and Kuttler, 1989). On the other hand, existence of buoyancy convection or Marangoni effect in liquid phase forces to use the tracking approach to solve Navier-Stocks equations for liquid phases as well.

Most successful techniques for two-dimension case are alternating direction (ADI) methods and related fractional steps

ones (Yanenko, 1971). There are some attempts to use sequence of local one-dimension approximations to solve two-dimension problems (method of lines and invariant imbedding, (Meyer, 1977)). The finite element method, based on space-time Galerkin variation technique (weight residual statement) provides the power universal approach (Elliott and Ockendon 1982, Zhong et al., 1991) on fixed grids and on moving grids as well.

Imbedded high conductivity matrix gives the conjunction nature of heat transfer with interaction of melting material. The closest relate theoretical problem is heat conduction in composites. Multi-body tasks for jointed rectangular slabs was solved on eigenvalues base (Salt, 1983), and using integral transform technique (Özsisik). The conform transformation may be perspective for several simple types of bodies and interfaces (Goldman and Kao, 1981). Another attempt is related to application of Green's functions (Beck, 1984). For 3D case the finite element and finite volume methods seem to be more perspective.

NUMERICAL SPLITTING SCHEME FOR HEAT CONDUCTION EQUATION

A linear differential operator can be defined as following

$$L_m(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \tag{1}$$

First of all, numerical implementation for heat conductance equation with constant conductivity will be considered:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = aL_m(\mathbf{x})T \tag{2}$$

Introducing a finite difference operator Λ_i , the approximation of temperature at the current point in the j -direction can be expressed:

$$\Lambda_i T = \frac{a}{h_j^2} (\hat{S}h_i T + \overset{\vee}{S}h_i T - 2T) \tag{3}$$

where h_j - spatial step in j -direction.

The spatial shift operator is defined by equations:

$$\hat{S}h_i T = T(x_1, \dots, x_i + h_i, \dots, x_n) \tag{4}$$

$$\overset{\vee}{S}h_i T = T(x_1, \dots, x_i - h_i, \dots, x_n)$$

where $T=T(x_1, \dots, x_n)$ - temperature in the current point. The superscript \wedge means the shift in the positive direction and \vee - in the negative one.

The backward-time and centered-space approximation can be expressed as following:

$$(T - \tilde{T}) = t \sum_{i=1}^m \Lambda_i T \tag{5}$$

where t - time step;

\vee - sign marking the previous time layer with respect to current one.

Only one-dimensional case causes tri-diagonal matrix, that can be solved successfully by the Thomas algorithm. If the $m > 1$, we have $(1+2m)$ diagonals, which requires a large amount of computational efforts. Special class of splitting numerical methods was developed by Yanenko in 1972. The splitting

methods valid for any of multi-dimensional case and are very suitable for 3D.

Brian (1962) and Yanenko (1972) proposed an absolutely stable scheme based on predictor-corrector technology. This method can be applied to the scheme mentioned above.

$$\begin{cases} T^{n+\frac{1}{6}} - T^n = \frac{1}{2} t \Lambda_1 T^{n+\frac{1}{6}} \\ T^{n+\frac{1}{3}} - T^{n+\frac{1}{6}} = \frac{1}{2} t \Lambda_2 T^{n+\frac{1}{3}} \\ T^{n+\frac{1}{2}} - T^{n+\frac{1}{3}} = \frac{1}{2} t \Lambda_3 T^{n+\frac{1}{2}} \\ T^{n+1} - T^n = t \Lambda T^{n+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{6}$$

Operator Λ here was defined as following:

$$\Lambda = \sum_{i=1}^3 \Lambda_i \tag{7}$$

First three equations in system (6) represent the predictor and the last one is the corrector. This scheme is unconditionally stable and has accuracy of $O(t^2+h^2)$. Only three tri-diagonal systems have to be solved for every entire time layer.

This scheme was selected as a base for developing of a numerical scheme for melting-solidification problem in composite medium.

DIFFERENTIAL OPERATOR FOR PIECE-SMOOTH CONDUCTIVITY COEFFICIENTS.

The next step is development the numerical scheme for composite mediums. The heat conduction equation will be as following:

$$C\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = L_m(k, \mathbf{x})T, \text{ where} \tag{8}$$

$$L_m(k, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} \right)$$

Where $k(\mathbf{x})$ - piece-smooth spatial function.

Finite volume method is used to generate the scheme. First, the scheme will be formed for 2D case. A composite body with two components of different properties (A,B) is presented in Figure 1. Numerical grid of (x,y, τ) coordinate system is shown there also.

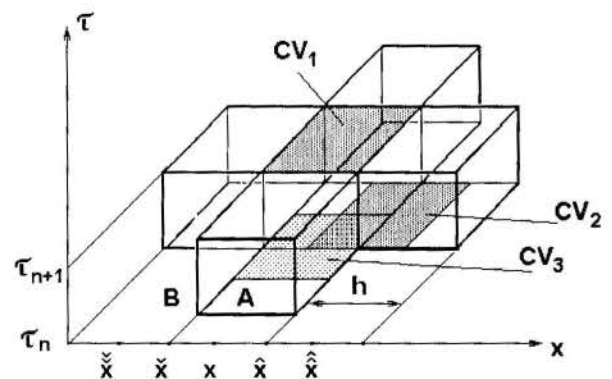


Fig. 1. The grid for 2D case.

Now we will change the initial equation for a system of two equations by introducing heat flux variables $q(x,y)$:

$$C\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = -\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y}, \quad (9)$$

$$q_x = -k_x \frac{\partial T}{\partial x}; \quad q_y = -k_y \frac{\partial T}{\partial y};$$

It is possible to select five control volumes (CV) for analysis. These volumes are tri-dimensional in (x,y,τ) . If numerical grid is adjusted with boundary of bodies, as presented in the Figure 1, the volume CV_1 does not include the boundary and it is convenient for integration of first equation of (7). The volumes CV_2 or CV_3 provide CV_1 with information from coupled neighbors. (The volumes CV_4 and CV_5 are located symmetrically with respect to CV_2 and CV_3 respectively and they are not shown in the Figure 1).

Integration the first equation of (9) around the CV_1 gives:

$$C\rho \int_{\bar{y}}^{\hat{y}} \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \int_{\tau_n}^{\tau_{n+1}} \frac{\partial T}{\partial \tau} d\tau dx dy = \quad (10)$$

$$= -\int_{\bar{y}}^{\hat{y}} \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \int_{\tau_n}^{\tau_{n+1}} \frac{\partial q_x}{\partial x} dx dy d\tau - \int_{\bar{y}}^{\hat{y}} \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \int_{\tau_n}^{\tau_{n+1}} \frac{\partial q_y}{\partial y} dx dy d\tau$$

$$C\rho \int_{\bar{y}}^{\hat{y}} \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} (T^{n+1} - T^n) dx dy = \quad (11)$$

$$= -\int_{\tau_n}^{\tau_{n+1}} (\hat{q}_x - \bar{q}_x) \Delta y d\tau - \int_{\tau_n}^{\tau_{n+1}} (\hat{q}_y - \bar{q}_y) \Delta x d\tau$$

This relationship is absolutely accurate. The numerical integration gives the discrete approximation.

$$C\rho (T^{n+1} - T^n) \Delta x \Delta y = -(\hat{q}_x^{n+1} - \bar{q}_x^{n+1}) \Delta y \Delta \tau - (\hat{q}_y^{n+1} - \bar{q}_y^{n+1}) \Delta x \Delta \tau \quad (12)$$

Integration around CV_2 of the second equation of (9) gives the following expression:

$$\int_{\tau_n}^{\tau_{n+1}} \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \frac{\hat{q}_x}{k_x} dx d\tau = - \int_{\tau_n}^{\tau_{n+1}} \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \frac{\partial T}{\partial x} dx d\tau \quad (13)$$

Discrete approximation gives the numerical performing:

$$-\hat{q}_x^{n+1} \Delta \tau \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \frac{dx}{k_x} = (\hat{T}_x^{n+1} - T_x^{n+1}) \Delta \tau \quad (14)$$

The similar relationship may be obtained for conjugate CV from the opposite side of CV_2 in x -direction (i.e. around \bar{x}) - CV_4 . Finally, along x :

$$\hat{q}_x^{n+1} = -\hat{g}_x (\hat{T}_x^{n+1} - T^{n+1}) \quad (15)$$

$$\bar{q}_x^{n+1} = -\bar{g}_x (T^{n+1} - \bar{T}_x^{n+1})$$

where g - generalized conductance in x - direction, defined as in (17).

For the CV_3 and CV_5 , along y - direction, the equations are similar. The final equation for numerical performing can be easily obtained by substitution the expressions for q_i (equations 15 for x - direction and similar ones - for y - direction)

The assumption is that k_x is a piece-constant function. Then the generalized conduction can be performed as following:

$$\hat{g}_x^{-1} = \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \frac{dx}{k_x} = \int_{\bar{x}}^{\hat{x}} \left(\sum_i \frac{\delta_i}{k_i} \right) dx \quad (16)$$

Here δ_i - undimension fractions of medium i along x - direction, from x up to \hat{x} (i.e. around boundary \hat{x}).

$$\hat{g}_x^{-1} = \Delta x \left(\sum_i \frac{\hat{\delta}_i}{k_i} \right) \quad (17)$$

General conductivity coefficient can be introduced:

$$\hat{\chi}_x = \left(\sum_i \frac{\hat{\delta}_i}{k_i} \right)^{-1} \quad (18)$$

The coefficients for other directions are similar.

Final numerical performing of the initial equation is following:

$$T^{n+1} - T^n = \Delta \tau \left\{ \frac{1}{\Delta x^2} \left[\frac{\hat{\chi}_x}{C\rho} (\hat{T}_x^{n+1} - T^{n+1}) - \frac{\bar{\chi}_x}{C\rho} (T^{n+1} - \bar{T}_x^{n+1}) \right] + \frac{1}{\Delta y^2} \left[\frac{\hat{\chi}_y}{C\rho} (\hat{T}_y^{n+1} - T^{n+1}) - \frac{\bar{\chi}_y}{C\rho} (T^{n+1} - \bar{T}_y^{n+1}) \right] \right\}$$

To expand the obtained numerical scheme of the energy equation in composite medium for 3D case, the anisotropic thermal diffusivities are introduced:

$$\hat{a}_i = \frac{\hat{\chi}_i}{C\rho}; \quad \bar{a}_i = \frac{\bar{\chi}_i}{C\rho}; \quad (19)$$

where $i=1,2,3$ for 3D.

The generalized difference operator $\bar{\Lambda}$ for direction i can be expressed by following:

$$\bar{\Lambda}_i T = h_i^{-2} \left[\hat{a}_i \hat{S} h_i T + \bar{a}_i \bar{S} h_i T - (\hat{a}_i + \bar{a}_i) T \right] \quad (20)$$

Note, for homogeneous case ($\hat{a}_i = \bar{a}_i = a$) the operator is exactly the same, as defined above. Therefore, this difference operator (20) is a generalized case of operator (3) for composite mediums. The predictor-corrector method can be used for composite materials by formal substituting the operators Λ_j with the generalized operator $\bar{\Lambda}_j$.

NUMERICAL SCHEME FOR ENTHALPY EQUATION.

Melting-solidification problems with complex irregular spatial interface can be expressed efficiently only via enthalpy equation. High conductivity filler can be described easily by the temperature-based equation, but for uniformity the enthalpy

formulation will be used. Therefore, energy equation for internal element of a PCM package with possible filler can be written as following:

$$\rho \frac{\partial H(T)}{\partial \tau} = L_3(k, \mathbf{x})T \quad (21)$$

For filler $H=CT$ and for fusion regions the enthalpy is expressed via fraction variable f (Zhong et al., 1991):

$$\rho \frac{\partial H(T)}{\partial \tau} = \rho_s \lambda \frac{\partial f}{\partial \tau} + f \rho_s C \frac{\partial T}{\partial \tau} + (1-f) \rho_l C \frac{\partial T}{\partial \tau} \quad (22)$$

After integration of the enthalpy equation around seven control volumes (by analogy of 5 CV for 2D) it is possible to obtain the numerical performing for enthalpy equation in composite medium for 3D case:

$$\begin{aligned} \rho(H^{n+1} - H^n) = & \rho_s \lambda (f^{n+1} - f^n) + [f^{n+1} \rho_s + (1-f^{n+1}) \rho_l] C (T^{n+1} - T^n) = \\ \Delta \tau \sum_{i=1}^3 h_i^{-2} [& \tilde{\chi}_i (\hat{T}_i^{n+1} - T^{n+1}) - \tilde{\chi}_i (T^{n+1} - \tilde{T}_i^{n+1})] \end{aligned} \quad (23)$$

The generalized difference operator $\tilde{\Lambda}$ for enthalpy case is following:

$$\tilde{\Lambda}_i T = h_i^{-2} \left[\tilde{\chi}_i \hat{S} h_i T + \tilde{\chi}_i \check{S} h_i T - (\tilde{\chi}_i + \check{\chi}_i) T \right] \quad (24)$$

Finally, the predictor-corrector method in splitting steps for these operators is following.

$$\begin{cases} H^{n+\frac{1}{6}} - H^n = \frac{1}{2} t \tilde{\Lambda}_1 T^{n+\frac{1}{6}} \\ H^{n+\frac{1}{3}} - H^{n+\frac{1}{6}} = \frac{1}{2} t \tilde{\Lambda}_2 T^{n+\frac{1}{3}} \\ H^{n+\frac{1}{2}} - H^{n+\frac{1}{3}} = \frac{1}{2} t \tilde{\Lambda}_3 T^{n+\frac{1}{2}} \\ H^{n+1} - H^n = t (\tilde{\Lambda}_1 + \tilde{\Lambda}_2 + \tilde{\Lambda}_3) T^{n+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (25)$$

The first part of the equation (23) can be used to reduce the enthalpy to fraction variable or temperature at any time step, fractional or integer.

BOUNDARY CONDITIONS

Some of the control volumes can be exposed under some external conditions. In this case the final expressions for the generalized difference operator for boundary CV will be as following:

$$\bar{\Lambda}_i T = h_i^{-2} \cdot \left\{ \hat{a}_i \hat{S} h_i T + \check{a}_i \check{S} h_i T - \left[\hat{a}_i (1 - \bar{F}_i) + \check{a}_i (1 - \bar{F}_i) \right] T \right\} \quad (26)$$

The generalized shift operator is redefined to include the boundary conditions:

$$\bar{S} h_i = \begin{cases} \check{S} h_i & \text{in bulk} \\ \Phi(\tau_{n+1}) & \text{on boundary} \end{cases}$$

where F - generalized factor for boundary CV and Φ - dynamic function of external influence. For internal CV $F=0$. For boundary conditions of 2nd type the functions F and Φ are defined as following:

$$\begin{aligned} \check{q}_i &= \psi_i(\tau); \\ F(T^{n+1}) &= 1; \\ \Phi(\tau_{n+1}) &= \tilde{\chi}_i^{-1} \psi_i(\tau_{n+1}) h_i. \end{aligned} \quad (27)$$

For boundary conditions of 3rd type (radiate heat exchange, linearized):

$$\begin{aligned} \check{q}_i &= \varepsilon \sigma T^4 - q_0(\tau); \\ F(T^{n+1}) &= [1 + \tilde{\chi}_i^{-1} \varepsilon \sigma h_i (T^n)^3]; \\ \Phi(\tau_{n+1}) &= \tilde{\chi}_i^{-1} h_i q_0(\tau_{n+1}). \end{aligned} \quad (28)$$

The equations (23-28) represent the most common case of 3D difference operator for all boundary, bulk, and interface finite volumes. These operators can be used directly in the predictor-corrector splitting numerical scheme, shown above.

THE CELL ELEMENT

The sketch of basic design of the PCM package is shown in Figure 2.

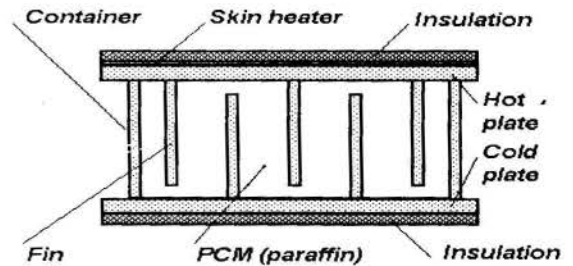


Fig. 2. Sketch of PCM package design.

It consists of metal container, filled with PCM and sealed hermetically. Usually the package has two base plates. The hot one is used for thermal connection with heat source and the cold one can be connected to heat sink or insulated, depending on the application. The filler consists of set of high-conductivity fins connected to both hot and cold plates of the package.

For farther study a 3D element was extracted from PCM package bulk. It consists of parts of base plates (both hot and cold) and two neighboring fins, cut in the middle. The configuration, sizes and node numeration are presented on the following pictures.

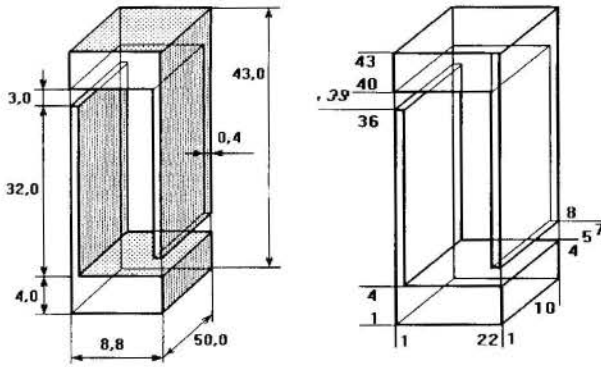


Fig. 3. Dimensions and nodes numeration for 3D cell element.

The discretization gives the 22(axis x) x 10 (axis y) x 43 (axis z) = 9460 nodes.

A case for numerical analysis was the elementary cell of pure PCM with the heating of one side, whereas the other side was insulated ideally. No fillers are presented inside the cell.

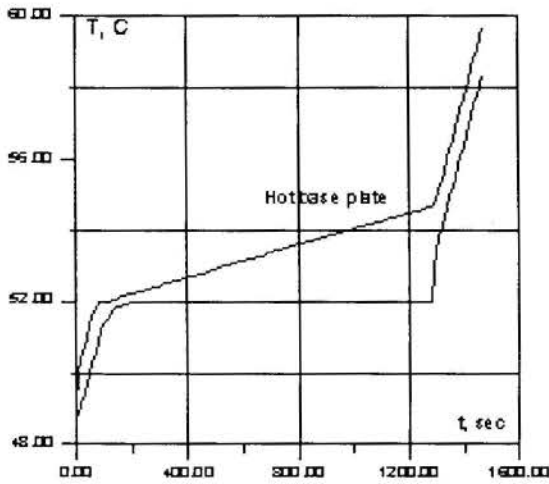


Fig. 4. A solution for the case of absence of fins.

The curves on the Figure 4 show that the temperature of the base plate increasing during the melting, whereas the temperature of back insulated plate is supported on the constant level of melting temperature. When phase change is completed, the both temperatures increase together. The inclination of the curves is different for single phase heating and for melting-solidification process. The temperature of the back base plate was constant during melting because there was not any heat bridge to transfer heat to this plate.

EXPERIMENTAL STUDY

The PCM package consists of a metal container (box with 210x160x45 mm size), fabricated from 6061 aluminum alloy, and filled with PCM and sealed hermetically. Phase change material is the paraffin of 130/135-1 type. To provide a good thermal contact between the base plates and PCM, aluminum fillers are immersed into the bulk of PCM. The base plate and the fins are machined from monobloc, thus they have good thermal contact. The number of fins is 15. This type of fins allows to

resolve the problem of inevitable void thermal resistance in PCM solid state. The mass of the PCM is 0.570 kg.

The view of the PCM package is shown on Figure 5.

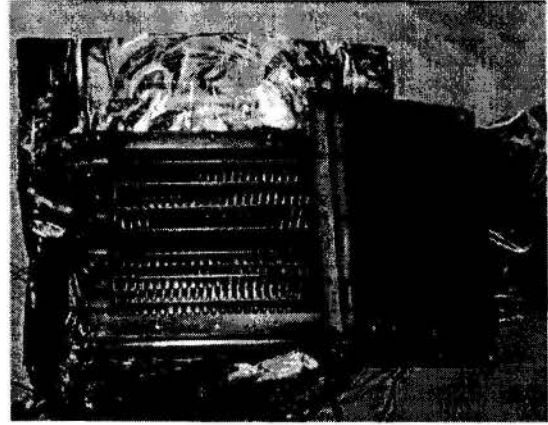


Fig. 5. The PCM package

The PCM package was tested to verify the ability of thermal stabilization, with respect to hot plate temperature evolution during one stage melting with different heat fluxes applied. The test results are presented below on the Figures 6-8. With comparison to numerical solution (Figure 4, case without fins), experiment shows that temperature of insulated base plate is increased together with hot plate, but with smaller rate. It occurs due to the presence of the fins and due to thermal conductance via lateral wall of the container. Also some non-linear effect with temperature of hot plate were detected. It seems to be related to influence of buoyancy convection for heat flux of high density. It is possible nucleate boiling also.

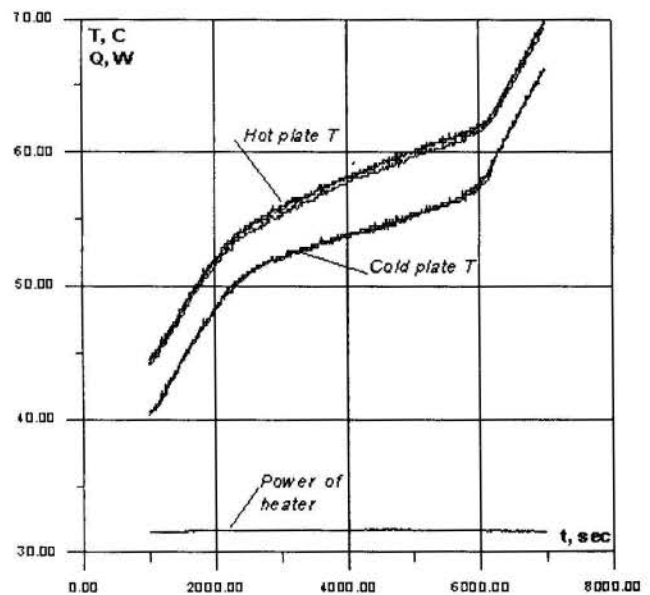


Fig. 6. Upper heating. Average power is 35,61 W. (Limits 31,48-31,72. Standard deviation 0.054).

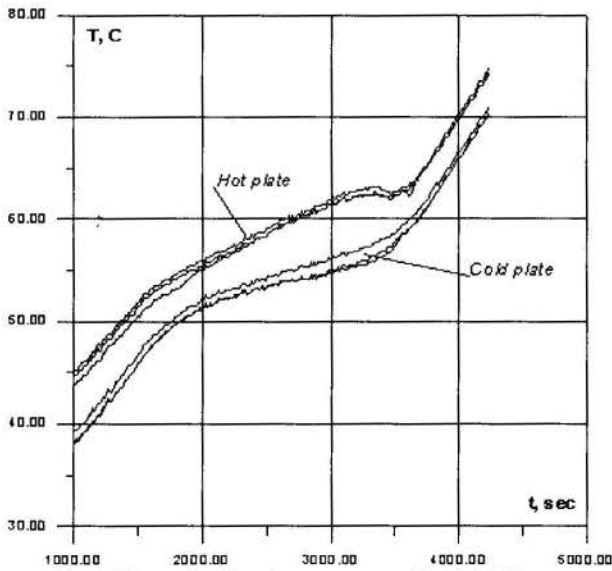


Fig. 7. Upper heating. Average power is 60,07 W

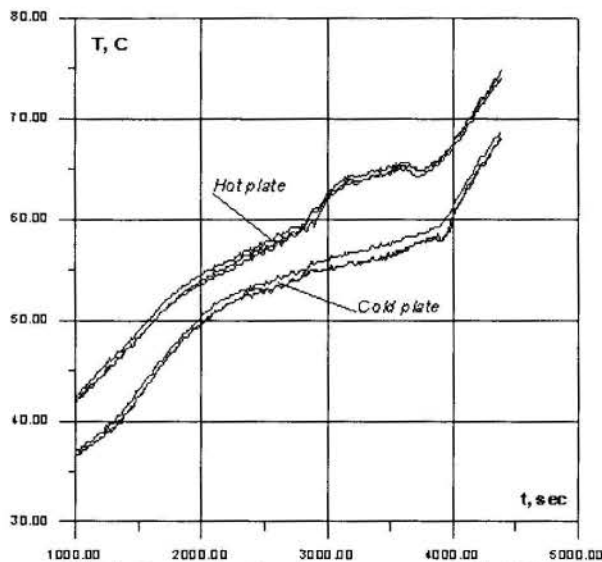


Fig. 8. Bottom heating. Average power is 60,03 W

Integrally the PCM package presented a thermal capacity of 33 Wt-hours with temperature stabilization of about 8°C . Input heat flux density - $0,3 \text{ W/cm}^2$. By the data extrapolation, the temperature evolution could reach an amount of 26°C in the case if no fusion occurs in paraffin.

CONCLUSION

Developed tri-dimensional mathematical model of elementary cell of the PCM package with imbedded filler is able to predict integral performance of the package. Enthalpy approach gives possibility to analyze melting-solidification processes in complex composite domains. Splitting method provides an effective economical numerical solution for 3D grids in spite of the large amount of nodes. Predictor-corrector technique can be extended to enthalpy equation in composite media. To take into account influence of lateral wall conductance of PCM container, boundary conditions have to be modified with net effect on system level.

REFERENCES

- Abhat, A., Groll, M., 1974, "Investigation of Phase Change Material (PCM) Devices for Thermal Control Purposes in Satellites". *AIAA Paper 74-728*.
- Alves, C.L.F., 1983, "Armazenamento Térmico com Mudança de Fase com Tubos Cilíndricos Aletados". *Tese de Doutorado em Ciências, Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), Divisão de Engenharia Macânica Aeronáutica, Brazil*.
- Beck, J.V., 1984, "Green's Function Solution for Transient Heat Conduction Problems". *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.27, pp 1235-1244.
- Crank, J., 1975, "The Mathematics of Diffusion". Clarendon Press, Oxford, 1975.
- Elliott, C.M., Ockendon, J.R., 1982, "Weak and Variational Methods for Moving Boundary Problems", Pitman, Boston.
- Goldman, A., Kao, Y.C., 1981, "Numerical Solution to Two-Dimensional Conduction Problem using Rectangular and Cylindrical Body-Fitted Coordinate Systems". *Journal of Heat Transfer*, Vol.103, pp 753-758.
- Griggs E.I., Humphries W.R., 1977, "A Design Handbook for Phase Change Thermal Control and Energy Storage Devices". NASA Technical Report 1074.
- Hale, D.V., Hoover, M.J., O'Neill, M.J., 1971, "Phase Change Materials Handbook", NASA Report CR-61363. Lockheed Missiles and Space company.
- Maliska, C.R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", UFSC, Brasil.
- Meyer, G.H., 1977, "An Alternating Direction Method for Multidimensional Parabolic Free Surface Problems", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.11, No 4, pp.741-752.
- Özisik, M.N., 1980, "Heat Conduction". J.Wiley&Sons.
- Salt, H., 1983, "Transient Conduction in Two-Dimensional Composite Slab - I. Theoretical Development of Temperature Modes". *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.26. No.11, pp 1611-1616.
- Shamsundar, N., 1978, "Diffusion Problems with Moving Boundaries" In: "Moving Boundary Problems", edited by D.G.Wilson, Alan D. Solomon, Paul T. Boggs, Academic Press.
- Shamsundar, N., Sparrow, E.M., 1975 "Analysis of Multidimensional Conduction Phase Change via the Enthalpy Model". *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 97, pp. 333-340.
- Viskanta, R., 1988, "Heat Transfer during Melting and Solidification of Melts". *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.110, pp. 1205-1219.
- Vlassov., V.V., 1995, "Transient Thermal Study of the Phase Change Material Package with Fins-Strip Matrix for Satellite Thermal Control Application", *Proceedings, COBEM-CIDIM/95*, UFMG, Brazil.
- Yanenko, N.N., 1971, "The Method of Fractional Steps". M.Holt translation from Russian. Spinger Verlag.
- Zhong, J., Chow, L.C., Chang, W.S., 1991, "Finite Element Eigenvalue Method for solving Phase Change Problems". *Journal of thermophysics and heat transfer*. Vol 5, No 4, pp.589-598.



ESTUDO DA RECUPERAÇÃO DO CALOR ARMAZENADO EM MATERIAIS DE MUDANÇA DE FASE NO INTERIOR DE DUTOS CILÍNDRICOS



C. S. Stampa e S. L. Braga

Departamento de Engenharia Mecânica
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
Rio de Janeiro - RJ -22453-900 - Brasil

RESUMO

O armazenamento de energia térmica sob a forma de calor latente é considerado, devido à sua alta capacidade de retenção de energia. Dutos cilíndricos contendo material de mudança de fase são posicionados longitudinalmente ao escoamento de água, que deve ser aquecida enquanto o calor é retirado do interior dos dutos. Uma análise teórica é desenvolvida onde o processo transiente de recuperação do calor é investigado. São analisadas as influências dos principais parâmetros que governam o fenômeno, a quantidade total de calor armazenada e a sua taxa de recuperação-em função do tempo, representada sob a forma de temperatura de saída da água que entra no armazenador a uma temperatura próxima à do ambiente

INTRODUÇÃO

Os armazenadores de energia térmica são necessários em muitas aplicações, para que se utilize uma energia em um instante de tempo diferente do de sua geração, ou para acumular pequenas potências por longos períodos, totalizando uma energia considerável. Isto se exemplifica claramente em um sistema solar de aquecimento. Pode-se utilizar, durante a noite, a água aquecida durante o dia, ou ainda, ao se passar água continuamente através de um coletor solar eleva-se pouco a pouco a sua temperatura acumulando-se água quente, a uma temperatura que só uma alta potência produziria em um curto intervalo de tempo.

Nos casos de armazenamento de calor, dois são os métodos utilizados: calor sensível (em líquidos ou sólidos) ou calor latente. Este último apresenta a vantagem de acumular mais energia por unidade de volume, empregando-se materiais de mudança de fase (MMF). O caso mais comum é a mudança sólido-líquido que apresenta menores variações em volume específico.

Uma importante característica deste processo, envolvendo mudança de fase, é que a temperatura da substância permanece relativamente constante durante todo o processo (substâncias multicomponentes mudam de fase em uma faixa de temperatura). Por isso, sistemas deste tipo têm importantes aplicações residenciais ou industriais para o armazenamento de energia.

Muitos são os materiais identificados como possuidores de boas propriedades de material de mudança de fase, numa extensa faixa de temperatura de 0 a 1400 °C (Rohsenow et al., 1985).

Este trabalho dá continuidade a um primeiro estudo (Braga, 1993), onde o MMF era encapsulado no interior de dutos de cobre dispostos transversalmente ao fluxo de água que passava entre estes, recuperando o calor retido dentro dos mesmos. São avaliados aqui novos parâmetros tais como: vazão e, para o encapsulante, diâmetro, espessura e material utilizado. Outro ponto enfocado é a influência do crescimento da camada solidificada no aumento da resistência térmica.

Os resultados apresentam a temperatura de saída da água, como função do tempo, após passar ao longo dos tubos contendo o MMF, inicialmente a uma temperatura superior ao seu ponto de fusão. Parafina N Leve 130/135-2 é considerada neste caso como o material armazenador de calor. Na formulação do problema foi incluído o efeito do crescimento da região sólida na resistência térmica.

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

A Figura 1 mostra esquematicamente o tipo básico de armazenador analisado. Trata-se de um armazenador cilíndrico, onde o material de mudança de fase é encapsulado em dutos também cilíndricos, paralelos ao escoamento. Água fria a 23 °C, entra pela base do sistema e recebe calor enquanto passa pelo acumulador. Estudou-se o problema através da simulação numérica, em regime transiente, cujas principais características são:

- Todo o sistema é inicialmente isotérmico.
- As paredes do armazenador são adiabáticas e impermeáveis.
- Em t=0, o fluido frio entra uniformemente no acumulador, escoando longitudinalmente aos dutos, de onde retira calor, e sai pela face superior, sempre com velocidade uniforme.

Unidimensionalmente, tem-se, para um volume de controle,

$$\frac{\partial(\rho d \forall c_p T)}{\partial t} = \dot{m} c_p T|_y - \dot{m} c_p T|_{y+dy} + \tag{1}$$

$$+ kdA \frac{\partial T}{\partial Y}|_y - kdA \frac{\partial T}{\partial Y}|_{y+dy} + q''' d \forall$$

onde o termo do lado esquerdo refere-se à variação da energia no interior do volume de controle e os da direita ao calor transferido por advecção, condução e geração interna, respectivamente. Este

último, como será visto mais adiante, representa o calor liberado pelo material encapsulado para o líquido em movimento.

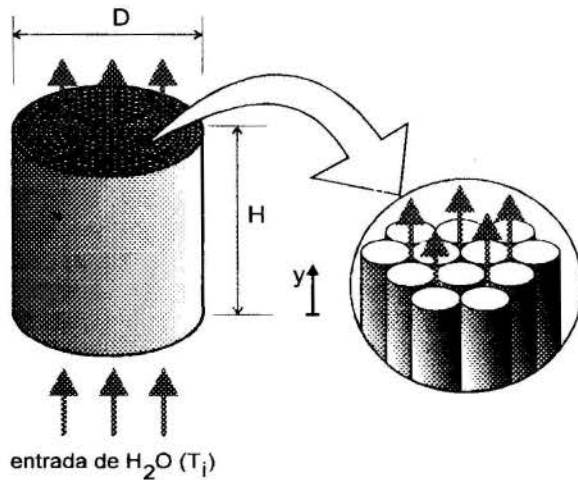


Figura 1 - Visão esquemática do acumulador de energia térmica.

Para o caso em estudo,

$$q''' = \frac{(T_{MMF} - T_{H_2O})}{R} \cdot \frac{1}{dV} \quad (2)$$

onde, T_{MMF} é a temperatura do MMF, T_{H_2O} a da água, R a resistência à troca de calor e dV o volume de água dentro do volume de controle. A Figura 2 apresenta um desenho esquemático de um tubo, onde são mostradas as regiões que compreendem a resistência térmica, cujo cálculo é dado por:

$$R = \frac{1}{h_i A_{in}} + \frac{\ln(r_i / r_m)}{2\pi k_{MMFS} DY} + \frac{\ln(r_e / r_i)}{2\pi k_{enc} DY} + \frac{1}{h_e A_e} \quad (3)$$

onde:

- r_i, r_e, r_{in} : Raios interno e externo do tubo e do MMF na fase líquida.
- h_{in}, h_e : Coeficientes de troca de calor por convecção interno e externo.
- A_{in}, A_e : Áreas superficiais do MMF líquido e externa do tubo.
- k_{enc}, k_{MMFL} : Condutividade do material encapsulante e do MMF na fase sólida.
- DY : Comprimento do volume de controle na direção y .

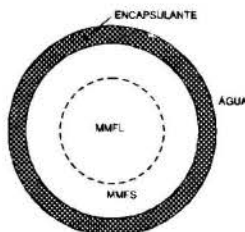


Figura 2 - Visão típica das regiões que compõem a resistência térmica para cada tubo.

Referência à energia acumulada: Como citado anteriormente, no início do processo todo o sistema se encontra a uma temperatura inicial maior do que a de fusão do MMF.

$$T_0 > T_f \quad (4)$$

Isto quer dizer que todo o MMF encontra-se líquido e a energia acumulada sob forma de calor latente é a máxima possível, o que garante altos valores estocados por unidade de volume. Pode-se dividir a energia total armazenada em 3 partes: na água, no material encapsulante e no MMF, respectivamente, como apresentado nas equações seguintes.

$$E_{H_2O} = m_{H_2O} cp_{H_2O} \cdot (T - T_i) \quad (5)$$

$$E_{enc} = m_{enc} cp_{enc} (T_0 - T_i) \quad (6)$$

$$E_{MMF} = m_{MMF} [cp_{MMFS} (T_f - T_i) + \ell + cp_{MMFL} (T_0 - T_f)] \quad (7)$$

Esta última totaliza o calor sensível armazenado no sólido, o latente de mudança de fase sólido-líquido ($m_{MMF} \cdot \ell$) e por fim o calor sensível responsável pelo aquecimento do MMF na fase líquida.

O início do processo de recuperação da energia contida no armazenador é feito introduzindo-se água a uma vazão \dot{m}_{H_2O} pela base do sistema (ver figura 1). A temperatura de admissão dessa água é

$$T_i < T_f \quad (8)$$

O objetivo deste trabalho é verificar a influência da vazão, tipo, diâmetro e espessura do material encapsulante. Para tal, arbitra-se o volume do material encapsulante e o volume de água no interior do armazenador, o que implica em impor a energia acumulada por unidade de volume.

Com o objetivo de comparar o total de energia acumulada, tomou-se como caso base o definido por Braga (1993). Neste, o armazenador conteria somente água, onde a energia acumulada em seu interior seria dada por:

$$E_b = \rho_{H_2O} \nabla_{total} cp_{H_2O} (T_0 - T_i) \quad (9)$$

Para os armazenadores com MMF, parte do volume interno é ocupado pelo "enchimento" do reservatório, composto pelos dutos, no interior dos quais encontra-se o MMF.

$$\nabla_{total} = \nabla_{H_2O} + \nabla_{enc} + \nabla_{MMF} \quad (10)$$

A energia acumulada é então expressa pela soma das energias contidas na água, nas paredes encapsulantes e, principalmente, no MMF.

$$E_0 = (\rho_{H_2O} \nabla_{H_2O} c_{p_{H_2O}} + \rho_{enc} \nabla_{enc} c_{p_{enc}}) (T_0 - T_i) + E_{MF_0} \quad (11)$$

E_{MF_0} representa a energia total acumulada pelo MMF, onde se inclui o calor latente e o sensível nas duas fases.

Obviamente o volume interno para acúmulo de água será tão menor quanto maior for o volume do "enchimento" no armazenador. Isto reduz a energia acumulada neste líquido, fato que é compensado pela presença do MMF, devido ao calor latente de fusão.

Critério de comparação entre os casos. A substituição de água por qualquer um dos MMF tradicionalmente utilizados eleva a capacidade de armazenamento de energia. A recuperação desta energia é, no entanto, dependente dos parâmetros geométricos e físicos dos constituintes do sistema. A taxa de recuperação de energia parece pois ser o parâmetro mais adequado para a comparação entre os casos. Isto sem deixar, é claro, de comparar a energia total acumulada caso a caso.

SOLUÇÃO DO PROBLEMA

Conforme já mencionado o problema foi tratado como unidimensional. Utilizou-se o método de volumes finitos com uma malha fixa de 100 pontos nodais para a discretização do armazenador. Adotou-se por simplicidade o esquema explícito. Além disto, devido aos valores numéricos dos parâmetros, também foi usado o esquema Upwind, tendo em vista o alto valor do número de Peclet nas diversas situações estudadas.

Para cada instante de tempo e cada volume de controle, conhecidas as temperaturas externa, da água, mais as condições internas do MMF (raio da interface e/ou temperatura da fase líquida), é possível determinar o fluxo local de calor, através da equação (2). Integrando-se este fluxo no tempo, avalia-se a quantidade de calor retirada do volume em questão e, conseqüentemente, o novo estado de energia. Quando a temperatura de fusão é atingida inicia-se o processo de mudança de fase, onde o calor retirado determina o volume local solidificado. Com isto, a cada intervalo de tempo é possível encontrar o raio do MMF líquido e a nova resistência térmica do volume de controle em estudo.

Informações mais detalhadas sobre o método numérico e sua solução podem ser obtidas no trabalho anterior (Braga, 1993).

RESULTADOS E COMENTÁRIOS

Diversas configurações foram simuladas onde o calor acumulado no MMF, no interior de dutos cilíndricos alinhados com o escoamento, é recuperado em regime transiente. Para todos os casos optou-se por uma temperatura inicial $T_0 = 65^\circ\text{C}$ enquanto a temperatura de entrada foi fixada próxima à ambiente; como $T_i = 23^\circ\text{C}$. Estes valores estão em consonância com a temperatura de fusão da parafina utilizada que é $T_f = 55^\circ\text{C}$. Desta forma,

$$T_i < T_f < T_0 \quad (12)$$

A escolha deste MMF foi motivada, principalmente, pela temperatura de fusão e disponibilidade do material. A princípio, para esta fase do estudo, não foi parâmetro decisivo o total de calor armazenado e sim a facilidade de se construir um dispositivo experimental capaz de dar confiabilidade ao simulador. Tal comparação deve ser realizada brevemente.

Como os resultados têm um objetivo meramente comparativo, alguns parâmetros foram mantidos constantes em todas as simulações. São eles: $H = 0,5\text{m}$ e $D = 0,3\text{m}$ ($\nabla_{total} = 35,34 \times 10^{-3} \text{ m}^3$ e $\nabla_{enc} = 4,42 \times 10^{-3} \text{ m}^3$).

Na ausência de tubos no interior do armazenador, todo o volume interno é ocupado inicialmente por água a 65°C . A energia acumulada neste caso, tendo por referência a temperatura de entrada, é dada pela equação (9). Para estas condições chega-se a $E_b = 6,09 \times 10^6 \text{ J}$.

Diversos casos foram estudados variando-se a vazão de água e o diâmetro dos dutos encapsulantes, bem como o seu material e espessura. O volume de MMF variou devido à adoção de diâmetros comercialmente padronizados que apresentam diferenças de espessura. Entretanto, estas variações são irrelevantes e não afetam a comparação entre diâmetros.

Vários casos foram analisados. Estes são apresentados na Tabela 1 para posterior comparação. Nesta aparecem a vazão, o número de dutos, diâmetro externo e material do duto e a energia inicial para cada um destes casos.

Tabela 1 - Casos investigados para o armazenador.

Caso #	Vazão ($10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$)	Nº de tubos	D_e (mm)	Material	$\frac{\nabla_{MMF}}{\nabla_{TOTAL}}$	$\frac{E_0}{E_b}$
1	66,5	202	19,05	alum.	0,69	1,19
2	133,0	202	19,05	alum.	0,69	1,19
3	199,5	202	19,05	alum.	0,69	1,19
4	133,0	202	19,05	cobre	0,69	1,22
5	133,0	202	19,05	inox	0,69	1,23
6	133,0	202	19,05	plás.	0,69	1,17
7	133,0	455	12,70	alum.	0,66	1,15
8	133,0	90	28,58	alum.	0,72	1,23

Pode-se verificar na tabela 1 que uma substituição da ordem de 70% da água por esta parafina implica em um acréscimo de apenas 20% no calor total acumulado. Isto devido ao baixo calor latente do material empregado. Ao utilizar um composto salino, Braga (1993) encontrou fatores da ordem de 240% na capacidade de armazenamento. Este MMF, contudo, não foi aqui avaliado por mudar de fase numa faixa e não em ponto fixo de temperatura. Um maior número de tubos implica em leve decréscimo na acumulação, pelo fato das espessuras padronizadas acarretarem um ∇_{MMF} menor e, pelo mesmo motivo, um leve aumento é notado para uma menor quantidade de tubos. As espessuras usadas foram de 0,762mm, 0,635mm e 0,889mm para os diâmetros de 19,05mm, 12,7mm e 28,575mm, respectivamente.

Os casos acima foram simulados e armazenadas as temperaturas de saída da água e os respectivos instantes de tempo. Estas funções mostram a taxa de recuperação da energia contida no acumulador e são apresentadas nas Figuras 4 a 6.

A água entra pela base do armazenador, à temperatura ambiente e se aquece enquanto escoar em direção ao topo do armazenador. Isto faz com que os volumes de controle experimentem, nos instantes iniciais, maiores diferenças de temperatura entre o MMF e a água. Com isto retira-se mais calor dos volumes de controle inferiores do que dos superiores. Em consequência, a solidificação é mais rápida na base do que no topo do acumulador.

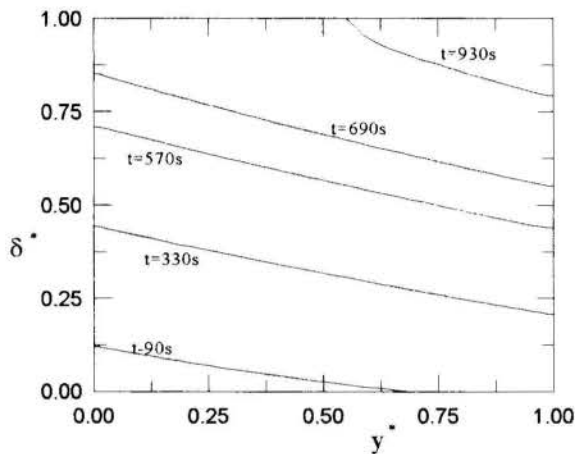


Figura 3 - Espessura adimensional versus posição adimensional, para vários instantes (caso # 2).

Isto pode ser verificado na Figura 3 que mostra como a região solidificada se distribui ao longo do duto, para diferentes instantes de tempo. Estão representadas, adimensionalmente, a espessura da região solidificada, $\delta^* = \delta / r_i = (r_i - r_m) / r_i$ e a posição longitudinal, $y^* = y / H$.

A Figura 4 mostra como a vazão afeta a temperatura de saída da água do armazenador ao longo do tempo. Como era de se esperar, a temperatura de saída da água cai mais rapidamente com as maiores vazões.

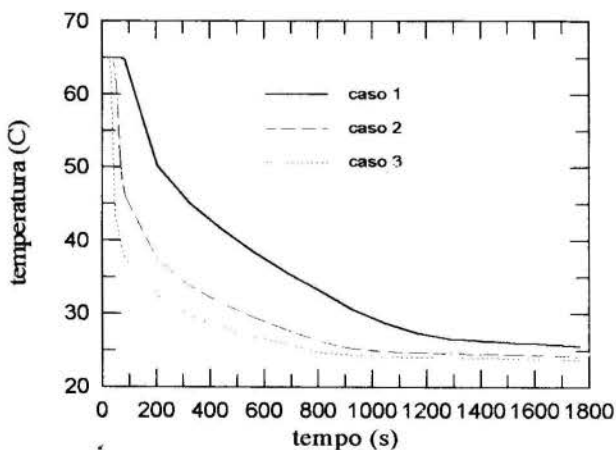


Figura 4 - Temperatura de saída da água em função do tempo e da vazão.

Para verificar a influência do material encapsulante foram simulados escoamentos através de dutos de cobre, pela sua alta condutividade térmica, aço inoxidável, por resistir bem às oxidações, alumínio, que combina bons custo e condutividade e, finalmente, plástico, pelo custo, durabilidade e acomodação às variações de volume. O resultado pode ser constatado na Figura 5. O plástico, pela sua menor condutividade, apresenta o pior desempenho. Como utilizou-se aqui uma espessura pequena para todos os encapsulantes, a energia inicial é praticamente constante em todos os casos.

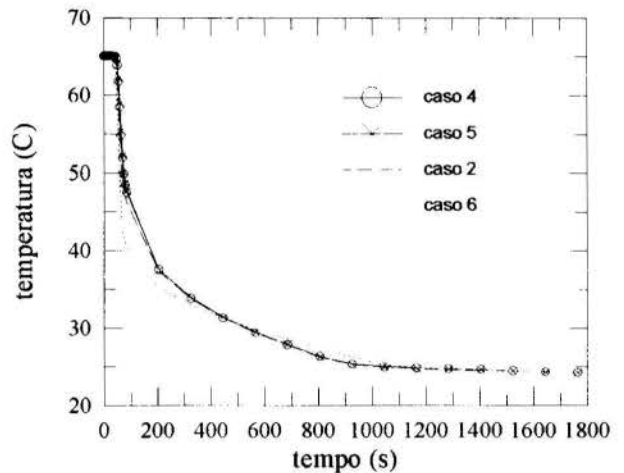


Figura 5 - Influência do material encapsulante na recuperação do calor.

Ficou constatado que variar a espessura de materiais bons condutores pouco afeta a recuperação do calor, tendo mais influência na energia total armazenada. Testes com espessuras muito pequenas, da ordem de 0,1 mm, mostram curvas coincidentes para todos os materiais, visto que a resistência à condução fica desprezível, inclusive para o plástico.

Também foi objeto de estudo a variação de diâmetro dos dutos. Como citado anteriormente, a variação de espessura para os diferentes casos é aqui desprezada. A variação do número de tubos é decorrente da manutenção dos volumes de água e de material encapsulante dentro do acumulador.

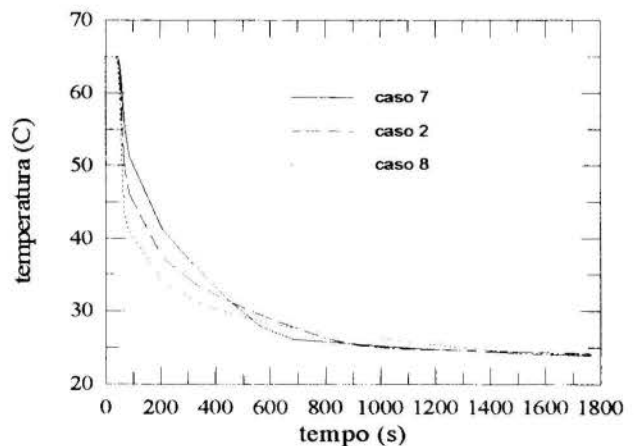


Figura 6 - Influência do diâmetro do tubo encapsulante na recuperação do calor.

Na Figura 6 pode ser visto que o pior desempenho acontece para os tubos de maior diâmetro, que são em menor número. Fica evidente que a maior quantidade de tubos leva a uma maior área de troca de calor e, conseqüentemente, maior taxa de recuperação da energia armazenada.

CONCLUSÃO

Uma nova formulação para a recuperação do calor armazenado sob forma de latente foi desenvolvida. Esta inclui a influência transiente do material de mudança de fase solidificado na resistência à transferência de calor para o fluido que escoava enquanto recupera a energia acumulada. Os resultados mostraram-se bons, dentro do esperado. Devem, contudo, passar por um processo de comparação com dados experimentais.

Foi constatado que a recuperação da energia armazenada depende fortemente da geometria, dos materiais empregados na construção do armazenador e da vazão do fluido recuperador. Sua taxa pode atingir valores bastantes satisfatórios se estes fatores forem controlados e combinados adequadamente.

O uso de encapsulantes plásticos é viável, mas existe um forte comprometimento entre sua espessura e a taxa de recuperação de calor.

Estes estudos preliminares mostram que a vazão do fluido possui uma influência muito mais forte na recuperação do calor do que a escolha do material ou do diâmetro do tubo encapsulante.

REFERÊNCIAS

- Abhat, A., 1983, "Low Temperature LHTES: Heat Storage Materials," *Solar Energy*, 30(4).
- Braga, S.L., 1993, "Recuperação da Energia Armazenada sob Forma de Calor Latente", *Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Brasília, DF, Vol. II, pp. 713-716.
- Deal, R. and Solomon A. D., 1981, "The simulation of four pure conduction paraffin-wax freezing experiments," ORNL/CSD-74, Oak Ridge National Laboratory.
- Golbersuch, D.C., et al., 1976, "Thermal energy storage for utility applications," Report 75CRD256, General Electric.
- Patankar, S.V. 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow," Hemisphere, Washington.
- Rohsenow, W.M., Hartnett, J.P. e Ganic, E.N., 1985, "Handbook of Heat Transfer Applications", Editora Mc Graw Hill, 2a. Edição.
- Shamsundar, N. and Sparrow E. M., 1974, "Storage of thermal energy by solid liquid phase change temperature drop and heat flux," *J. of Heat Transfer of the ASME*, pp.541-534.
- Solomon, A. D., 1981, "Some approximations of use in predicting the behavior of a PCM cylinder array," *Letters in Heat & Mass Transfer*, Vol. 8, pp.237-246.

ABSTRACT

The storage of latent heat is considered in order to reduce the volume of thermal storage systems, due to the high latent heat when compared with the specific heat. Water flows along circular ducts filled with phase-change materials, while is

heated from the ambient temperature. A theoretical transient analysis is developed where the influence of important parameters are investigated. The total amount of heat, as well the heat recovery rate, are considered, because they are very important for evaluation of the system performance. The heat recovery is presented in terms of the water temperature at the end of heat storage device as a function of the time.



FUSÃO EM CAVIDADES NA PRESENÇA DE CONVECÇÃO NATURAL

Gisele M.R. Vieira; Sérgio L. Braga
Departamento de Engenharia Mecânica - PUC
22.453-900 - Rio de Janeiro - RJ - Bra il

Dominique Gobin
URA 871 - CNRS - Paris VI, Campus Universitaire, Bat.502,
91405 - Orsay Cedex - France



RESUMO

Este artigo apresenta uma análise bi-dimensional do processo transiente de fusão de uma substância em uma cavidade quadrada, a qual tem uma das paredes verticais aquecida. A simulação é feita numericamente. Foram examinadas dois tipos de substâncias, uma apresentando número de Prandtl=50 (parafina) e a outra, apresentando número de Prandtl=0.02 (metal). O estudo é feito com o objetivo de se obter maiores informações sobre o comportamento de materiais com baixos e altos números de Prandtl, sujeitos à fusão.

INTRODUÇÃO

O estudo da transferência de calor acarretando mudança de fase em um sistema, tem sido alvo de várias pesquisas. O motivo desse interesse está relacionado às numerosas aplicações e ao fato de que ainda há muito a se descobrir no campo em questão, devido à complexidade dos fenômenos envolvidos. Vários estudos foram feitos numa tentativa de se superar estas dificuldades e neste sentido, pode-se mencionar o trabalho de Jany e Bejan (1988), onde é feita uma análise da escala correta de trabalho para o problema da fusão com convecção em cavidades. Dentre as diversas aplicações industriais, pode-se citar: processamento e purificação de metais, crescimento de cristais, armazenamento e recuperação de energia, controle térmico de ambientes, entre outras. A convecção natural desempenha um importante papel no processo de fusão e solidificação, de forma que pode afetar consideravelmente, a forma e o movimento da interface sólido/líquido durante a mudança de fase. Isto já foi mostrado experimentalmente e mais tarde, comprovado numericamente. Na parte experimental podem ser citados, por exemplo, os trabalhos de Bénard et al. (1985), Gau e Viskanta (1986) e Wolff e Viskanta (1987). Na parte numérica, podem ser mencionados os trabalhos de Lacroix e Voller (1990) e Kim e Kaviani (1992), baseados no método de Diferenças Finitas. Diversos tipos de geometrias foram estudadas. Sparrow et al. (1977), Vargas et al. (1994) e Souza Mendes e Pinho Brasil (1987) apresentaram uma análise do processo de fusão utilizando um cilindro. Hale e Viskanta (1980) estudaram o fenômeno da transferência de calor durante o processo de mudança de fase (PCP) sobre e sob uma placa horizontal aquecida. Bénard et al. (1986) e Desai e Vafai (1993) apresentaram um estudo sobre a fusão, usando uma cavidade retangular. Braga e Viskanta (1989) estudaram o processo da solidificação de uma solução binária, também usando uma cavidade retangular.

O presente trabalho estuda o processo de fusão em uma cavidade quadrada bi-dimensional, contendo inicialmente uma substância no estado sólido à temperatura de fusão T_F . A fusão é iniciada aumentando-se a temperatura de uma das paredes verticais da cavidade.

DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O problema físico para um tempo $t^* > 0$ está representado na Figura 1. Considera-se que as paredes horizontais são adiabáticas. Em $t^* = 0$, a parede vertical esquerda é submetida à temperatura $T_H = T_F + \Delta T$ e a parede vertical direita é mantida à temperatura T_F . Como mostra a figura 1, a frente de fusão é definida por uma função do espaço e do tempo, $c(z, t^*)$. Esta função é igual à distância horizontal entre a parede quente e a frente de fusão. H é a altura da cavidade e L é a largura. Adimensionalizou-se o tempo e a função que representa a posição da frente de fusão, da seguinte forma:

$$t = t^* \nu / H^2 \quad (1)$$

onde ν é a viscosidade cinemática.

$$C(\hat{Z}, t) = c(z, t^*) / L \quad (2)$$

As coordenadas foram transformadas e adimensionalizadas, com o objetivo de mapear a cavidade física irregular (espaço ocupado pelo líquido) em um espaço computacional retangular.

$$\hat{Z} = z/H \quad (3)$$

$$\hat{Y} = y / (C(\hat{Z}, t)H) \quad (4)$$

As condições de contorno para o problema em questão são especificadas ao longo das paredes verticais (onde $\hat{Y} = 0$ e $\hat{Y} = 1/A$, sendo A , a razão de aspecto da cavidade) e das paredes horizontais (onde $\hat{Z} = 0$ e $\hat{Z} = 1$). Logo, tem-se ao longo da parede vertical esquerda, ou seja, a parede aquecida, onde $\hat{Y} = 0$:

$$\theta(0, \hat{Z}) = 0.5; \quad U(0, \hat{Z}) = 0; \quad V(0, \hat{Z}) = 0 \quad (5)$$

sendo U e V as componentes (vertical e horizontal) do vetor velocidade adimensional \mathbf{V} , dado por $\mathbf{V} = \mathbf{V}^*H/\nu$, onde \mathbf{V}^* é o vetor velocidade dimensional. θ representa a temperatura

adimensional, dada por: $\theta = (T - T_m) / \Delta T$, sendo $\Delta T = T_H - T_F$. T é a temperatura dimensional do líquido. A temperatura média do líquido é dada por $T_m = (T_H + T_F) / 2$.

Ao longo da parede direita irregular, ou seja, da frente de fusão, onde $\hat{Y} = 1/A$:

$$\theta(1/A, \hat{Z}) = -0.5; U(1/A, \hat{Z}) = 0; V(1/A, \hat{Z}) = 0 \quad (6)$$

Ao longo da parede horizontal superior, onde $\hat{Z} = 1$:

$$d\theta(\hat{Y}, 1) / d\hat{Z} = 0; U(\hat{Y}, 1) = 0; dV(\hat{Y}, 1) / d\hat{Z} = 0 \quad (7)$$

Ao longo da parede horizontal inferior, onde $\hat{Z} = 0$:

$$d\theta(\hat{Y}, 0) / d\hat{Z} = 0; U(\hat{Y}, 0) = 0; V(\hat{Y}, 0) = 0 \quad (8)$$

O sistema de coordenadas adimensionais utilizado para resolver a equação do movimento da frente de fusão, foi:

$$Z = \hat{Z} = z / H \quad (9)$$

$$Y = y / H \quad (10)$$

Para um melhor esclarecimento quanto ao sistema de coordenadas, vale a pena ressaltar as seguintes relações:

$z, y \Leftrightarrow$ Coordenadas dimensionais. \hat{Z} e $\hat{Y} \Leftrightarrow$ Coordenadas computacionais adimensionais. Z e $Y \Leftrightarrow$ Coordenadas físicas adimensionais.

Maiores detalhes sobre as equações citadas anteriormente, podem ser encontrados no trabalho de Gobin e Benard (1992).

Hipóteses Simplificadoras. Assume-se que a velocidade de propagação da frente de fusão é várias ordens de grandeza menor do que a velocidade nas camadas limites próximas às paredes verticais. Devido a isto, pode-se dividir o processo em um número de passos quase estáticos e desacoplar os cálculos do movimento da frente de fusão, dos cálculos do escoamento com convecção natural na região de fusão. Como pode ser visto através da figura 1, está se considerando que o presente problema é bidimensional, uma vez que a dimensão na direção z é grande quando comparada com as outras duas. O número de Grashof de trabalho, baseado na altura, é da ordem de 10^7 (caso1) e de 10^6 (caso2), logo, $Gr_H < 10^9$, ou seja, o escoamento é laminar. Cabe ressaltar, que já foi mostrado por Bejan e Lage (1990), que o parâmetro determinante que indica a transição do escoamento laminar para o turbulento é o número de Grashof e não o número de Rayleigh, como se pensava anteriormente. O fluido de trabalho é Newtoniano, incompressível e possui densidade constante em todos os termos, menos no de força de corpo, onde se faz a aproximação de Boussinesq.

Equações de Governo. As equações adimensionais utilizadas no domínio líquido não retangular, são:

Equação da Continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (11)$$

onde \mathbf{V} é o vetor velocidade.

Equação da Quantidade de Movimento

$$(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = \nabla^2 \mathbf{V} - \nabla P + Gr_H \theta \mathbf{k} \quad (12)$$

onde P é a pressão, \mathbf{k} é o vetor unitário na direção vertical e $Gr_H = g\beta\Delta TH^3 / \nu^2$.

Equação da Energia

$$(\mathbf{V} \cdot \nabla) \theta = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \theta \quad (13)$$

onde $Pr = \nu / \alpha$

Na interface móvel, a equação do Balanço da Energia é dada por:

$$\nabla \theta \cdot \mathbf{n} = \rho^* \frac{\partial c}{\partial \tau} \quad (14)$$

onde $\tau = Ste \times Fo$, sendo que $Ste = C_p \Delta T / L_f$ e $\frac{\partial c}{\partial \tau}$ representa a

velocidade local da posição de frente ao longo do vetor \mathbf{n} , normal à interface.

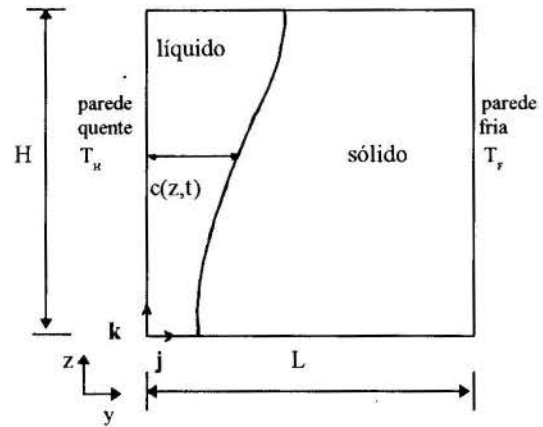


Figura 1- Sistema de coordenadas aplicado ao problema físico

PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO

O procedimento de solução é baseado nas hipóteses clássicas de quase estacionariedade. Desta forma, fixa-se a posição de frente para resolver separadamente o problema do escoamento do fluido e o movimento da frente de fusão. O sistema de equações não lineares, Eq.(11,12 e 13) que governa a convecção natural na cavidade líquida irregular, é resolvido através de uma transformação algébrica de coordenadas. Usando o esquema híbrido diferencial (Patankar, 1980), discretizam-se as equações transformadas, num domínio computacional quadrado. Para números de Peclet (Pe) > 2 , usa-se o esquema upwind. Nos escoamentos de convecção natural, as zonas de altos Pe aparecem sobretudo para $Pr=50$ e são limitadas a algumas zonas da camada limite. O algoritmo SIMPLE é utilizado para resolver o acoplamento pressão-velocidade. A solução das equações discretizadas é obtida com o procedimento ADI. É importante mencionar que a maior parte do escoamento ocorre nas camadas limites, ou seja paralelamente às linhas da malha. Logo, os problemas do tipo "difusão numérica provenientes do fato do escoamento ser oblíquo à malha" são minimizados.

O cálculo é inicializado com uma cavidade retangular líquida de espessura δ e o tempo correspondente é dado pela solução do problema uni-dimensional de Stefan.

Alguns tipos de malhas foram testados. Os resultados demonstraram muito pouca sensibilidade à malha. Isto sugere a ideia de que o uso de um esquema potencialmente de primeira ordem na discretização das equações de transporte, não induz a erros significantes para uma gama limitada de números de Rayleigh. Escolheu-se a malha 42 (geométrica) x 42 (regular) para a apresentação dos resultados, pois a partir daí, uma melhor

discretização não afeta de forma considerável a precisão dos resultados. A malha definida no domínio computacional quadrado é espaçada de forma irregular para se obter uma melhor resolução do gradiente de temperatura e velocidade nas paredes sólidas.

Resultados experimentais apresentados por Bénard et al (1985) foram comparados com sucesso a resultados provenientes de uma versão anterior do código, onde usava-se uma transformação simplificada de coordenadas.

A tabela a seguir, mostra os parâmetros utilizados para os dois casos testes. É importante ficar claro que a idéia dos testes era obter resultados qualitativos sobre o comportamento de uma substância com baixo Pr e outra com alto Pr, sujeitas ao fenômeno da fusão. O interesse está em acompanhar o desenvolvimento do processo com o passar do tempo para duas substâncias com número de Prandtl bastante diferentes. Por isto, deve-se ressaltar que não está se fazendo uma comparação no sentido exato da palavra, apenas um paralelo entre duas situações diferentes. Cabe mencionar também que estes são resultados iniciais de referência de um trabalho de tese de doutorado que se encontra em fase de desenvolvimento.

Tabela 1 - Parâmetros utilizados para os casos testes.

PARÂMETRO	CASO 1	CASO 2
Pr	0,02	50
Ra_h	$2,5 \times 10^5$	1×10^8
Ste	0,01	0,1
Gr_h	$1,25 \times 10^7$	2×10^6
dt	0,003	0,1
A	1	1

A razão de aspecto representada pelo parâmetro A é igual a unidade devido ao fato de se estar trabalhando com uma cavidade quadrada. O passo de tempo dt foi escolhido após vários testes com outros passos de tempo. Esta escolha foi feita traçando-se o gráfico do número de nusselt e verificando-se qual dos passos de tempo apresentava uma solução com melhor comportamento em termos de convergência, oscilações, etc. Para se chegar aos outros valores mostrados na Tabela 1, foram utilizadas as seguintes propriedades termofísicas:

Tabela 2 - Propriedades termofísicas utilizadas.

PROPRIEDADE	CASO1 (Pr=0,02)	CASO2 (Pr=50)
Condutividade térmica: k (W/m ² K)	60	0,2
Calor específico: C _p (J/Kg ^o K)	200	1,25
Coefficiente de expansão volumétrica: β (°K ⁻¹)	$8/3 \times 10^{-3}$	2×10^{-3}
Viscosidade cinemática: ν (m ² /s)	8×10^{-7}	1×10^{-5}
Densidade: ρ (Kg/m ³)	7500	800
Calor latente: L _F (J/Kg)	6×10^4	$1,25 \times 10^5$
Difusividade térmica α (m ² /s)	4×10^{-5}	2×10^{-7}
ΔT (°C)	3	10

Utilizou-se para a largura (L) e altura (H) da cavidade, representadas na Figura 1, uma medida de 0.10 m e considerou-se para a aceleração da gravidade g, um valor de $10 \text{ (m/s}^2\text{)}$.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para uma melhor análise e compreensão, os resultados foram colocados em forma de gráficos e dispostos em uma mesma página. Foram apresentados dois tipos de gráficos: um referente à temperatura e o outro à função corrente. Embora tenha sido feito um estudo para diversos τ, escolheu-se apenas três para a apresentação dos resultados. Os comentários que se seguem são relativos aos gráficos da temperatura. Observou-se que no início do processo, ou seja, quando τ é ainda muito pequeno, tanto o material de Pr=0,02; quanto o de Pr=50, apresentaram um regime inicial de condução pura. O processo convectivo começou mais cedo para Pr=50, como já era esperado. Para $StexFo = \tau = 0,03634$ (caso 1) e $StexFo = \tau = 0,00401$ (caso 2), pode-se perceber através das Figuras 2(a) e 3(a), que o regime convectivo está bastante presente. Para altos Pr, ele é dominante, enquanto para baixos Pr, pode-se perceber, além da presença da convecção, uma forte presença do regime condutivo, principalmente nas regiões perto das paredes horizontais.

Com o passar do tempo, o processo de fusão avança e a presença do líquido é cada vez maior na cavidade. A forma das isothermas continua bastante diferente para as duas situações, como mostra as Figuras 2(b) e 3(b). Para a situação de Pr=0,02, ainda tem-se condução na parte inferior da cavidade.

Avançando-se ainda mais no tempo, tem-se uma maior fração de líquido fundido e um regime de convecção dominante, como mostram as Figuras 2(c) e 3(c). Pode-se perceber que para Pr=0,02, o regime convectivo já começa a avançar para a parte inferior da cavidade.

Os comentários que se seguem são referentes aos gráficos da função corrente. No começo do processo de fusão, como o regime dominante é o condutivo, o movimento da interface é paralelo à parede quente, tanto para Pr=0,02 quanto para Pr=50. Porém, logo em seguida, para τ um pouco maior, como mostra os gráficos das Figuras 4(a) e 5(a), feitos para $\tau = 0,03634$ (caso 1) e $\tau = 0,00401$ (caso 2) respectivamente, a forma da interface já está bastante diferente, devido ao regime convectivo. Pode-se observar através da Figura 5(a), a presença de pequenas recirculações. Verificou-se também para o caso 1, a presença de células contra-rotativas, uma no canto superior à esquerda e outra junto a interface sólido/líquido, no entanto, elas não foram representadas devido a suas baixas intensidades.

Para um tempo τ ainda maior, a forma da interface continua bastante diferente para as duas situações, como mostram as Figuras 4(b) e 5(b). Para a situação de Pr=0,02, a interface apresenta uma curvatura bastante forte, enquanto para Pr=50, a interface apresenta uma curvatura mais suave. Isto acontece porque para o teste feito com baixo Pr, ainda tem-se uma forte presença de condução na parte inferior da cavidade. Para as duas situações, no entanto, pode-se observar que a frente de fusão avança sempre mais rapidamente na parte superior da cavidade, do que na inferior e isto acontece porque a transferência de calor, na interface, não é uniforme. Os gráficos mostram o crescimento das células rotativas e contra-rotativas.

Conforme se avança no tempo, as células continuam a crescer, como mostram as Figuras 4(c) e 5(c). As pequenas células contra-rotativas, não representadas, que aparecem nos cantos da cavidade líquida para o caso 1, são típicas de fluidos com baixos Pr apresentando convecção natural, como mostra experimentalmente Wolff et al. (1988).

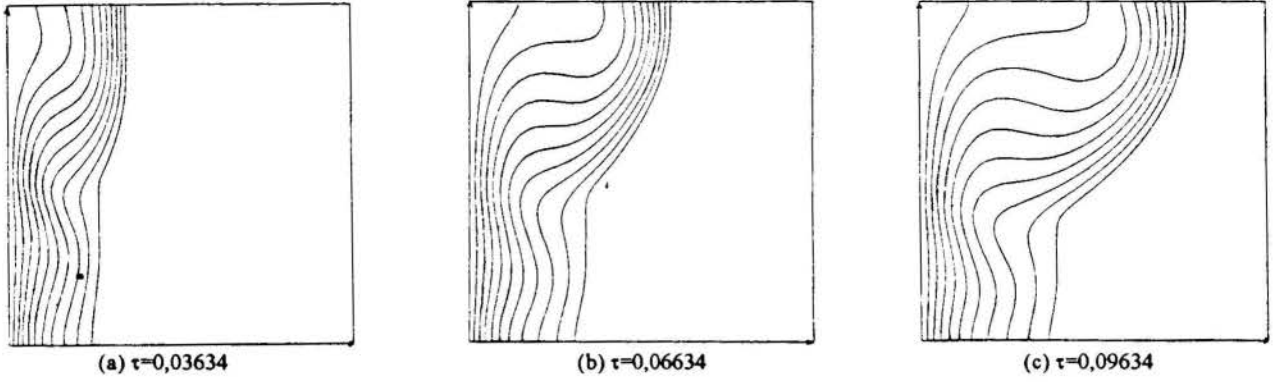


Figura 2 - Distribuição das isothermas da parte líquida. $Pr=0,02$.

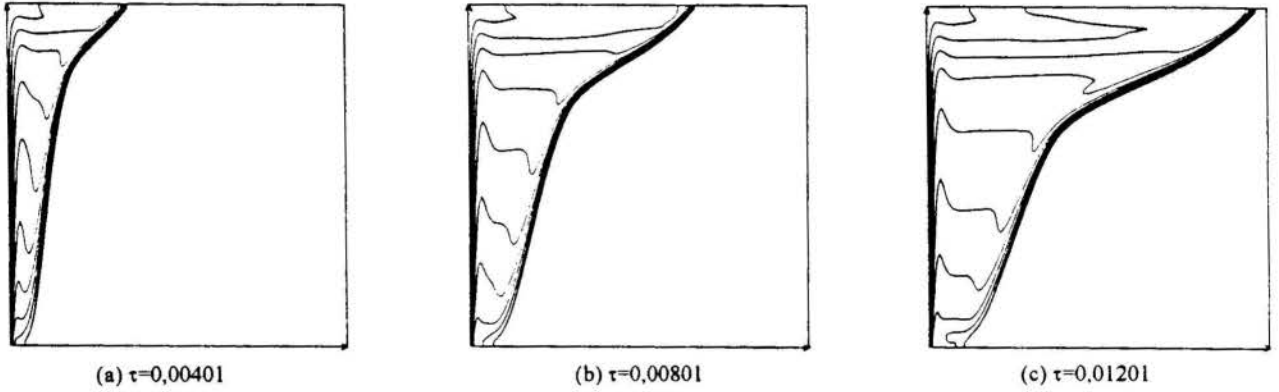


Figura 3 - Distribuição das isothermas da parte líquida. $Pr=50$.

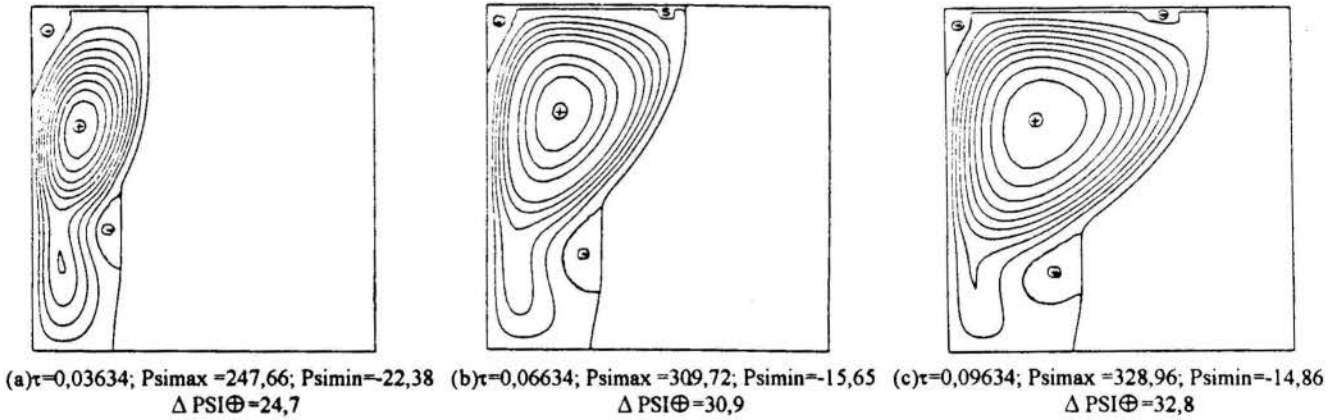


Figura 4 - Posição da frente de fusão e Distribuição das linhas de corrente da parte líquida. $Pr=0,02$.

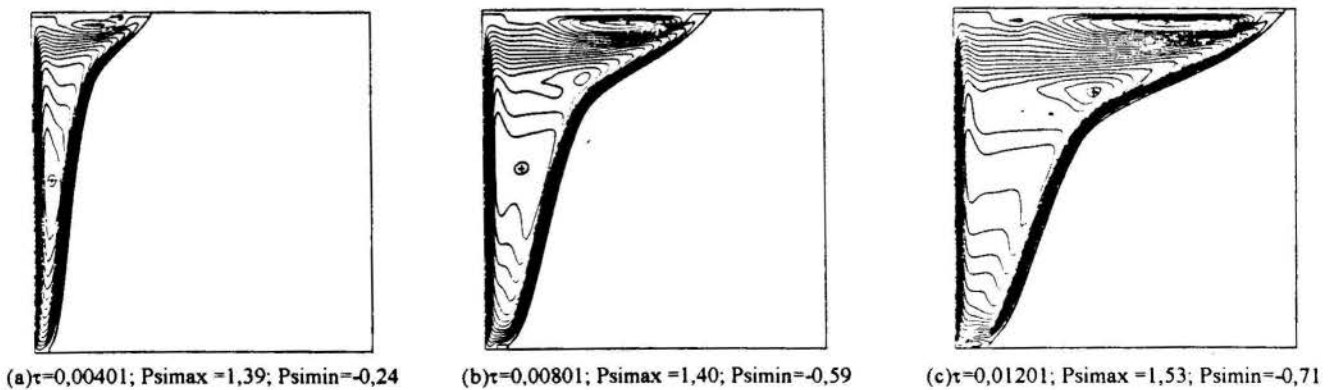


Figura 5 - Posição da frente de fusão e Distribuição das linhas de corrente da parte líquida. $Pr=50$. $\Delta PSI\oplus = PSI\ominus = 0,1$.

CONCLUSÃO

Os resultados mostram que para altos Pr, há uma maior transferência de calor e tem-se um regime convectivo mais forte do que quando se trabalha com baixos Pr, como já era esperado. Assim, a interface sólido/líquido apresenta uma curvatura mais forte para baixos Pr e mais suave para altos Pr.

Como já foi colocado anteriormente, os resultados apresentados servem como um estudo preliminar para a futura utilização do código numérico em casos de fusão com convecção térmica e inversão de densidade e posteriormente, em casos com convecção termosolutal. Neste último, as condições limites (temperatura e concentração da interface) mudam ao longo do tempo. Para estes casos é fundamental a comparação com resultados experimentais, devido à complexidade do processo.

REFERÊNCIAS:

- Beckermann, C. and Viskanta, R., 1989, "Effect of Solid Subcooling on Natural Convection Melting of a Pure Metal", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 11, pp.416-424.
- Bejan, A. and Lage, J.L., 1990, "The Prandtl Number Effect on the Transition in Natural Convection Along a Vertical Surface", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 112, pp.787-790.
- Bejan, A., 1984, "Convection Heat Transfer", Wiley Science, New-York.
- Benard, C., Gobin, D. and Zanolli, A., 1986, "Moving boundary problem: heat conduction in the solid phase of a phase-change material during melting driven by natural convection in the liquid", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.29, No.11, pp.1669-1681.
- Benard, C., Gobin, D. and Martinez, F., 1985, "Melting in rectangular enclosures: Experiments and numerical simulations", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.107, pp.794-803.
- Braga, S.L. and Viskanta, R., 1989, "Solidification of a binary solution on a cold isothermal surface", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.33, pp.745-754.
- Desai, C.P. and Vafai, K., 1993, "A Unified Examination of the Melting Process Within a Two-Dimensional Rectangular Cavity", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.115, pp.1072-1074.
- Gadgil, A. and Gobin, D., 1984, "Analysis of Two-Dimensional Melting in Rectangular Enclosures in Presence of Convection", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.106, pp.20-26.
- Gau, C. and Viskanta, R., 1986, "Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall", *Journal of Heat Transfer*, Vol.108, pp.174-181.
- Gobin, D. and Bénard, C., 1992, "Melting of Metals Driven by Natural Convection in the Melt: Influence of Prandtl and Rayleigh Numbers", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.114, pp.521-524.
- Hale, N.W., Jr. and Viskanta, R., 1980, "Solid-Liquid Phase Change Heat Transfer and Interface Motion in Materials Cooled or Heated From Above and Below", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.23, pp.283-292.
- Ho, C.J. and Viskanta, R., 1984, "Heat Transfer During Melting From an Isothermal vertical Wall", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 106, pp.12-19.
- Jany, P. and Bejan, A., 1988, "Scaling theory of melting with natural convection in an enclosure", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.31, pp.1221-1235.
- Kim, C.J. and Kaviany, M., 1992, "A numerical method for phase-change problems with convection and diffusion", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.35, pp.457-467.
- Lacroix, M. and Voller, V.R., 1990, "Finite solutions of solidification phase change problems: transformed vs. fixed grids", *Num. Heat Transfer*, Vol. B-17, pp.25-41.
- Patankar, S.V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow". Hemisphere, McGraw-Hill, New York.
- Souza Mendes, P.R. and Pinho Brasil, A.C., 1987, "Heat transfer during melting around an isothermal vertical cylinder", *Journal of Heat Transfer*, Vol.109, pp.961-964.
- Sparrow, E.M., Patankar S.V. and Ramadhyani, S., 1977, "Analysis of melting in the presence of natural convection in the melt region", *Journal of Heat Transfer*, Vol.99, pp.520-526.
- Vargas, J.V.C., Bejan, A. and Dobrovicescu, A., 1994, "The Melting of an Ice Shell on a Heated Horizontal Cylinder", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol.116, pp.702-708.
- Viskanta, R., 1988, "Heat Transfer During Melting and Solidification of Metals", *Journal of Heat Transfer*, Vol.110(4B), pp.1205-1219.
- Wolff, F., Beckermann, C., and Viskanta, R., 1988, "Natural Convection of Liquid Metals in Vertical Cavities", *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol.1, pp.83-91.
- Wolff, F. and Viskanta, R., 1987, "Melting of a pure metal from a vertical wall", *Experimental Heat Transfer*, Vol.1, pp.17-30.

ABSTRACT

This article presents a two-dimensional analysis of the melting process of a substance in a square enclosure heated from one of the vertical walls. The simulation was performed numerically. Two types of materials are investigated, one with a Prandtl number=50 and other with a Prandtl number=0,02. The purpose of the present study is to acquire informations about low and higher Prandtl number materials in presence of melting.



BALANCES DE ENERGÍA EN CRISTALIZADORES POR ENFRIAMIENTO

Horacio A. Correa y Cynthia L. Carvajal

Departamento de Ingeniería Química

Universidad de Santiago de Chile

Casilla 10223 - Santiago - Chile



RESUMEN

Este trabajo tiene por objetivo analizar las ecuaciones de balances de energía en estado transiente, que permitan implementar un programa de simulación de la dinámica de un cristalizador SMRPM operando por enfriamiento para la cristalización del sistema $KNO_3 - H_2O$. Estas ecuaciones se resuelven en forma simultánea con las ecuaciones de balance masa para el sistema total y el soluto.

INTRODUCCIÓN

En los procesos de cristalización no isotérmica es de fundamental interés predecir los cambios de temperatura con el tiempo, así como conocer el tiempo para alcanzar la temperatura en el estado estacionario.

El objetivo de este trabajo es analizar las ecuaciones de Balances de Energía, en estado transiente, que permitan implementar un programa destinado a simular la dinámica de un cristalizador por enfriamiento. Además, se hace un estudio comparativo respecto a las ecuaciones planteadas por otros autores como es el caso de Tavare (1985) y Chan (1992).

MODELO PROPUESTO

Se describe aquí el comportamiento de un cristalizador SMRPM operando por enfriamiento para la cristalización del sistema $KNO_3 - H_2O$ (Figura 1). El flujo de solución Q_1 que entra al cristalizador es constante, de concentración C_1 y temperatura T_1 , conocidas. El volumen V del cristalizador es constante y el flujo volumétrico de suspensión Q_2 , de concentración C_2 , abandona el equipo por rebalse, a una temperatura definida por las condiciones de operación necesarias para una producción de cristales, P . El enfriamiento se realiza mediante una camisa de intercambio de calor, por la que circula agua como refrigerante.

En este modelo se desprecian las pérdidas de calor al ambiente, pues el intervalo de temperatura es moderado y su valor medio es cercano a la ambiental. Además, se supone que el estado transiente se debe exclusivamente al proceso de enfriamiento, distinguiéndose un período de enfriamiento de la solución hasta alcanzar la saturación y otro período en el que se produce la cristalización.

PERÍODO DE SATURACIÓN

La extensión de este período, está dado por el tiempo que tarda la solución en tener una solubilidad igual a (C_1).

El balance de energía es:

$$V \frac{d(H_2 \cdot \rho_2)}{d\theta} = Q_1 \cdot \rho_1 \cdot H_1 - Q_2 \cdot \rho_2 \cdot H_2 - Q_c \quad (1)$$

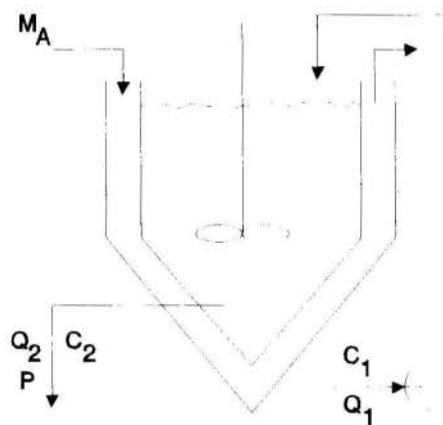


Figura 1. Cristalizador SMRPM

Combinando esta ecuación con las correspondientes a los balances de soluto y masa total y realizando arreglos matemáticos se obtiene:

$$\frac{dT_2}{d\theta} = \frac{Q_1 \cdot \rho_1 \cdot (H_1 - Q_c)}{V \cdot \rho_2 \cdot (dH_2/dT_2)} \quad (2)$$

El flujo de calor (Q_c) está dado por:

$$Q_c = \frac{M_a \cdot c_{pa} \cdot U \cdot A \cdot (T_2 - t_1)}{U \cdot A + M_a \cdot c_{pa}} \quad (3)$$

donde U es el coeficiente total de transferencia de calor y A el área de intercambio para una camisa. H_1 y H_2 son las entalpías de las soluciones de entrada y salida, según:

$$H = [m \cdot c_{psal} + (1 - m) \cdot c_{ps}] (T - T^*) + m \cdot \Delta H_S \quad (4)$$

Debido a la falta de información, en la Ec. (4) se reemplazó el calor de solución (ΔH_S) por el calor de solución a dilución infinita a $18^\circ C$, este dato y las capacidades calóricas de

la sal (c_{psal}) y del agua (c_{pa}) se obtienen de la literatura.

Reemplazando Ecs. (3) y (4) en Ec. (2) se obtiene la ecuación diferencial que describe la temperatura T_2 en función del tiempo. Esta función compleja debe resolverse numéricamente, eligiéndose el método de Runge-Kutta 4x4. La condición inicial de dicha ecuación es: $T_2^{(n)} = T_1$ cuando $\theta = 0$.

Además de lo anterior es posible evaluar la acumulación de soluto debido al aumento de la densidad al descender la temperatura. Este término se calcula desde el balance de soluto, conocida la densidad (ρ_2) en $\theta^{(n)}$ y en $\theta^{(n+1)}$. Con esto se determina la razón $\beta = S_1/S_2$ o la variación en Q_2 .

PERÍODO DE CRISTALIZACIÓN

En el período anterior se comprobó que la acumulación máxima de soluto es del orden del 0.2%, luego se puede despreciar el término de acumulación de soluto para simplificar la resolución del balance de masa total. Esto permite plantear el balance de energía como:

$$\frac{d(M_s \cdot H_s + M_c \cdot H_c)}{d\theta} = S_1(1 + C_1)H_1 - S_2(1 + C_2)H_2 - P \cdot H_c - Q_e \quad (5)$$

$$\text{donde} \quad Q_2 = V \cdot M_t \quad (6)$$

y la densidad de la pulpa (M_t):

$$M_t = \frac{\rho_2 \cdot \rho_c (\beta \cdot C_1 - C_2)}{\rho_2 (\beta \cdot C_1 - C_2) + \rho_c (1 + C_2)} \quad (7)$$

siendo β igual a 1 en el estado estacionario. La masa de suspensión corresponde a la masa de solución (M_s) y la de cristales (M_c) dentro del cristalizador en un instante θ , siendo:

$$M_s = \frac{V \cdot \rho_2 \cdot \rho_c (1 + C_2)}{\rho_2 (\beta \cdot C_1 - C_2) + \rho_c (1 + C_2)} \quad (8)$$

$$M_c = \frac{V \cdot \rho_2 \cdot \rho_c (\beta \cdot C_1 - C_2)}{\rho_2 (\beta \cdot C_1 - C_2) + \rho_c (1 + C_2)} \quad (9)$$

reemplazando las Ecs. (3), (4), (6) a (9) en Ec. (5) se obtiene una ecuación diferencial de la forma:

$$\frac{d\phi(T_2)}{d\theta} = F(T_2) \quad (10)$$

siendo $\phi(T_2)$ y $F(T_2)$ funciones implícitas en la temperatura y que se han obtenido reordenando la Ec. (10). Discretizando la expresión diferencial y conocido el paso de integración se puede calcular la función $F(T_2)$ y $\Delta\phi(T_2)$; con este último término se calcula T_2 por iteración.

MODELO DE CHAN

Chan (1992) desarrolló un modelo general para un cristalizador de enfriamiento con destrucción de finos y clasificación de producto removido. El modelo consiste esencialmente de los balances de masa, energía y población y expresiones para las velocidades de crecimiento y nucleación. Para solucionar el modelo en forma aproximada se usa el método de pesos residuales y la función de población se trata como una combinación lineal de funciones bases. Este método permite una reducción de la ecuación diferencial parcial en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias las cuales pueden ser resueltas numéricamente. En forma breve se puede describir el modelo planteando los siguientes balances:

BALANCE DE POBLACIÓN

Se plantea bajo los siguientes supuestos: agitación perfecta, no hay fractura ni aglomeración de cristales, volumen del cristalizador constante, remoción de producto clasificado y destrucción de partículas finas:

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\partial(Gf)}{\partial r} + f \frac{h(r)}{\tau} - B \delta(r) = 0 \quad (11)$$

donde $\delta(r)$ es la función delta de Dirac y la condición de borde para esta ecuación es justamente este último término. B es la velocidad de nucleación y G la de crecimiento. $h(r)$ es la función de remoción de producto:

$$h(r) = \begin{cases} R & r < r_f \\ 1 & r_f < r < r_p \\ z & r > r_p \end{cases} \quad (12)$$

la cual da la velocidad de remoción de cristal como una función del tamaño. Para un cristalizador SMRPM $h(r)=1$ y τ es el tiempo de residencia; R es la razón de destrucción de finos y Z la razón de clasificación.

BALANCE DE ENERGÍA

Chan (1992) ocupó los balances de energía para este tipo de equipo propuesto por Tavare et. al. (1985). Considerando el cristalizador de la Figura 2:

$$\rho V c_p \frac{dT}{d\theta} = \rho_0 Q_0 c_{p0} T_0 + \rho_r Q_r c_{pr} T_r - \rho Q_f c_p T - \rho_p Q_p c_{pp} T - U(T - T_c) + H_G + H_N \quad (13)$$

H_G y H_N representan el calor liberado debido al crecimiento y nucleación del cristal, respectivamente. Si se asume que el calor liberado debido a la nucleación es despreciable comparado al calor debido al crecimiento del cristal, entonces H_N puede despreciarse. Además el calor de crecimiento puede escribirse como:

$$H_G = \Delta H_G \cdot \rho_c \frac{dV_c}{d\theta} \quad (14)$$

en que
$$\frac{dV_c}{d\theta} = 3k_v V \int_0^\infty Gfr^2 dr \quad (15)$$

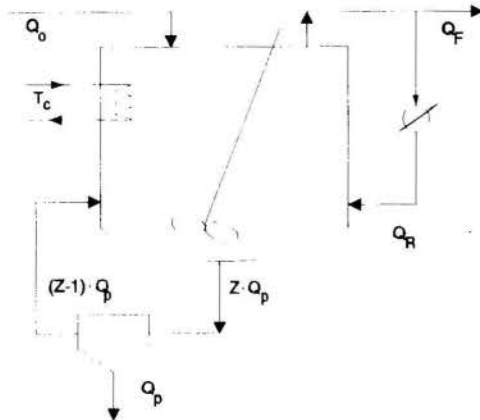


Figura 2. Cristalizador con Remoción y Clasificación.

ΔH_G es el calor liberado por el crecimiento del cristal por unidad de masa y V_c es el volumen total del cristal. El diferencial del volumen de cristales en función del tiempo es descrito a través de los factores de forma para un cristal esférico y a través de la velocidad de crecimiento lineal según: Además para describir el balance de energía, Chan realiza los siguientes supuestos: el calor perdido al ambiente es despreciable, sólo una pequeña fracción de volumen del cristalizador está ocupada por cristales, las densidades y calores específicos en todas las corrientes de entrada y salida tienen aproximadamente el mismo valor y no cambian con el tiempo.

Realizando un balance de masa al cristalizador se puede demostrar que:

$$Q_R = (R - 1)Q_p \quad (16)$$

$$Q_R = R \cdot Q_p - Q_0 \quad (17)$$

sustituyendo las Ecs. (14) a (17) en Ec. (13) se obtiene:

$$\frac{dT}{d\theta} = \frac{T_0}{\tau_0} - \left(\frac{R}{\tau} + \alpha \right) + \left(\frac{R}{\tau} - \frac{1}{\tau_0} \right) T_r + \alpha T_c + \beta \int_0^\infty Gfr^2 dr \quad (18)$$

donde:

$$\tau_0 = \frac{V}{Q_0}, \quad \tau = \frac{V}{Q_p}$$

$$\alpha = \frac{U}{\rho c_p V}, \quad \beta = \frac{\Delta H_G \rho_c k_a}{\rho c_p}$$

BALANCE DE SOLUTO

Se realiza un balance dinámico a la concentración de soluto para calcular la velocidad de crecimiento y nucleación, el cual consta de términos que representan los flujos de entrada y salida al cristalizador y la transferencia de masa entre los estados disuelto y cristal sólido. Para simplificar el balance de soluto se deben hacer los siguientes supuestos: hay destrucción total de finos en el calefactor, la desaparición de soluto debido a la nucleación es despreciable y la fracción de volumen de solución a volumen de suspensión es constante (ϵ). Entonces, el balance de soluto es:

$$\frac{d(eC)}{d\theta} = \frac{C_0 - (C + M_T)}{\tau_0} - \frac{(e - 1)CR - M_T R}{\tau} - \rho_c k_a \int_0^\infty Gfr^2 dr \quad (19)$$

Para calcular la concentración de soluto en la ecuación anterior es necesario conocer ϵ y M_T . Por definición:

$$\epsilon(\theta) = 1 - k_v \int_0^\infty fr^3 dr \quad (20)$$

$$M(\theta) = \rho_c k_v \int_0^\infty fr^3 dr \quad (21)$$

Además, las expresiones para las velocidades de nucleación y crecimiento están dadas en la forma de la conocida ley de potencia:

$$G = k_g e^{-\frac{E_g}{RT}} (C - C_s)^g \quad (22)$$

$$B = k_b e^{-\frac{E_b}{RT}} (C - C_s)^b M_T^j \quad (23)$$

donde k_g , k_b , g , b y j son parámetros. E_b y E_g son las energías de activación. C_s es la concentración de saturación del soluto.

Estas expresiones permiten describir completamente el modelo propuesto por Chan (1992) y para su solución se ha seguido el método indicado por Tavaré et. al. (1985), el cual consiste en definir parámetros para hacer adimensional dichos balances. Para su resolución numérica, Chan emplea el método de los residuos ponderados. Además, expresa la función de población como una combinación lineal de funciones ortogonales. Estas dos consideraciones hacen posible obtener un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

DISCUSIÓN

El primer modelo plantea el balance de masa total no estacionario debido al cambio en la temperatura. Esto se refleja en el cambio de densidades entre la entrada y la salida del equipo en función del tiempo. Debido a esto, también son dinámicos los balances de masa al soluto y al solvente.

Para resolver el balance de energía en forma simultánea con el de masa se puede considerar que la variación de soluto durante la cristalización es poco significativa. Para solucionar en forma exacta dicho sistema debe recurrirse al balance de población. Ello no fue posible a causa de la carencia de información respecto de las cinéticas de cristalización (Ecs. 22 y 23).

El modelo de Chan asume que las densidades de las corrientes son iguales, lo cual significa que el balance de masa total es estacionario, permitiendo así considerar dinámico el balance de soluto. Si bien, esta suposición es equivalente al modelo anterior en términos de aproximación de la dinámica de enfriamiento, presenta la ventaja de usar el balance de población, siempre que se disponga de la cinética de cristalización.

En el primer modelo se intenta describir un proceso para un sistema salino específico y obtener una guía preliminar para el diseño [3] y la operación de puesta en marcha. Como en este caso, el criterio de diseño se basa en la diferencia de densidades entre los flujos de entrada y salida del equipo, no se puede suponer que ellas son constantes.

BIBLIOGRAFÍA

Chan, W.M., 1992, "On the Dynamics of Complex Crystallizers. Part I: Model Development". *Revista Brasileira de Engenharia*, 9, 1, 5-27.

Correa et. al., 1988, "Diseño Preliminar de un Cristalizador SMRPM", *Contribuciones*, 81, 27-32.

Tavare, N.S., Garside, J. y Akoglu, K., 1985, "Multiplicity in Continuous MSMR Crystallizers. Part II: Temperature Multiplicity in a Cooling Crystallizer". *AIChE J.*, 31, 7, 1128-1135.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Dirección de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de la USACH y al Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico de Chile por el apoyo financiero prestado a este trabajo.

ABSTRACT

The objective of this work was to analyse the equations of transient energy balances in order to implement a simulation program for the dynamics of a SMRPM cooling crystallizer. The equations were solved simultaneously with the equations of mass balances for the solute and for the whole system. The study was applied to the crystallization of $\text{KNO}_3 - \text{H}_2\text{O}$.



SIMULAÇÃO DA RECUPERAÇÃO DA ENERGIA ARMazenADA EM UM TERMOACUMULADOR COM MUDANÇA DE FASE



Carlos Eduardo Leme Nóbrega
 Sergio Leal Braga
 Departamento de Engenharia Mecânica
 Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
 Rua Marquês de São Vicente, 225, 22453-900- Rio de Janeiro

RESUMO

A recuperação de energia armazenada sob forma de calor latente em um termoacumulador é analisada através de um modelo de transporte unidimensional. Um modelo teórico é desenvolvido, o qual visa avaliar o impacto de alguns parâmetros geométricos, tais como diâmetro e número de cápsulas, além de parâmetros térmicos, tais como volume de material de mudança de fase e vazão do fluido de transporte, na recuperação de energia.

INTRODUÇÃO

O armazenamento de energia via mudança de fase é considerado, devido à alta capacidade de retenção oferecida pelo calor latente. o processo escolhido é o de transferência alternada exterior, no qual o escoamento se dá ao redor do material de mudança de fase (MMF). Este se encontra encapsulado sob a forma cilíndrica ou esférica (Fig.1). São analisadas as influências da geometria das cápsulas (esferas ou dutos cilíndricos), do volume de MMF e da disposição dos encapsulantes dentro do acumulador (espaçamento entre os cilindros, arranjo randômico para as esferas). Os resultados são expressos pela evolução da temperatura de saída do fluido de transporte com o tempo, $T_{out}(t)$. Ismail & Nebra (1978) desenvolveram um modelo experimental para um acumulador cilíndrico no qual o MMF está contido no centro e o escoamento se dá na região anular. Alexiades & Solomon (1993) apresentam uma solução analítica para o nosso problema, limitada no entanto à baixos valores do número de Biot.

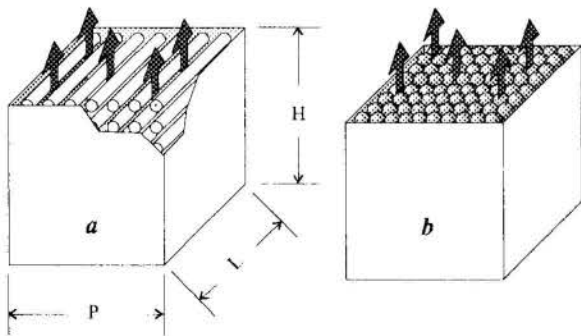


Figura 1 - Visão Esquemática dos Termo-Acumuladores

- O tanque está, inicialmente, a uma temperatura uniforme.
- Todas as paredes são adiabáticas.
- Todas as paredes verticais são impermeáveis.
- A energia armazenada no material encapsulante é desprezível diante da energia armazenada no MMF.
- Não há convecção natural precedendo a mudança de fase. A temperatura do líquido varia segundo o modelo de capacitância térmica.
- A resistência térmica oferecida pelo MMF solidificado aumenta com o avanço da frente de solidificação. Esta se forma uniformemente a partir da superfície interna do encapsulante.
- A solidificação ocorre segundo o modelo quase-estacionário.
- O escoamento é unidimensional.
- A transferência de calor do MMF para a água é substituída por gerações "concentradas", uniformemente distribuídas nos volumes de controle nos quais encontram-se os centros dos encapsulantes.

A penúltima hipótese é tão melhor quanto maiores forem a altura (H) do acumulador (em relação às outras dimensões) e a perda de carga através do mesmo. Assim sendo, o fenômeno passa a ser descrito por

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \right) = K_{H_2O} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \dot{S} \quad (1)$$

onde \dot{S} é dada em w/m^3 . Esta equação é integrada em um volume finito (Patankar, 1980), com auxílio do esquema explícito para tratar o termo transiente e do esquema upwind para tratar o termo convectivo. O resultado da discretização, para um ponto nodal interior ao domínio, é expresso por:

Formulação:

A) Banco de Cilindros Transversal ao Escoamento

Algumas hipóteses são necessárias para a tornar viável a simulação:

- O tanque é representado por um volume de controle, em regime transiente, com uma entrada e uma saída.

$$\rho C_p \frac{\Delta x}{\Delta t} (T_p - T_p^0) - \rho u C_p (T_p - T_w) = \quad (2)$$

$$\frac{K_{h20}}{\Delta x} (T_E - T_p) + \frac{K_{h20}}{\Delta x} (T_p - T_w) - \dot{S} \Delta x$$

onde W e E referem-se aos pontos à esquerda e à direita do ponto p, respectivamente. As condições de contorno são temperatura prescrita, no ponto 1, e parede adiabática no ponto N. A matriz resultante (tridiagonal) é resolvida usando-se o algoritmo de Thomas (TDMA), desde que os valores escolhidos para Δx e Δt satisfaçam o critério de estabilidade expresso por:

$$\Delta t < \frac{\rho C_p (\Delta x)^2}{2 K_{h20}} \quad (3)$$

onde ρ , C_p e K são as propriedades termofísicas do fluido de transporte (água, no nosso caso). A figura (2) ajuda a descrever a compatibilização entre o fenômeno físico e o modelo matemático. A região correspondente à altura do banco (H) tem área transversal A no plano real e \bar{A} no plano numérico, definida por:

$$\bar{A} = \frac{VT - NT \pi D_{ext}^2 / 4}{H} \quad (4)$$

onde:

- VT : Volume do tanque armazenador
- NT : Numero de tubos
- D_{ext} : Diâmetro externo dos tubos
- H: Altura do banco de tubos

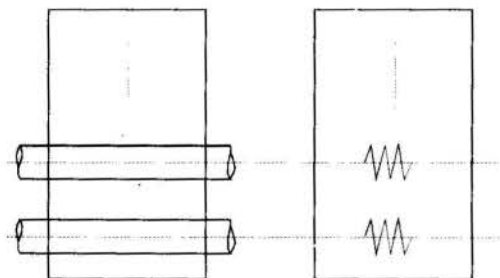


Figura 2 - Comparação entre os Planos Real e Numérico

Caso o ponto nodal seja coincidente com o centro de um tubo,

$$\dot{S} \Delta x = NTPF \frac{(T_{mmf}(i) - T(i))}{R_t} \frac{1}{\bar{A}} \quad (5)$$

onde:

- NTPF: número de tubos por fileira
- T_{mmf} : temperatura do MMF em um dado ponto
- $T(i)$: temperatura da água no mesmo ponto
- R_t : resistência térmica à transferência de calor do MMF para a água

Esta resistência é definida por:

$$R_t = \frac{Ln\left(\frac{R_{ext}}{R_{int}}\right)}{2 \pi K_t L} + \frac{Ln\left(\frac{R_{int}}{R_{mmf}}\right)}{2 \pi K_{mmf} L} + \frac{1}{h_e A_e} \quad (6)$$

onde:

- h_e : Coeficiente de troca de calor por convecção externo.
- A_e : área superficial externa.
- R_{ext} : Raio externo dos tubos.
- R_{int} : Raio interno dos tubos.
- R_{mmf} : Raio da frente de solidificação.
- K_t : condutividade térmica do tubo.
- K_{mmf} : condutividade térmica do MMF.
- L: comprimento dos tubos.

O valor de h_e é função exclusiva do fluido de transporte, da taxa de ocupação do tanque e da vazão imposta, e foi calculado segundo a equação (7), proposta por Zukauskas (Kakac et al., 1987).

$$\bar{Nu} = C_0 Re^{c_1} Pr^{c_2} \left(\frac{Pr}{Pr_w}\right)^{0.25} \quad (7)$$

onde C_1 e C_2 são constantes que dependem de Re. C_0 é uma constante entre 0 e 1 para $Re < 10^3$ e número de fileiras (NF) < 16. Para quaisquer outras condições, $C_0 = 1$. O valor de Re é baseado na velocidade máxima U_{max} , que ocorre na seção transversal de menor área.

RESULTADOS E COMENTÁRIOS

O processo de descarga, no qual a energia é extraída do armazenador, foi simulado para diversas configurações. O MMF escolhido foi o trissulfato de sódio penta-hidratado, por causa de seus altos valores do ponto de fusão ($= 49^\circ C$), do calor latente ($338 \times 10^6 J/m^3$) e da disponibilidade de suas propriedades termofísicas (Rohsenow et al., 1985). Como os resultados têm um objetivo meramente comparativo, alguns parâmetros foram mantidos constantes em todas as simulações. São eles $H = L = P = 1 m$. Para todos os casos optou-se por uma temperatura inicial $T_{ini} = 55^\circ C$ enquanto a temperatura de entrada foi fixada próxima à ambiente, $T_{in} = 25^\circ C$. É importante observar que a taxa de ocupação máxima (quando os tubos estarão se encostando) é de 78,5%, devendo o volume de MMF em cada simulação respeitar este valor. O programa verifica se o volume de MMF (VMMF), o número de tubos por fileira (NTPF) e o número de fileiras (NF) são compatíveis com as dimensões da acumulador. O tempo de esvaziamento (TE) do acumulador é definido como sendo o tempo necessário para que a temperatura de saída atinja $25,1^\circ C$. Este tempo é diretamente proporcional ao volume de MMF e à resistência térmica, e inversamente proporcional à área total de troca, definida por:

$$A_t = \pi D_e L NT \quad (8)$$

Influência do Volume de MMF. O objetivo é avaliar o impacto causado pelo aumento do volume de MMF (VMMF), mantendo-se constantes NT e o arranjo (NF e NTPF). Observando que um aumento de VMMF implica em um aumento de De, tudo mais permanecendo constante, a resistência térmica diminui. Observando a equação (8) conclui-

mos que A_t aumenta com VMMF. Então, se o aumento de VMMF pressiona o tempo de esvaziamento para cima - dada a maior quantidade de energia estocada - a área total de troca e a resistência térmica o pressionam para baixo. O resultado deste confronto é mostrado na figura 3, ao qual a tabela 1 se

refere. Nos três casos, $v = 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$, $NF = 100$, $NTPF = 100$. Para todos os casos que se seguem (a não ser quando disposto em contrário) usaremos tubos de cobre com 10^{-4} m de espessura.

Tabela 1: Influência do Volume do Material de Mudança de Fase

Caso	VMMF (m ³)	Re	h (w/m ² C)	Rt (C/W)	At (m ²)	De (m)
Caso 1	0.2	17	618	0.73	157	0.005
Caso 2	0.4	42	637	0.514	220	0.007
Caso 3	0.6	128	769	0.41	283	0.009

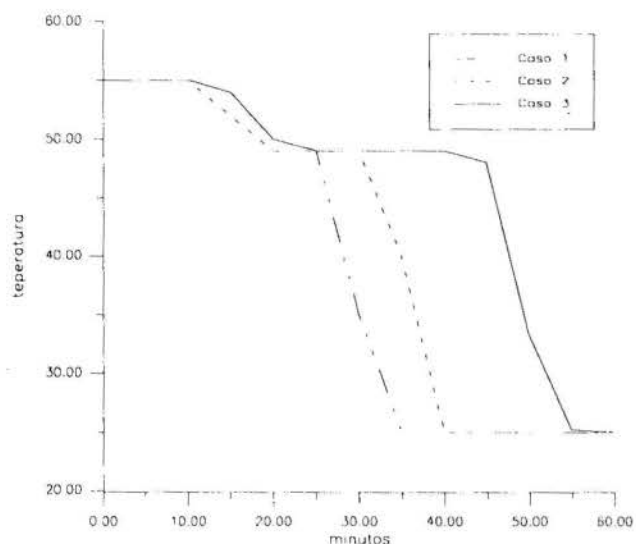


Figura 3: Influência do Volume do Material de Mudança de Fase

Pelos dados tabelados e os resultados apresentados na figura 3, pode-se concluir:

1) O valor da integral sob as curvas aumenta com VMMF. Isto é natural, porque esta integral é proporcional à quantidade de energia estocada.

2) O patamar de "temperatura inicial" tem menor duração à medida em que VMMF aumenta. Isto ocorre porque a velocidade média do fluido, a uma vazão fixa, que é exatamente o caso, aumenta com VMMF, como consequência do decréscimo da área de escoamento.

3) O patamar de "regime permanente", que ocorre durante a mudança de fase, é tão mais duradouro quanto maior for VMMF. Isto ocorre porque a quantidade de energia a ser extraída (calor latente) é tão maior quanto for o VMMF. A potência instantaneamente extraída também aumenta, mas não na mesma proporção.

4) Este mesmo patamar é tão mais elevado quanto maior for VMMF. Isto ocorre porque, conforme comentário anterior, A_t aumenta e R_t diminui com este parâmetro.

Mesmo antes de conceber este gráfico, a idéia de que o tempo de esvaziamento cresceria com VMMF era bastante intuitiva. A afirmativa (3) listada acima parece servir de contraponto à esta intuição. Devemos perceber, no entanto, que a diminuição da resistência externa causada pelo aumento de VMMF tem cada vez menos impacto sobre a resistência total R_t (A resistência oferecida pelo MMF, por ser muito maior, domina o fenômeno). Talvez para um escoamento no qual $R_{in} \cong R_{ext}$, em torno de um MMF de baixos valores de calor latente e densidade, o tempo de esvaziamento possa diminuir com o aumento de VMMF. Este caso, entretanto, seria de pouco ou nenhum interesse prático.

- Influência do número de tubos:

a) Aumento simultâneo de NF e NTPF:

Percebemos que um aumento em NT (com $NF = NTPF$) causa um aumento na resistência térmica, porque D_{ext} diminui. Por outro lado, segundo a eq. (8), um aumento em NT propicia uma maior área de troca total. O resultado deste confronto é apresentado na figura 4, a qual os dados da tabela (2) se referem. Nos três casos, $v = 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ e $VMMF = 0.6 \text{ m}^3$.

Tabela 2 - Influência do Número de Tubos (variação simultânea)

Caso	NF	NTPF	h(w/m ² c)	Rt(w/c)	Re	At(m ²)
caso 4	20	20	323,5	0,095	546,6	55,3
caso 5	50	50	522,8	0,21	231,8	141,4
caso 6	100	100	769	0,41	128,1	282,7

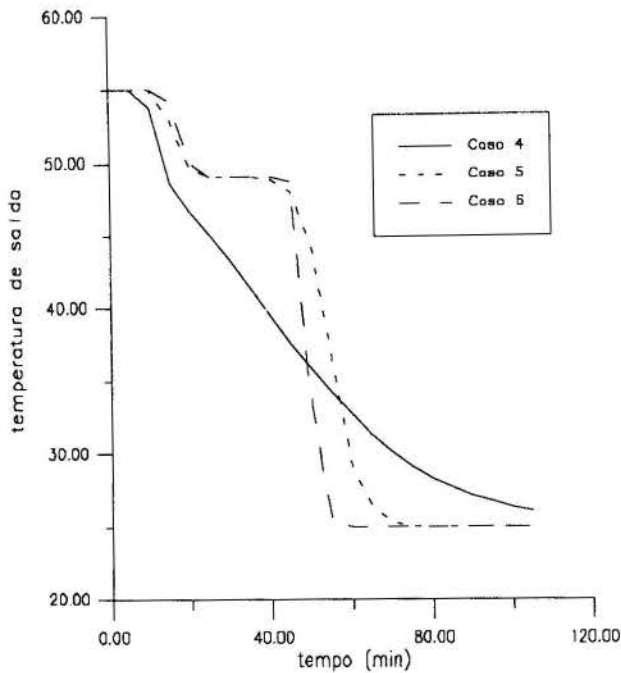


Figura 4 - A Influência do Número de Tubos

Mais uma vez, dos valores tabelados e dos resultados apresentados na figura 4, obtêm-se as seguintes constatações :

- 1) O patamar de "temperatura inicial" tem a mesma duração para os três casos. Isto é razoável, visto que VMMF não variou. Pelo mesmo motivo a integral sob cada uma das três curvas tem praticamente o mesmo valor, a menos da diferença provocada pelo aumento no volume de encapsulante.
- 2) O aumento da área total de troca em detrimento da condutância térmica mostrou-se extremamente benéfico para a extração de calor, reduzindo sensivelmente o tempo de recuperação do calor armazenado.

- 3) O patamar de "regime permanente" é tão mais duradouro quanto menor for a área total de troca A_t .
- 4) Quanto maior for o diâmetro da cápsula maior será o tempo de solidificação completa.

Observação. O aumento da troca de calor com o aumento de NT é um reflexo do maior impacto do número de fontes frente ao aumento de R_t . Do ponto de vista do cilindro, uma redução no tempo de esvaziamento após a resistência térmica ter sido aumentada só será possível se o volume de MMF em cada cápsula diminuir. Assim sendo, existe um parâmetro que é uma medida da razão entre o fluxo de calor e a energia armazenada em cada cápsula. O comprimento característico C_L é definido por:

$$C_L = \text{volume da cápsula} / \text{área externa da cápsula}$$

Este parâmetro é o mais significativo para analisarmos o tempo de esvaziamento. A tabela mostra que a performance do acumulador é tão melhor quanto menor for o valor de C_L .

B) Outras comparações:

Para os próximos casos são mantidos constantes o VMMF igual a 0.2 m^3 e a vazão, igual a 0.3 l/s . Percebe-se que um aumento do NF à NTPF constante tende a causar um aumento da resistência térmica (através da redução de D_e). Ao mesmo tempo, A_t aumenta. O resultado deste confronto é mostrado na Figura (5), quando comparamos as curvas (8) e (9). Novamente um aumento de A_t em detrimento da condutância se mostrou benéfico para a transferência de calor, conforme evidenciam os valores de C_L . Por outro lado, quando o aumento do número de tubos NT se dá via aumento de NTPF, o aumento em R_t é minorado (por causa do maior "estrangulamento" do escoamento) tornando esta opção melhor que a anterior. Isto pode ser constatado comparando-se a curvas (7) e (9) na Figura (5). Observe que do caso (7) para o caso (9) o aumento de R_t foi de 38%, ao passo que do caso (8) para o caso (9) foi de 70%. Finalmente, o arranjo horizontal dos tubos (8) se mostrou mais solícito na recuperação de calor do que o arranjo vertical (7). Este efeito ocorre inclusive para $Re < 10^3$ e $NF < 16$, quando a constante C_o começa a ser aplicada.

Tabela 3: Aumento de NT à NF ou NTPF Constante.

Caso	NTPF	NF	Re	$h(w/m^2c)$	$R_t(w/c)$	$A_t(m^2)$	$D_e(m)$	$CL(m)$
Caso 7	15	40	14	144	0.26	39.6	0.021	0.0053
Caso 8	40	15	56	254	0.21	39.6	0.021	0.0053
Caso 9	40	40	20	221	0.36	65.3	0.013	0.0033

Tabela 4 - A Influência do Diâmetro das Esferas

CASO	Dext	Nesf	$R_t(w/c)$	$A_t(m^2)$	$h(w/m^2c)$	$CL(m)$
CASO10	10	1218132	43,0	382,5	302	0,0016
CASO11	20	147698	11,4	185,0	245	0,0033
CASO12	50	9283	2,0	72,9	186	0,0083

Observação. os baixos valores de Re na tabela acima se devem ao fato de que para altos valores de Re a troca de calor é dominada pela resistência interna R_i , tornando a melhora em R_t imperceptível.

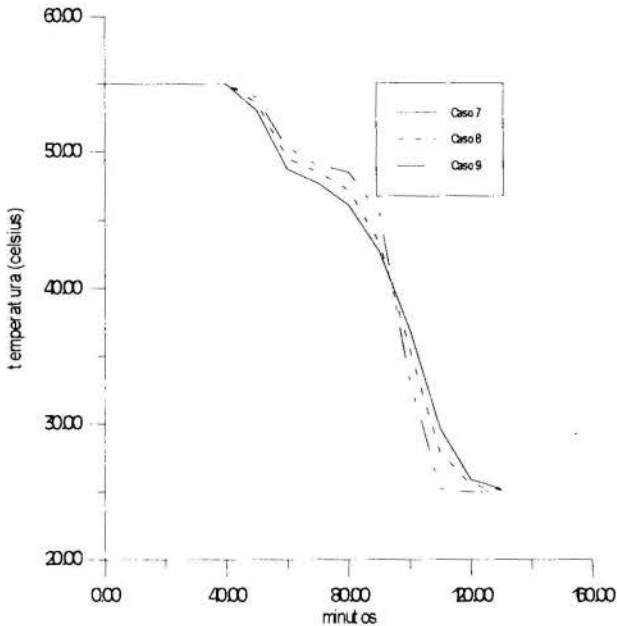


Figura 5: Aumento de NF via Aumento de NTPF ou NF ... Arranjos

Resultados similares aos apresentados para os tubos foram também obtidos para o encapsulante esférico. Neste caso todos os pontos têm geração de calor sendo

$$A = \frac{V_t - N_{esf} \pi \left(\frac{D_{ext}^3}{6} \right)}{H} \quad (9)$$

$$R_t = \frac{R_i - R_{mmf}}{4\pi K_{mmf} R_i R_{mmf}} + \frac{R_{ext} - R_{int}}{4\pi K_t R_{ext} R_{int}} + \frac{1}{h_c A_e} \quad (10)$$

O parâmetro investigado foi o diâmetro das esferas. A Figura 6, a qual a tabela 4 se refere, mostra como o calor é retirado de esferas com diâmetros de 10, 20 e 50 mm. Novamente a vazão é de 1 l/s e $V_{MMF} = 0.6 \text{ m}^3$. A espessura do material encapsulante de cada esfera é de 0.1 mm e o arranjo é randômico. Novamente o aumento do número de fontes em detrimento do fluxo em cada fonte se mostrou benéfico para a transferência de calor. O tempo de recuperação do calor armazenado diminui com $C_t A$. A área sob as três curvas tem o mesmo valor, dado o mesmo volume de MMF nos três casos. Mais uma vez, quanto maior for o diâmetro da cápsula mais elevado será o patamar de "regime permanente" promovido durante a recuperação de calor, por causa da menor resistência térmica oferecida em cada cápsula.

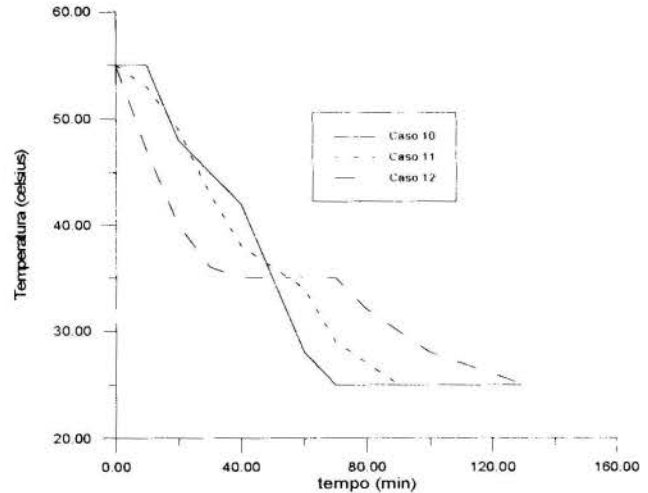


Figura 6 - A influência do diâmetro das esferas

CONCLUSÃO

Em todos os casos o aumento da área total de troca em detrimento da condutância em cada cápsula se mostrou benéfico para a transferência de calor. A recuperação da energia armazenada depende fortemente do tamanho das cápsulas e da quantidade de MMF estocada. A escolha entre os tipos de encapsulantes deve levar em conta custos de fabricação e operação (bombeamento do fluido de transporte), pois do ponto de vista térmico podemos manipular as variáveis de modo a obter resultados semelhantes em ambos os casos. Os resultados se mostraram qualitativamente semelhantes ao obtido por Ismail & Nebra, mas as diferenças na geometria impedem uma comparação quantitativa. A Figura (7) mostra uma comparação entre o modelo analítico de Alexiades & Solomon e o programa, tendo como base o caso 9. Percebemos que a temperatura de saída cai mais rapidamente no modelo analítico do que no programa. Isto era esperado, visto que este modelo assume que a superfície externa do encapsulante encontra-se à temperatura de mudança de fase.

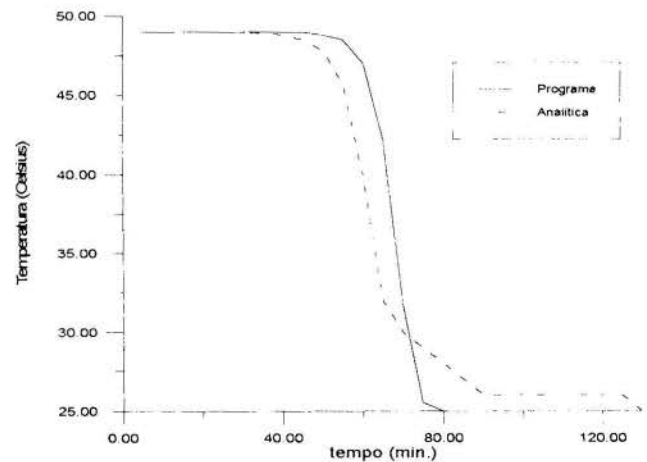


Figura 7 : Modelo analítico X numérico

REFERÊNCIAS

Alexiades, V. e Solomon, A.D. Mathematical modeling of melting and freezing processes Editora hpc 1994.

Bejan, A., "Convective Heat Transfer", Editora Wiley, New York, 1994.

Braga, S.L., "Recuperação da Energia Armazenada sob a forma de Calor Latente", XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Vol. II, PP.713-716, Brasília, DF, 1993.

Ismail, K.A.R. e Nebra, S.A. Armazenador de Calor Latente, Anais do 1º Congresso Brasileiro de Energia 1978

Patankar, S.V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Editora HPC, 1980.

Rosenhow, W.M., Hartnett, J.P. e Ganic, E.N., "Handbook of Heat Transfer applications", Editora Mc Graw Hill, 2 Edição, 1985.

ABSTRACT

The heat recovery from encapsulated phase change material (PCM) is investigated. An one dimensional mathematical model is developed in order to evaluate the influence in the heat recovery of geometric parameters, such as diameter and number of capsules, and thermic parameters, such as volume of PCM and mass flow rate of the fluid through the encapsulated material.



OPTIMIZACIÓN DE LA CALIDAD DE LAS PIEZAS OBTENIDAS EN MOLDES CERAMICOS POROSOS MEDIANTE EL CONTROL DEL ENFRIAMIENTO DURANTE LA SOLIDIFICACION

Pablo G. Varela, Osvaldo Oviedo, Nelson Cotella, Omar Radevich, Rodolfo Kohl

Facultad de Ingeniería
Universidad Nacional de Río Cuarto
5800 Río Cuarto (Cba.) - Argentina



RESUMEN

La determinación del tiempo de solidificación de piezas obtenidas por fundición ha sido objeto de múltiples investigaciones, ya que la calidad metalúrgica de la pieza final obtenida depende de la velocidad de enfriamiento. Este trabajo aborda la optimización de los procedimientos utilizados en microfundición, mediante la realización de coladas instrumentadas con numerosas termocuplas y la simulación computacional de las transferencias térmicas existentes. Se concluirá en la conveniencia de efectuar simulaciones computacionales, ya que ello permite aislar e identificar cada una de las variables que inciden en la calidad metalúrgica.

INTRODUCCION

El desarrollo de modernas técnicas de fundición de precisión ha conducido a la producción de piezas con propiedades no soñadas hace una generación. Ello se debe a que los fundidores se han encaminado a encontrar métodos crecientemente avanzados de elaboración.

A pesar de ello, la producción de piezas finas continúa planteando problemas que el fundidor no puede resolver siempre con su conocimiento práctico. Para obtener una pieza libre de defectos, se hace sumamente necesario el control de la solidificación, debiendo, por lo tanto, conocer las transferencias térmicas que rigen el sistema metal/molde durante la solidificación. Tal estudio fué realizado por Biloni (1977) y Reddy et al (1993) para moldes de arena, y por Huang et al (1990) para moldes cáscara.

Como la forma de la pieza y la naturaleza de la aleación son generalmente impuestas, el fundidor solamente puede modificar el sistema de ataque y el mazarotado de la pieza, las propiedades térmicas del molde, y el modo de llenado del mismo.

Dada la complejidad de los fenómenos que se ponen en juego en microfundición, las formas y dimensiones de los componentes y la composición de la aleación, el antiguo método de ensayo y error para seleccionar varios parámetros del proceso, resulta excesivamente lento y costoso. En efecto, los estudios estadísticos efectuados a posteriori sobre la solidificación no son suficientes para conseguir la optimización del procedimiento.

Sumado a lo anteriormente expuesto, cabe agregar que en moldes aglutinados con silicato de sodio, al ser una tecnología de reciente desarrollo (Kohl et al, 1993), no existen referencias de otros autores que hayan trabajado en el tema.

Para alcanzar el objetivo de este estudio, nos proponemos un método de análisis científico basado en la realización de coladas instrumentadas y la simulación de transferencias térmicas que controlan el procedimiento. Similares coladas instrumentadas fueron realizadas por Hamar (1986) para moldes convencionales de microfundición. Con este trabajo se demuestra, que a pesar de las complejidades existentes, es posible efectuar simulaciones computacionales para determinar la influencia real de los distintos parámetros de la colada, que afectarán la calidad final de la pieza a obtener.

Para una buena simulación numérica de la solidificación es menester conocer las modalidades de transferencia térmica en las distintas partes del sistema metal-molde, las cuales se describen en

forma detallada a continuación.

Aspectos relacionados con la transferencia de calor. La fig. 1 muestra un molde de microfundición con todos los elementos típicos. La cavidad representa la forma que tendrá el producto final. Los accesorios a la izquierda de la cavidad permiten el flujo del metal fundido dentro de la misma. Para el propósito de esta discusión, el proceso de confección de la cáscara cerámica, no es realmente importante. Es suficiente notar que el metal fundido es vertido dentro del embudo, y fluye a través del canal de llenado, y el canal de alimentación, antes de llenar la cavidad. Todo el ensamblado está generalmente precalentado antes de vertir el metal.

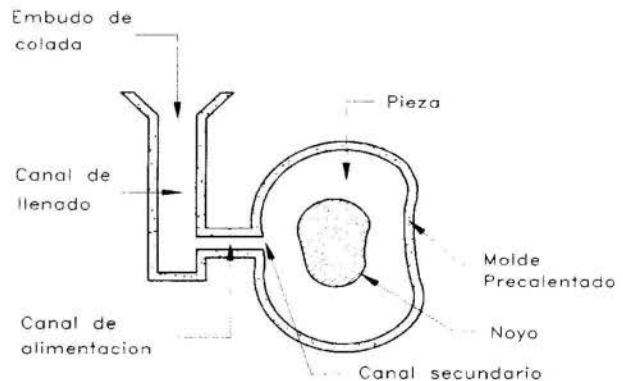


Fig. 1: Molde típico de microfundición

En este tipo de moldes, los mecanismos de transferencia calórica son los siguientes: Dentro del metal, el flujo de calor es por conducción y convección; además, existe liberación de calor latente mientras el metal colado solidifica. Dentro del molde cerámico, el flujo de calor es por conducción. A través de la interfase metal/molde, la transferencia de calor es vía una combinación de conducción, convección y radiación. Finalmente, el flujo de calor en la superficie exterior del molde cerámico es fundamentalmente por radiación. La fig. 2 muestra con mayor detalle lo expuesto.

En realidad, el llenado del molde y la solidificación del metal vertido ocurren simultáneamente. En moldes de pared delgada, especialmente si el sobrecalentamiento es bajo, el efecto de solidificación temprana puede ser significativo. Entonces se debe repre-

sentar conjuntamente: flujo fluido, solidificación y transmisión de calor. Sin embargo, tal modelización es bastante difícil de tratar conjuntamente. Una alternativa más manejable en realizar el análisis en dos etapas: (a) Unir flujo fluido y transferencia de calor en la cavidad mientras reemplazamos el molde con una apropiada condición de borde, y (b) conducción en la cavidad completamente llenada (pero sin flujo fluido), conducción en el molde y radiación y convección en la superficie del molde. Este último caso es el que se abordará en el presente trabajo.

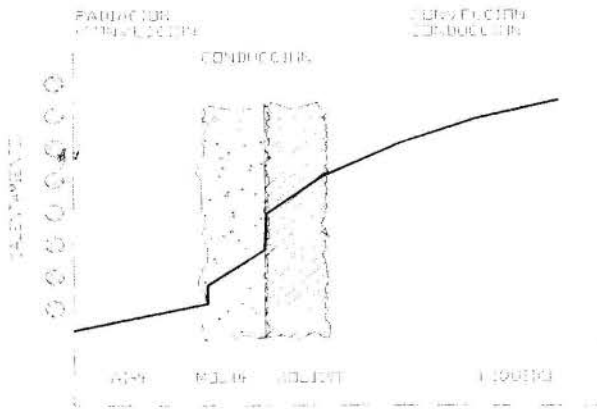


Fig. 2: Modos de transferencia calórica en el sistema metal-molde

La precisa determinación del comportamiento térmico del molde es de suma importancia, por cuanto, las propiedades del molde controlan la velocidad de enfriamiento de piezas de fundición de precisión, y por lo tanto, aquellas propiedades que dependen de la velocidad de enfriamiento del metal. Estas incluyen no sólo la nucleación y el crecimiento del metal sólido desde el líquido, sino además la velocidad de reacciones de estado sólido (tales como transformación eutéctico en aceros y fundiciones de hierro) y el establecimiento de tensiones residuales que controlan distorsión de partes.

Debido a lo expuesto se destaca la importancia de la investigación de los problemas de transferencia calórica en los moldes cáscaras en detalle, y de desarrollar métodos de tratamiento con ellos.

El interés específico es el tratamiento del comportamiento térmico de la cáscara cerámica, es decir su habilidad para transferir el calor aportado por la solidificación de la pieza, hacia la superficie exterior del molde, donde el mismo puede ser removido por convección o radiación hacia el medio circundante.

El problema de los moldes cáscaras. El tratamiento del material de molde en cáscaras cerámicas de fundición de precisión es un problema particular. A diferencia de los métodos de moldeo en arena y fundición en coquilla, el molde no puede ser considerado como un sólido homogéneo semi-infinito. El mismo es de espesor finito (usualmente pequeño comparado con moldes de arena), con una estructura variante, y propiedades cambiantes.

Estructura de cáscaras cerámicas. Si un molde cáscara es seccionado, se ve inmediatamente que su estructura está formada por capas, lo cual es consecuencia del método de construcción del molde. Las capas primera y segunda con sus respectivos respaldos de arena se destacan claramente. Detrás de estas capas hay usualmente una porción de apoyo "concreto" del molde, que comprende 80 % o más del espesor de la cáscara.

La existencia de capas no es sorprendente, ya que cada una de ellas tiene diferentes propósitos. La primera inmersión es seleccionada para dar una fina terminación superficial. Por lo tanto, los constituyentes de la misma son seleccionados para ser quími-

camente inertes con el metal. El respaldo "concreto" debe proveer resistencia mecánica para el molde durante el vertido y la solidificación. Por lo tanto esta parte del molde tiene el espesor requerido para las propiedades mecánicas necesarias para su función.

Lo que hace el problema interesante -y complicado- es que cada capa contiene diferentes constituyentes. Cada una de ellas, por consiguiente, tiene diferentes propiedades térmicas.

Los moldes objeto de este estudio, cuya tecnología fuera desarrollada por Kohl et al. (1993), y que se base fundamentalmente en la utilización del silicato de sodio como aglomerante, tienen las siguientes características: la primera capa contiene una harina refractaria (en este caso la harina es de circonio, pero puede ser alúmina o sílice fundida). Detrás de ella, está una capa de arena de circonio fina; nuevamente la arena puede diferir dependiendo del metal a ser vertido en el molde. Sigue otra inmersión que en este caso es virtualmente idéntica a la anterior, y ella también está respaldada con arena.

Los siguientes baños siguen los mismos principios, pero utilizan partículas refractarias groseras en ambos: el baño y la arena. Pueden utilizarse arenas con distintas granulometrías con relación a las capas anteriores, lo cual conduce a diferentes proporciones entre arena y ligante, y por lo tanto, a conductividades térmicas distintas. Los refractarios utilizados son además diferentes, y las partículas son groseras, en cuanto a su tamaño.

Existe, desafortunadamente, otra complicación: el molde es poroso; esto es, que hay vacíos en la estructura. Por lo tanto, el molde es permeable, lo cual implica que un porcentaje menor de los vacíos están conectados. Es importante notar que no todos los vacíos están conectados a la superficie del molde; algunos están enteramente aislados. Los vacíos no son de tamaño uniforme, ni forma, ni están ellos necesariamente orientados de la misma manera. Mientras las grandes cavidades están presentes en la porción de respaldo del molde, vacíos pequeños pueden existir en todo el molde. El molde, lejos de ser a un simple material estructural, es en realidad bastante complejo.

Debido a lo expuesto, el tratamiento de los moldes tipo cáscara cerámica, es un problema particular. De este modo, el tratamiento preciso del molde en una modelización matemática, y la utilización con significativa exactitud de propiedades térmicas del mismo, tiene que ser realizada con sumo cuidado.

SIMULACION DE LA SOLIDIFICACION

Hasta el presente los cálculos de transferencia térmica eran efectuados con la ayuda de fórmulas analíticas adaptadas a situaciones clásicas para piezas de forma simple. Las computadoras han permitido el desarrollo de métodos de cálculo numérico vectorial, en particular los métodos de cálculo en diferencias finitas o en elementos finitos.

La simulación computacional de la solidificación necesita software capaz y condiciones de borde muy precisas para acercarse correctamente a la descripción numérica. Esto se debe a los numerosos procesos de transporte de calor citados anteriormente, en comparación con moldes de arena o coquilla.

Diversos investigadores estudiaron la simulación de la solidificación, utilizando el método de elementos finitos: Abis (1986), fundición de Aluminio; Kanetkar et al (1988), aleaciones eutécticas; y Jia-Chin Liu et al (1991), solidificación unidireccional de aleaciones monocristalinas. Otros investigadores hicieron incapié en las transferencias calóricas en diferentes interfaces: Prasanna Kumar et al (1991), y Fortin et al (1992).

En este trabajo, la simulación fue resuelta con el método de elementos finitos, utilizando el programa MSC/cal. Dicho programa permite la solución de problemas de Fourier en 3D reales y complejos con la definición flexible de bordes, condiciones inicia-

les, y propiedades termofísicas.

La simulación completa de un proceso de microfusión con moldes convencionales fue realizada por Sturm y Sahn (1988), Chandra (1990), y Rizzo et al (1993).

La pieza seleccionada para este estudio consistió en un cilindro esbelto, y el estudio fué realizado en la parte central del mismo. Debido a la esbeltez de la pieza, se considera que en la zona estudiada el mapa térmico posee simetría radial, y por lo tanto, que no existe gradiente de temperatura en el eje perpendicular a la misma.

A los fines de la simulación, el molde y su metal interior, son divididos en numerosos elementos de volumen que representan un sector de cilindro a causa de la simetría de este conjunto. Dichos elementos de volumen tienen contactos conductivos con sus vecinos, además los elementos exteriores intercambian también calor por conducción y radiación con la atmósfera convectiva que rodea el molde.

La interfase metal-molde se modelizó suponiendo una película o "gap" de aire, con un espesor determinado y una correspondiente resistencia térmica, la cual es variable con el tiempo.

En cuanto a las características térmicas del molde, y debido a las particularidades de los mismos, es decir: porosidad, y diferente composición para cada capa, fueron desarrolladas técnicas experimentales especiales para la determinación de las mismas. Dichas técnicas experimentales fueron desarrolladas en base a las investigaciones de Hendricks (1993), y consisten básicamente en establecer una analogía entre la permeabilidad (la cual existe debido a la interconexión de poros) y la transferencia de calor del molde en su conjunto. Tal analogía fue razonablemente comprobada mediante experimentos llevados a cabo con materiales cuyos parámetros eran conocidos. La descripción completa de estos procedimientos experimentales será motivo de una próxima publicación que se encuentra en elaboración. Con las experiencias realizadas se obtuvieron parámetros termofísicos de un sólido ordinario no-poroso, de iguales dimensiones que el considerado y cuyo comportamiento térmico es similar al del molde estudiado. Estos datos fueron introducidos en el programa considerado, para efectuar la simulación.

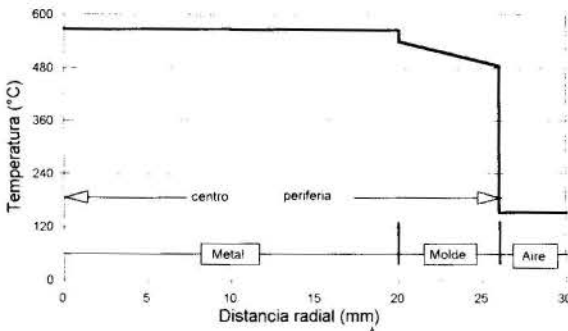


Fig. 3: Gráfica de la temperatura en función de la distancia radial a partir del centro del cilindro (simulación)

En la modelización, cada elemento debe contener un sólo tipo de material cuyas características térmicas evolucionan con la temperatura, (Calor específico, conductividad térmica). Para la aleación es necesario también conocer el valor del desprendimiento entálpico en función del avance de la solidificación.

La fig. 3 muestra la simulación efectuada, de la variación de la temperatura en función de la distancia radial a partir del centro del cilindro en la zona considerada, en un instante intermedio durante el proceso de la solidificación.

El cálculo requiere también la determinación del campo

térmico inicial del molde, que se realizó con la medición experimental con la ayuda de numerosas termocuplas. Tal medida podría haberse obtenido con la simulación del llenado del molde y los intercambios térmicos que le son propios, a partir del conocimiento experimental del modo del derrame de la aleación en el molde.

EXPERIMENTOS DE LABORATORIO

Para validar el modelo de simulación empleado aquí, se realizaron numerosos experimentos de laboratorio con moldes de piezas cilíndricas. Los mismos se construyeron con un espesor de 6 mm, aproximadamente, con barros refractarios de harina de circonio y silicato de sodio como aglomerante, una primera capa empleando como refractario arena de circonio y las siete capas posteriores con chamote silico aluminoso.

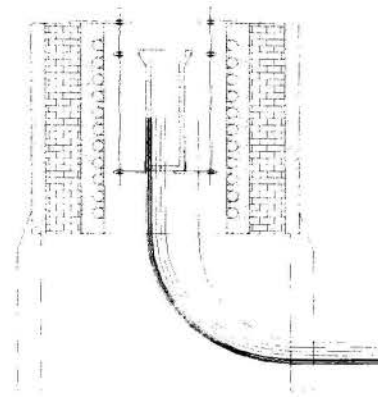


Fig. 4: Montaje del molde en el horno de precalentamiento

Se probaron diferentes tipos de aleaciones: aluminio puro y aleación SAE 322, y el vertido fué realizado en todos los casos con el molde precalentado a unos 350 °C.

La fig. 4 detalla la disposición del molde dentro del horno de precalentamiento. Se colocaron 4 termocuplas con vaina de acero inoxidable dentro del alojamiento para el metal en el centro del cilindro (se utilizó un largo adecuado para eliminar el efecto de los bordes y así tener transferencia de calor radial únicamente). En la misma altura del cilindro pero dentro del molde, se colocaron 4 termocuplas desnudas en diferentes capas. Se colocaron además 2 termocuplas externas al molde a fin de registrar la temperatura ambiente. Dichas termocuplas fueron protegidas con pantallas de radiación (no esquematizadas en las figuras) para minimizar el error que produciría la radiación. La fig. 5 muestra el sistema de medición utilizado.

Los datos experimentales obtenidos durante la solidificación fueron registrados con un sistema de adquisición de datos durante un tiempo de 20 minutos, tomándose 2 mediciones por segundo.



Fig. 5: Esquema del sistema de medición utilizado

Una vez efectuadas las coladas, se realizaron cortes en el metal y en el molde, a fin de registrar con la ayuda del microscopio, las posiciones exactas de las termocuplas, tanto dentro del metal como del molde. Dichos datos fueron utilizados para cotejar las curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente y aquellas de la simulación.

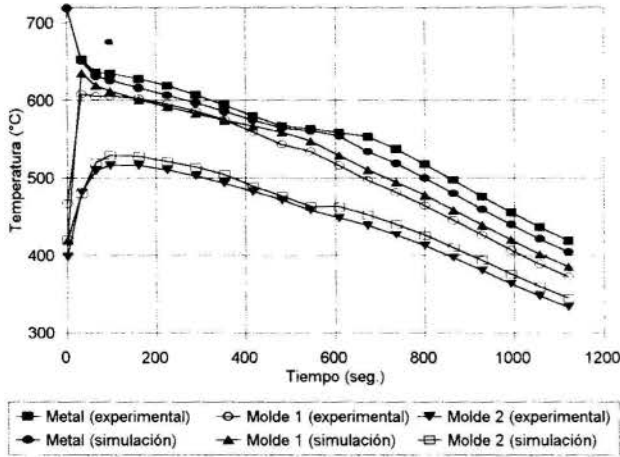


Fig. 6: Curvas obtenidas

La fig. 6 muestra la correlación entre las curvas obtenidas por medición y aquellas de la simulación numérica, en tres ubicaciones distintas: una en el centro del metal y dos en el seno del molde, una próxima al metal y otra cercana al borde del mismo.

CONCLUSIONES

El uso de un método computacional para obtener una buena descripción de la solidificación en una fundición de precisión, utilizando moldes aglomerados con silicato de sodio, ha sido probado por medio de un trabajo numérico-experimental en un sistema metal-molde. Dicho método puede predecir la conducta de un sistema tridimensional sujeto a un transitorio térmico que involucre cambio de fase.

Con el acuerdo logrado entre los resultados calculados y experimentales, se puede concluir que un uso generalizado de la computadora para resolver problemas de diseño, puede mejorar la calidad de la fundición como así también bajar los costos de producción.

La asociación de coladas experimentales instrumentadas y de simulaciones de transferencias térmicas presenta un gran interés para la optimización de los procedimientos de fundición. El estudio profundo de experiencias instrumentadas permite separar los efectos de variaciones múltiples difíciles de evitar en el momento de la colada. Esto es particularmente importante en campos donde piezas crecientemente complicadas son diseñadas especialmente para utilizarse en remplazo de estructuras multicomponentes.

Es evidente de este trabajo que la simulación del comportamiento térmico de cáscaras refractarias utilizadas en fundición de precisión es una tarea difícil. La complejidad de los materiales involucrados, comprendiendo en ello el hecho de poseer una estructura con capas de compuestos cerámicos porosos, presenta un problema desafiante para su análisis. Parte de los errores observados pueden ser atribuidos a dificultades de obtener valores precisos para las propiedades termofísicas, siendo este uno de los problemas más serios encontrados actualmente en el área de simulación de solidificación.

REFERENCIAS

- Biloni H., Transferencia Calórica en el Sistema Metal-Molde: Su influencia Sobre la Estructura y Propiedades de Metales y Aleaciones. *Ciencia Interamericana*: Septiembre, 3-13 (1977).
- Abis S., Numerical Simulation of Solidification in an Aluminum Casting. *Metallurgical Transactions B*: 17B, 209-216 (1986).
- Hamar R., Optimisation des Paramètres Hydrodynamiques et Thermiques en Fonderie de Précision. *Hommes et Fonderie*: Febrero, 13-17 (1986).
- Kanetkar C.S., Chen I.G., Stefanescu D.M. y El-Kaddah N., A Latent Heat Method for Macro-Micro Modeling of Eutectic Solidification. *Transactions ISIJ*: 28, 860-868 (1988).
- Sturm J.C. y Sahn P.R., Computer Simulation for the Solidification of Investment Casting Process. *Seventh World Conference on Investment Casting*, Munich, Alemania: Paper 13 (1988).
- Chandra U., Benchmark Problems and Testing of a Finite Element Code for Solidification in Investment Castings. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*: 30, 1301-1320 (1990).
- Huang H., Berry J.T., Zheng X.Z., Piwonka T.S., Thermal Conductivity of Investment Casting Ceramics. *Cast Metals*: 3 (1), 23-28 (1990).
- Jia-Chin Liu, Tsang-Sheau Lee, y Weng-Sing Hwang, Computer model of unidirectional solidification of single crystals of high temperature alloys. *Materials Science and Technology*: 7, 954-964 (1991).
- Prasanna Kumar T.S. y Narayan Prabhu K., Heat Flux Transients at the Casting Chill Interface during Solidification of Aluminum Base Alloys. *Metallurgical Transactions B*: 22B, 717-727 (1991).
- Fortin G., Louchez P., Samuel F.H., Factors Controlling Heat Transfer Coefficient at the Metal-Mold Interface During Solidification of Aluminum Alloys: An Analytical Study. *AFS Transactions*: 100, 863-871 (1992).
- Hendricks M.J., Thermal Conductivity and Heat Transfer Measurement for Ceramic Shell Molds. *41st Annual Technical Meeting of the Investment Casting Institute* (1993).
- Kohl R., Oviedo O., Cotella N., Varela P., Miskovski V., Radevich O., Construcción de Moldes para Fundición a la Cera Perdida Aglomerados con Silicato de Sodio. *Evaluación de Resultados: I Workshop Brasileiro de Fundição de Precisão*, Porto Alegre, Brasil, 40-43 (1993).
- Reddy G.S., Mascarenhas W.J., y Reddy J.N., Numerical Simulation of Solidification of Molten Aluminum Alloys in Cylindrical Molds. *Metallurgical Transactions B*: 24B, 677-684 (1993).
- Rizzo E.M., Melo M.L., Santos R.G., Análise Numérico/Experimental de un Processo de Fundição de Precisão. *I Workshop Brasileiro de Fundição de Precisão*, Porto Alegre, Brasil: 188-198 (1993).

ABSTRACT

The determination of the solidification time of pieces obtained by casting processes has been the subject matter of several research works, since the metallurgical quality of the final piece depends on the rate of cooling. This paper deals with the optimization of the procedures used in investment casting, by means castings with several thermocouples and the computational simulation of the thermal transferences existing during such castings. It was concluded that it is convenient to use mathematical models to perform computational simulations, since this allows separation and identification of each one of the variables which affect the metallurgical quality.



MÉTODOS EXPERIMENTAIS PARA IDENTIFICAÇÃO DE DETONAÇÃO EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

Alessandro B. de S Oliveira, Luiz Carlos D. Arboés, João Nildo de S. Vianna
Fernando J. R. Neves

Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade de Brasília
70910-900 - Brasília - DF - Brasil



RESUMO

O trabalho consiste na discussão de metodologias de ensaios para identificar o fenômeno conhecido como detonação em motores de combustão interna. Apresenta emprego de medição de pressão no interior da câmara de combustão e a medição de vibração causada no bloco do motor pela detonação. São discutidos os aspectos experimentais envolvendo cada uma das instrumentações propostas.

INTRODUÇÃO

Segundo Taylor (1976), nos motores de combustão interna, a elevação da pressão e da temperatura dos gases não queimados junto a parede da câmara de combustão, quando a reação é suficientemente rápida e há suficiente quantidade de mistura reagente, resulta na observação do fenômeno conhecido como detonação.

Este fenômeno gera ondas de choque, dentro da câmara de combustão, as quais são refletidas nas paredes dos cilindros resultando em surgimento de vibração do conjunto.

Neste trabalho é feita a identificação da frequência de vibração gerada pelo fenômeno de detonação nos cilindros de motores de combustão interna. São abordados aspectos referentes à calibração dinâmica de sensores de detonação comerciais, obtendo-se a curva de resposta em frequência para os sensores utilizados na instrumentação para medição de pressão. A identificação da frequência da vibração gerada pela detonação está baseada na conversão do sinal em tempo real, através da transformada rápida de Fourier, pelo analisador dinâmico de sinais.

Deste modo, é possível ter-se em tempo real o espectro de frequência do sinal adquirido. Tal sinal obtido no domínio do tempo é o utilizado por centrais de gerenciamento do sistema de ignição e alimentação dos motores modernos, tendo-se a identificação de detonação quando o sinal fornecido pelo sensor de detonação atinge uma amplitude pré-estabelecida.

O estudo baseado na análise do sinal de vibração no domínio do tempo, juntamente com um sinal de referência, apresenta a identificação da ocorrência de detonação separadamente por cilindro. O trabalho aborda também o estudo da influência da posição espacial dos sensores ao longo do bloco do motor, com a finalidade de determinar um ponto mais adequado para a a captação dos sinais. Foram ensaiados três motores de diferentes cilindradas.

METODOLOGIA

Na primeira parte do trabalho, os sensores de detonação utilizados usualmente pela indústria automobilística passaram por um processo de caracterização dinâmica de seu funcionamento. Desta forma foram estabelecidos seus comportamentos através das calibrações em frequência e amplitude.

A metodologia empregada para a calibração dos sensores foi a comparação direta, onde se utiliza um acelerômetro de referência em montagem "back to back".

As etapas subsequentes consistiram em três ensaios em motores de combustão interna, com o intuito de analisar o comportamento físico do fenômeno de detonação quando se tem regimes diferentes de funcionamento.

A indução do processo de detonação, para se obter dados sobre o fenômeno, pode ser realizada a partir de três metodologias distintas. Uma primeira forma é reduzir o número de octanas do combustível utilizado. Outra forma empregada para realização de ensaios em que se deseja controle sobre a detonação é utilizar um motor com taxa de compressão variável e a última consiste em modificar o ponto de ignição.

Na metodologia onde a tendência de detonação ocorrer em função da composição do combustível, o emprego desta técnica resulta em dificuldades para a realizar os ensaios, devido a troca periódica do combustível. Quanto ao emprego de um motor com taxa de compressão variável, facilitaria o controle sobre o experimento, contudo este tipo de motor não está disponível para utilização.

A metodologia utilizada para o levantamento dos dados neste trabalho, foi baseada na regulação do ponto de avanço da centelha de ignição. Neste método, com o avanço da centelha, o pico de pressão aumenta e simultaneamente há um decréscimo no período de compressão da mistura, medido desde o início da compressão. A tendência de ocorrência de detonação é resultado de um aumento da temperatura da mistura junto a parede do cilindro, em virtude do aumento de pressão. Este método tem como vantagem um melhor controle sobre a detonação e exposição do motor ao fenômeno por menor tempo, garantindo assim sua integridade.

De modo a obter dados comparativos foram estabelecidas três configurações distintas para um regime de funcionamento do motor. Regulou-se inicialmente o motor, de forma a alcançar o torque máximo à plena carga. A partir deste ponto obteve-se 80% da carga através do avanço e do atraso do ponto de ignição. Com o ponto de ignição avançado, pode-se observar que o pulso de pressão apresenta oscilações após a máxima pressão, o que comprova a ocorrência do fenômeno de detonação.

Foram utilizados dois motores com 1.0 litros e 1.3 litros de cilindrada, e um motor com 1.4 litros de cilindrada.

como mencionado, primeiramente realizou-se a caracterização dos sensores e selecionou-se a instrumentação necessária para a identificação do fenômeno.

CALIBRAÇÃO DOS SENSORES DE DETONAÇÃO

A calibração em frequência permite a obtenção da curva de resposta em frequência, determinando o perfil de comportamento dinâmico dos sensores. Enquanto que a calibração em amplitude permite obter a resposta em volts por unidade de aceleração dos sensores quando excitados em diferentes senóides fixas.

A calibração dos sensores usados para medição de vibrações consiste em determinar suas sensibilidades através da razão entre o sinal elétrico de saída pelo sinal mecânico de entrada (aceleração).

O sensor de detonação de sensibilidade desconhecida S1, é montado o mais próximo possível do acelerômetro de sensibilidade conhecida S2. As voltagens de saída V1 e V2 dos dois transdutores são medidas, e, através de transformada rápida de Fourier, analisadas e comparadas. Como $S1 = V1/[ms^{-2}]$ e $S2 = V2/[ms^{-2}]$, a sensibilidade S1 é dada por:

$$S1 = \frac{V1}{V2} \cdot S2 \tag{Eq. (1)}$$

Para a realização deste ensaio, utilizou-se o aparato experimental mostrado esquematicamente na figura 1:

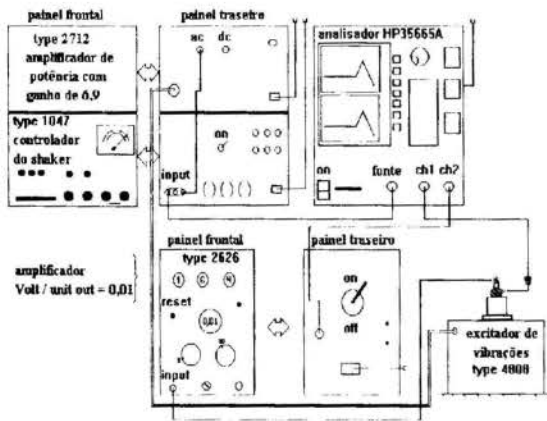


Figura 1 - Aparato experimental de calibração de sensores de detonação.

Os sensores foram instalados segundo os esquemas mostrados na figura 2 e 3. A necessidade da construção de dois aparatos deveu-se ao fato de se ter dois tipos diferentes de sensores das marcas Bosch e Magneti Marelli que serão identificados pelas siglas alcetóricas "sd" e "sb".

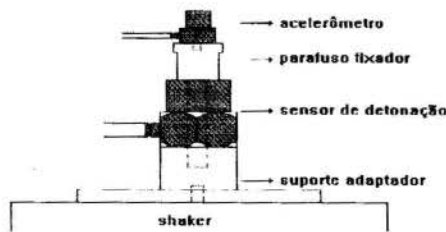


Figura 2 - Sistema de Fixação para Sensor BOSCH

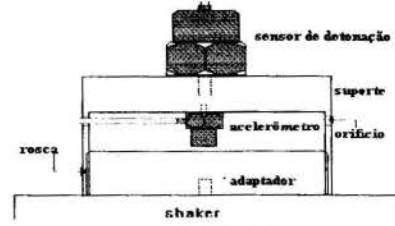


Figura 3 - Sistema de Fixação para Sensor Marelli.

A instrumentação usada na calibração consiste nos seguintes equipamentos:

- Acelerômetro de referência
- Excitador eletromagnético
- Amplificador de carga
- Controlador do shaker
- Amplificador de potência
- Analisador de sinais

RESULTADO DA CALIBRAÇÃO DOS SENSORES.

O ensaio de calibração foi executado para uma série de quatro sensores tipo "sb" (sb1, sb2, sb3 e sb4), e para dois sensores "sd" (sd1 e sd2). Nas curvas de resposta em frequência observou-se a região na qual o sensor responde às vibrações de forma 'linear'.

Na figura 4 tem-se a curva de resposta em frequência e a curva de fase do sensor sb3, e na tabela 1 tem-se a frequência de ressonância e a faixa de frequência linear de todos os sensores calibrados.

Taylor (1976) afirma que o fenômeno da detonação gera vibrações no bloco do motor numa frequência cerca de 7 KHz, frequência esta, dentro da faixa de resposta linear dos sensores calibrados. Nota-se também que os picos de ressonância máxima ocorrem cerca de 30 kHz para os sensores tipo "sb" e cerca de 13 kHz para os sensores do tipo "sd". Na curva de fase dos sensores pôde-se notar que as fases permanecem razoavelmente constantes nos respectivos intervalos considerados.

Em virtude da faixa de resposta linear apresentada pelo sensor tipo "sd", este sensor é caracterizado com ressonante, pois é utilizado na sua faixa de ressonância.

Para cada um dos sensores foi realizada a calibração em amplitude sujeitando-os a um conjunto de quatro senóides fixas (1,92kHz, 2kHz, 3kHz e 7kHz).

A tabela 2 mostra os resultados obtidos para a calibração em amplitude utilizando uma senóide fixa de 7kHz que se aproxima mais da frequência de vibração gerada pelo fenômeno da detonação, bem como o tratamento imposto até obter-se a sensibilidade dos sensores em mV/(m/s²).

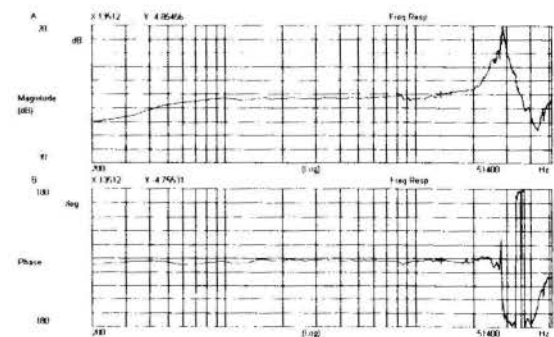


Figura 4 - Curvas de resposta em frequência do sensor de detonação sb3

Tabela 1 - Tabela de resultados da calibração em frequência.

	FAIXA DE FREQUÊNCIA LINEAR (kHz)	FREQUÊNCIA DE RESSONÂNCIA (kHz)
sb1	1,75 à 13,00	30,0
sb2	1,00 à 18,00	31,0
sb3	0,97 à 13,50	28,4
sb4	0,71 à 13,50	29,6
sd1	1,22 à 10,10	12,7
sd2	1,10 à 09,93	12,4

Tabela 2 - Tabela de resultados da calibração em amplitude

	Vrms	V(peak)	Sensib. [mV/g]	Sensib. mV/(m/s ²)
ACEL	0,16059420	0,22711450	4,23	0,4313685
sb1	0,03773168	0,05336066	23,065263	2,3521582
ACEL	0,15854557	0,22421730	4,23	0,4313685
sb2	0,03814878	0,05395053	23,621568	2,4088892
ACEL	0,15255785	0,21574939	4,23	0,4313685
sb3	0,03181823	0,04499777	20,474985	2,0880058
ACEL	0,16219864	0,22938352	4,23	0,4313685
sb4	0,04009551	0,05670361	24,267813	2,4747923
ACEL	0,12988417	0,18368396	4,23	0,4313685
sd1	0,02949825	0,04171683	22,295754	2,2736849
ACEL	0,13087665	0,18508754	4,23	0,4313685
sd2	0,02856223	0,04039309	21,424565	2,1848425

Na tabela 2 tem-se que:

- Vrms = valor obtido pelo analisador
- V(peak) = Vrms x Raiz[2]
- Sensib. = sensibilidade dos sensores que é expressa em mili-volts por unidade de aceleração
- ACEL = corresponde ao acelerômetro utilizado
- sb e sd = correspondem aos sensores calibrados

Pode-se perceber que o sensor que apresentou maior sensibilidade foi o sb4.

ENSAIOS EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

Ensaio no motor com cilindrada de 1.3 litros.

O sinal originado da detonação através da medição de pressão do interior do cilindro do motor permitiu a identificação do fenômeno facilmente. O sinal de pressão foi analisado também quanto as componentes de frequência.

Na figura 5 tem-se o curva de pressão e o respectivo espectro de frequência para uma situação em que não existe ocorrência de detonação.

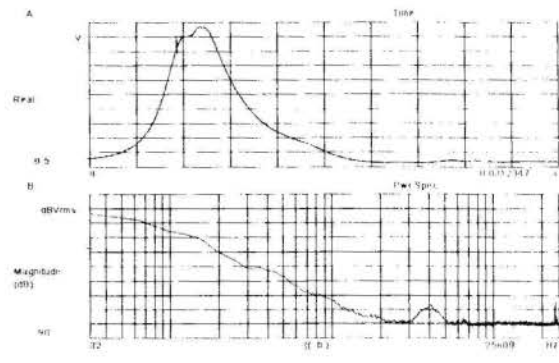


Figura 5 - (a) Curva de Pressão (b) Espectro de Frequência sem detonação

A figura 6 mostra a curva de pressão obtida com detonação e o respectivo espectro de frequência do sinal. Notam-se na curva de pressão oscilações após o valor máximo, este perfil de oscilação é característico quando se tem a detonação. A curva de espectro de frequência mostra um aumento na amplitude do sinal em torno de 7 kHz, identificando o fenômeno de detonação.

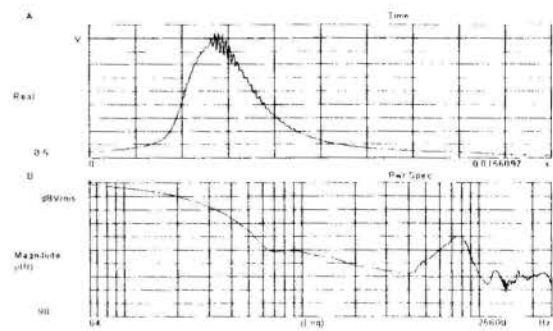


Figura 6 - (a) Curva de Pressão, (b) Espectro de Frequência com motor detonando

A identificação da detonação na curva de pressão medida no interior do cilindro, como pode ser visto nas figuras anteriores, é bastante simples se este sinal e o equipamento de análise estiverem disponíveis. Contudo a medição desta pressão necessita um aparato experimental não trivial, ou seja de um sensor de pressão do tipo piezoelétrico, amplificador, e a instalação de uma linha pneumática até a câmara de combustão. O uso de uma linha para a transmissão de pressão até o sensor pode acarretar alteração de fase e amplitude do sinal gerado na câmara de combustão, e portanto atenuar o sinal promovido pela detonação, como mostrado por Vianna (1994). Sendo assim, requer-se estudo complementar com a finalidade de avaliar o efeito da linha pneumática na medição dinâmica de pressão.

Um segundo processo de identificação da detonação tratado neste trabalho utiliza-se da vibração transmitida para o bloco do motor, e foi tratado de duas formas. A primeira forma utilizada para a identificação do sinal foi a da análise do sinal de saída do sensor de detonação no domínio do tempo. A segunda forma de análise deste sinal foi o tratamento do mesmo no domínio da frequência.

Pela figura 7 nota-se pelo sinal oriundo do sensor de detonação sb3, no domínio do tempo. Observa-se dentro do tempo decorrido para o motor girar seu eixo de 720 graus, tem-se quatro pontos distintos de aumento de amplitude, que correspondem ao fenômeno ocorrendo em cada um dos quatro cilindros do motor. Baseado na ordem de ignição do motor 1-3-4-2, o primeiro aumento de amplitude corresponde a detonação

ocorrendo no 1º cilindro, a segunda mudança de amplitude, a uma detonação no 3º cilindro e assim por diante.

Pode-se visualizar a mudança de amplitude do sinal durante o período de ocorrência do fenômeno. Na curva mostrada tem-se um segundo sinal indicando quando o primeiro cilindro do motor está no ponto morto superior (PMS).

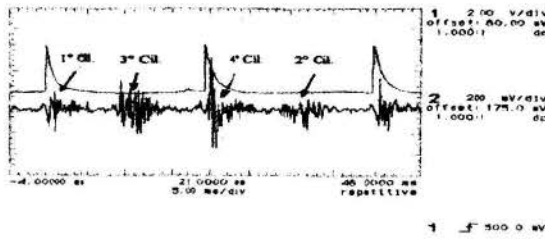


Figura 7 - Sinal do Sensor de detonação do domínio do tempo com sinal de PMS para referência.

O sinal do sensor de detonação quando analisado no domínio da frequência apresenta uma amplitude de valor mais elevado em torno da frequência de 7 kHz. Na figura 8 tem-se o sinal obtido do sensor com o motor operando sem ocorrência de detonação. Na figura 9 tem-se o mesmo sinal capturado com o motor apresentando detonação.

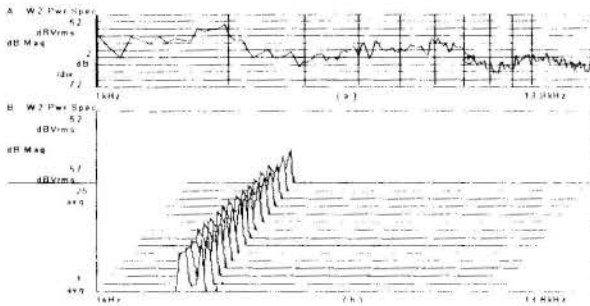


Figura 8 - Resposta do sensor de detonação para motor sem ocorrência de detonação. (a) Espectro de Potência ; (b) Mapeamento temporal do Espectro de Potência.

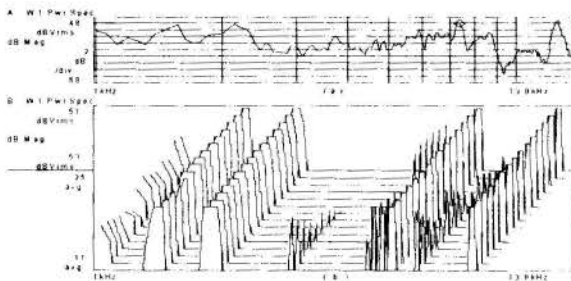


Figura 9 - Resposta do sensor de detonação para motor com ocorrência de detonação. (a) Espectro de Potência ; (b) Mapeamento temporal do Espectro de Potência.

Ensaio no motor com cilindrada de 1.4 litros.

Os resultados dos ensaios com este motor teve como objetivo determinar o ponto de início de ocorrência de detonação. É apresentada uma avaliação de influência da

localização dos sensores no bloco do motor, de modo a otimizar a metodologia de identificação da detonação.

Em virtude do motor testado ter sido modificado para competição, o método de identificação de detonação foi empregado como ferramenta de avaliação para melhoria do desempenho do motor .

Para realizar os teste de identificação de detonação, foi necessário estabelecer um critério para garantir no motor a presença da detonação. Este critério foi avaliado segundo a observação de dois fenômenos: o primeiro é o audível causado pelo fenômeno denominado de 'batida de pino', e o segundo é quando o sinal fornecido pelo sensor de detonação atingiu uma amplitude preestabelecida.

Para efetuar os ensaios no motor, foi necessário a montagem de uma bancada de ensaios própria para a situação. Esta bancada pode ser vista esquematicamente na figura 10, e é composta por::

- 1 - Motor
- 2 - Amplificador de carga
- 3 - Osciloscópio HP54500A
- 4 - Micro computador
- 5 - Captação do sinal de pressão
- 6 - Captação do sinal do ponto morto superior
- 7 - Captação do sinal de vibração
- 8 - Conexão do osciloscópio com o computador
- 9 - Canal receptor do PMS
- 10 - Canal receptor dos sinais de pressão e vibração
- 11 - Sensor de pressão - Kistler 6001

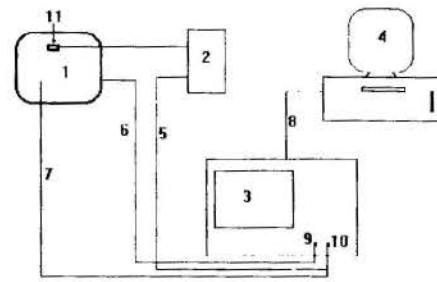


Figura 10 - Esquema do aparato experimental usado nos ensaios

Foram realizados três ensaios nos quais instalou-se seis sensores em diferentes pontos no bloco do motor, com o intuito de determinar o local onde o sinal apresenta-se com maior amplitude e melhor definição. Os ensaios foram feitos para estados diferentes de detonação, ou seja foram feitos para quatro avanços diferentes do ponto de ignição.

Os pontos no bloco do motor foram pré-definidos antes de qualquer ensaio e suas posições podem ser vistas esquematicamente na figura 11. Na figura, a vista A corresponde ao lado oposto às velas, enquanto que a vista B corresponde ao lado das velas. As posições d e c ficam numa saliência no alto do bloco do motor, e a f fica no cabeçote do mesmo.

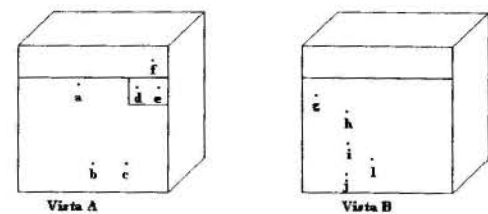


Figura 11 - Posições dos sensores no bloco do 1.4

As posições dos sensores de detonação no bloco para os três ensaios podem ser vistas na tabela 4.

Tabela 4 - Posições do sensores para os três ensaios

	sb1	sb2	sb3	sb4	sd1	sd2
Posição ensaio 1	b	a	h	d	f	e
Posição ensaio 2	d	b	a	h	e	f
Posição ensaio 3	c	a	d	e	f	b

Realizando uma comparação dos resultados fornecidos pelos ensaios, na tabela 5 tem-se um quadro com a avaliação qualitativa apresentada pelos sensores nas múltiplas posições. O melhor posicionamento para captura do sinal se apresentou no ponto **a**, no lado oposto às velas e na parte superior do motor, próximo ao cabeçote do mesmo.

Tabela 5 - Resultados dos ensaios para escolha do sensor e da posição do mesmo no bloco

	Ensaio 1 av=35°	Ensaio 2 av = 27,5°	Ensaio 3 av = 27°	Ensaio 3 av = 30°
Melhor Definição	sb3 / sd2	sb3 / sb4	sb2 / sb3	sb2 / sb3
Maior Amplitude	sb1 / sd2	sb3 / sb2	sb3 / sb2	sb2 / sb3
Posições	b / h / e	a / b / h	a / d	a / d

av : Avanço da Centelha de Ignição

Nota-se que o ensaio 3 foi realizado para dois avanços diferentes de centelha, ou seja, os três ensaios mostram quatro estados diferentes de detonação.

Para a determinação do ponto de início de detonação no motor utilizou-se o sensor sb3 instalado na posição **a** do bloco do motor para captar as vibrações no bloco, e o sensor de pressão da Kistler instalado em uma vela com linha pneumática curta.

Com o objetivo de estimar o ponto de início da detonação no motor, realizou-se um ensaio onde para cada rotação, 2000, 2500, 3000, 3500 e 4000 rpm, avançou-se a centelha a partir de uma condição sem detonação até uma outra onde era garantida a presença da mesma. Com isso pôde-se estimar em que avanço numa certa rotação o motor começava a apresentar nitidamente o fenômeno.

A tabela 6 mostra o ângulo de avanço da centelha a partir do qual o motor apresentava evidências claras de detonação.

Tabela 6 - Ponto de início de detonação no motor Corsa

rotação [rpm]	2000	2500	3000	3500	4000
ângulo de avanço[graus]	9	10	11	9	11

Nota-se ainda pela tabela 6 que não houve uma tendência linear da variação do ângulo de avanço crítico em função da rotação, a não ser nas três primeiras rotações.

Quanto ao pulso de pressão, houve aumento significativo de amplitude, porém não foi possível a observação da oscilação do pulso em virtude do amortecimento da linha pneumática de medição de pressão como mostrado por Vianna (1994).

Ensaio no motor com cilindrada de 1.0 litros.

Para os ensaios neste motor empregou-se o cabeçote com um furo permitindo a instalação do sensor de pressão em condições mais favoráveis para medição de pressão dinâmica na câmara de combustão. O sensor de vibração utilizado foi novamente o sb3, instalado no lado oposto às velas.

Os resultados apresentados pelos ensaios com este motor mostram curvas dos sensores detonação e pressão em duas situações distintas, ou seja, em um regime sem ocorrência de detonação e no outro regime com o fenômeno ocorrendo claramente. Foram realizados testes para diversas rotações entre 2000 e 4000 rpm.

As figuras 12 e 13 mostram o sinal do sensor de detonação conjuntamente com a curva de pressão, para o avanço de 40° numa rotação de 3000 rpm. As figuras 14 e 15 mostram os mesmos sinais para um avanço de 64° e mesma rotação.

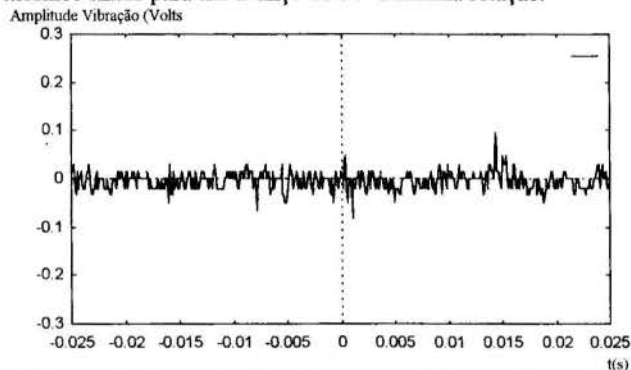


Figura 12 - Curva de vibração - avanço 40° - sem detonação

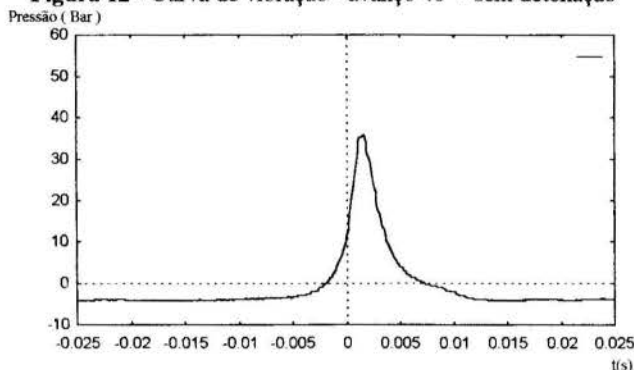


Figura 13 - Curva de pressão - avanço 40° - sem detonação

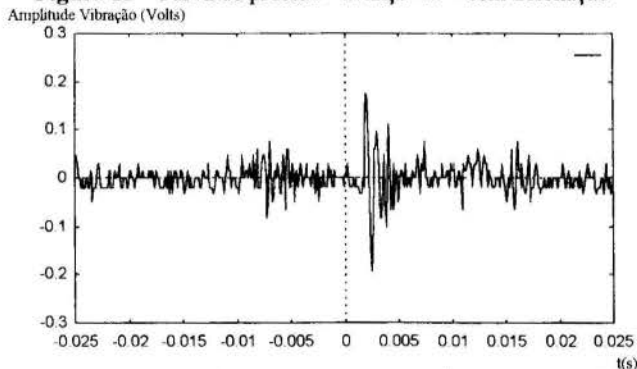


Figura 14 - Curva de vibração - avanço 64° - com detonação

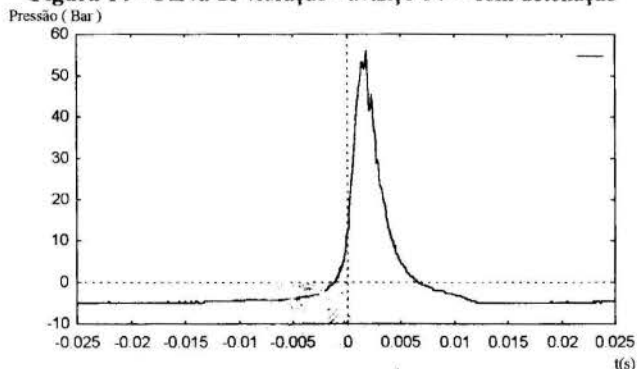


Figura 15 - Curva de pressão - avanço 64° - com detonação

Como pode-se observar nas figuras acima, houve um significativo aumento na amplitude do sinal adquirido pelo sensor de detonação, quando ocorria detonação (avanço de 64°). Quanto à curva de pressão, esta apresenta uma ligeira oscilação próximo ao ponto de pressão máxima, característico da presença do fenômeno. Ainda em relação a curva de pressão houve um significativo aumento de pressão. Percebe-se que a detonação se mostrou mais intensamente no primeiro cilindro.

Para determinar a influência do avanço da centelha no comportamento do fenômeno de detonação ensaiou-se o motor para a rotação de 3500 rpm e avanços de 63° e 69°. Analisou-se então o pulso de pressão e o sinal de vibração adquiridos.

Com o aumento do avanço, a amplitude média do sinal fornecido pelo sensor de detonação apresentou uma elevação. Como mostrado na figura 7 é possível identificar a origem da vibração separadamente por cilindro. Desta forma empregando a mesma técnica para a figura 17, os cilindros com o tempo motor antes e depois do cilindro onde a a pressão está sendo medida, apresentaram maior intensidade de detonação.

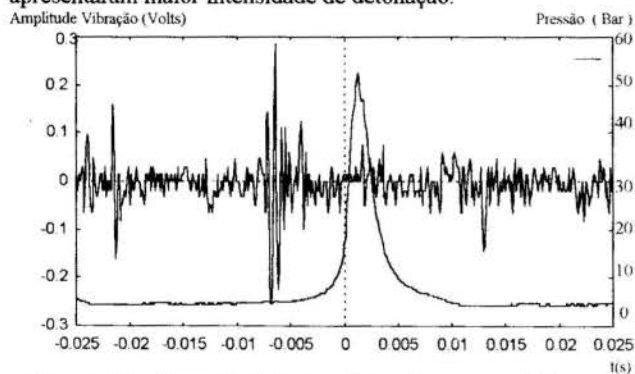


Figura 16 - Curva de vibração e Pressão - avanço 63° - com detonação

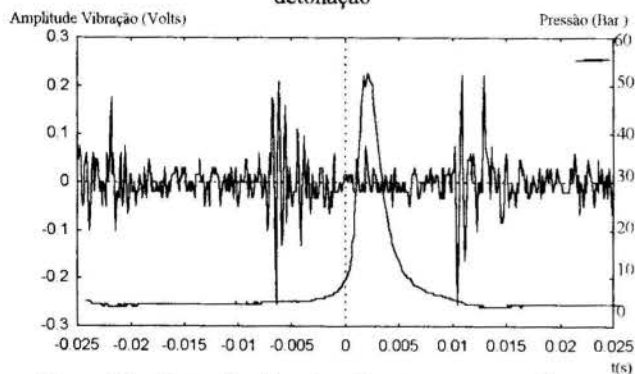


Figura 18 - Curva de vibração e Pressão - avanço 69° - com detonação

Nas curvas de pressão não se percebe variações de comportamento com o incremento do avanço. A constância do sinal de pressão para esta situação, deve-se a um problema de alimentação dos cilindros 1 e 4, que estão mais distantes do carburador em relação aos cilindros 2 e 3. Desta forma o motor apresenta uma acentuada detonação nos cilindros 2 e 3, e uma reduzida detonação nos cilindros 1 e 4 simultaneamente.

CONCLUSÕES

As metodologias aplicadas permitiram a identificação do fenômeno de detonação nos motores de combustão interna. Servindo como ferramenta para adicional para o trabalho de otimização de motores, como mostrado no caso do motor com cilindrada de 1.4 litros.

A simples detecção da ocorrência de detonação pode ser realizada de modo fácil utilizando o sinal no domínio do tempo capturado por um sensor de detonação comercialmente

empregado pela indústria automobilística. Para o caso de estudos relacionando a amplitude do fenômeno para otimização do motor de combustão interna, a metodologia de identificação no pulso de pressão e utilização do sensor de detonação com análise do espectro de frequência apresentam melhores resultados.

A partir de uma comparação dos sinais das amplitudes das vibrações captadas no bloco e da definição das mesmas, pôde-se concluir que os sensores "sb" mostraram-se mais apropriados para trabalhos de identificação nos motores. Os sensores "sd" apresentaram bons resultados apenas para uma configuração específica de motor e posicionamento definido.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Taylor, C. F., 1976, "Análise dos motores de combustão interna", Editora Edgard Blucher, Vol. 2, São Paulo.

Vianna, J. de S.; Damion, J.P.; Carvalho, M.A. M., 1994, "Contribution of Study of Measurement of dynamic pressure in the interiors of combustion engine cylinders" UnB e Ecole Nationale Paris, SAE TECHNICAL PAPERS SERIES.

Buzdugan, G.; Mihailescu, E.; Rades, M., 1986, "Vibration measurement", Martins Nijhoff Publisher.

Piezoelectric Accelerometers and Vibration Preamplifiers - Theory and application Handbook - Brüel & Kjaer.

The Fundamentals of signal Analysis, Applications note 243, Hewlett Packard.

ABSTRACT

This work discusses test methodologies for the identification of knocking in internal combustion engines. The paper considers the measurement of pressure in the combustion chamber, and the measurement of vibration caused by knocking in the engine block. Experimental aspects involved in each of the proposed methodologies are discussed.



DESEMPENHO DE UM MOTOR ALIMENTADO A ÁLCOOL ALTAMENTE HIDRATADO



Eduardo Klein & Pedro Mello

Programa de Pós-Graduação em Engenharia mecânica
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Rua Sarmento Leite, 425 - 90050-170 Porto Alegre/RS Brasil

RESUMO

Atualmente os combustíveis para alimentar motores de combustão interna em nível mundial são basicamente derivados do petróleo. O Brasil apresenta-se neste contexto como uma rara exceção, onde tem-se a possibilidade do uso do álcool hidratado como combustível alternativo. Os resultados obtidos desta experiência tem sido extremamente satisfatórios do ponto de vista técnico. Entretanto, a otimização do uso de motores alimentados com álcool com diferentes conteúdos de água ainda é uma questão em aberto. A desidratação do álcool junto ao parque produtivo representa custos muito elevados, dependendo do grau de água a ser eliminada nos processos de destilação. Neste trabalho é efetuado o levantamento experimental do desempenho de um motor de ignição por centelha alimentado a álcool com diferentes teores de hidratação.

INTRODUÇÃO

Desde o surgimento, no final do século passado, dos motores de combustão interna de quatro tempos para uso automotivo existe a preocupação no sentido de haver à disposição do usuário um combustível acessível e de baixo custo. Na verdade já em meados do século dezessete, os pesquisadores procuravam descobrir hidrocarbonetos gasosos e líquidos para serem utilizados como combustível. Mais tarde surgiria o álcool combustível, e, em 1861, Nikolaus August Otto, idealizador do motor de 4 tempos, já tinha em mente o uso desse álcool para alimentar seu motor (Penido, P. 1981).

Em 1975 o preço do barril de petróleo (que , dois anos antes era de US\$ 2,50) começava a disparar chegando a US\$ 10,00. Foi o bastante para surgir o proálcool, por várias razões, mas principalmente para tentar encontrar uma saída para a crise por que passavam os produtores de açúcar, devido à falta de demanda e a queda de preços no mercado internacional. Neste mesmo ano iniciava-se no CTA (Centro Técnico Aeroespacial) em São José dos Campos (SP) as pesquisas para se utilizar o álcool como combustível para alimentar motores de combustão interna. Foi desta maneira o segundo combustível a ser oferecido nos postos de serviço do Brasil juntamente com a gasolina para motores Otto. Estes estudos tiveram aplicação prática nos anos oitenta com enorme expansão na produção de motores alimentados a álcool, mas gradativamente foi sendo reduzido até os dias atuais, onde a produção de automóveis alimentados a álcool é inferior a 4%. Nos anos oitenta a produção chegou a atingir 96% das unidades colocadas a venda no mercado(1986).

A maior vantagem do álcool como combustível, nos dias de hoje, é com relação aos níveis de poluentes que a combustão do mesmo lança na atmosfera que são muito menores que os da gasolina comum. Na vanguarda dos trabalhos feitos para se tentar solucionar o problema da poluição estão os Estados Unidos. Na Califórnia, por exemplo, existe até uma lei ligada a questão , denominada " Clean Air Act " ou decreto do ar limpo. Datada de 1990, ela determina a redução gradual nos níveis de emissões dos motores ao patamar zero (2% da produção total do ano 2000) até o fim do século, que tornará certamente impraticável o uso de motores de combustão interna. Talvez o mais nocivo produto da combustão do álcool sejam os aldeídos

acéticos por ele liberados. A questão básica sempre levantada de que o álcool é uma fonte renovável de energia não nos parece de muito fundamento visto que a crise do petróleo é bem mais política do que propriamente energética. Além disso, a terra em que é cultivada a cana de açúcar vai perdendo suas propriedades gradativamente, daí a necessidade de descentralizar a produção inclusive para a diminuição dos encargos com frete.

Neste trabalho é apresentada a análise experimental do desempenho de um motor alimentado com álcool com vários teores de hidratação. Os resultados indicam que é possível utilizar-se misturas álcool+água sem grandes perdas de potência,sem grandes alterações no consumo de combustível e sem grandes modificações no sistema de alimentação. Entretanto, é necessário uma otimização no ponto de início da ignição, no grau térmico das velas, na relação de compressão, bem como dos calibres do sistema de dosagem de combustível, quando tratar-se de motores carburados. Quando se tratar de um motor alimentado por sistema de injeção eletrônica de combustível deverá ser selecionado um programa computacional adequado para as condições de teste e funcionamento.

O ÁLCOOL COMBUSTÍVEL

Devido à pureza e suas propriedades térmicas, o álcool é, sem dúvida, um combustível muito diferente dos hidrocarbonetos derivados do petróleo, e por ser também mais homogêneo a combustão é bem mais completa, deixando um número menor de sub produtos ao final da combustão, produzindo inclusive teores de CO bem inferiores aos da combustão da gasolina. A única desvantagem do álcool com relação a poluição é a emissão exagerada de aldeídos (como já mencionado anteriormente) e de óxidos de nitrogênio. A questão do menor poder calorífico do álcool pode ser resolvida em parte através do aumento da relação de compressão, já que o índice de octano do álcool é bem superior ao da gasolina vendida no Brasil. O fato do álcool iniciar sua evaporação a apenas 78,2° C talvez seja, ainda hoje, o ponto em que devam ser concentrados os maiores estudos a fim de se conseguir otimizar o funcionamento do motor ainda frio. Quando o motor está na fase de aquecimento, o álcool pode ser prejudicial ao filme de óleo presente nas paredes dos cilindros, já que é solvente de alguns

tipos de óleos, visto que ainda não começou a evaporar. Este tipo de problema não acontece com a gasolina, visto que inicia sua evaporação a partir de 27 graus Celcius.

O álcool, por ser um produto derivado da biomassa, é geralmente destilado e devido ao fato de ser altamente higroscópico, permanece misturado a este um certo teor de água, onde deve ser inicialmente separado por processos de retificação e químicos, se for o caso do álcool anidro. A partir de 96° GL, não se consegue mais extrair a água por processo comum de destilação, então deve ser utilizado um processo químico altamente dispendioso em termos financeiros. A matéria prima pode ser cultivada regularmente, logo renovável e pode ser obtida por grandes e pequenos agricultores, possibilitando assim uma boa distribuição econômica entre várias regiões. Esse álcool produzido a partir da biomassa pode prover de sacarídeos, amiláceos e celulósicos (Paul, J.K., 1979). Como a tecnologia utilizada na produção do álcool é bastante simples e amplamente conhecida, permite que pequenos produtores de cana de açúcar, por exemplo, possam também produzir esse combustível em minidestilarias, onde equipamentos mais simples podem ser aqui utilizados. Isso aplicado em grande escala reduziria a importação de petróleo, que hoje está ao redor de 500 mil barris/dia. Por outro lado o trinômio energia-economia-ecologia poderia encontrar um equilíbrio a partir da descentralização do setor de matérias primas para a produção de álcool através desses subsistemas. Também os subprodutos da cana de açúcar, por exemplo, o bagaço podem ser utilizados como fonte de energia para a geração do vapor da própria caldeira da usina. Em Bristoti, A. e Tolmasquin, M., 1987, encontram-se de forma abrangente uma análise técnica e econômica de microdestilarias, onde inclusive são enfocados aspectos ecológicos ligados aos resíduos gerados no processo produtivo.

Do ponto de vista energético, o que deve ser ressaltado é o fato de que o custo para a extração da água do álcool vai se tornando muito elevado a medida que vamos nos aproximando da condição de álcool anidro propriamente dito, em razão da curva de destilação ter um ponto de inflexão ao redor dos 96% em volume de álcool. Isto é um caso de legítima autofagia como mostra claramente Mc Cabe, M.R., 1967, ou seja, a destilação do álcool a partir de 90% em volume necessita uma certa quantidade de energia quase equivalente à energia obtida durante o processo de combustão do álcool.

Uma saída para produzir um álcool energeticamente mais viável é através de microdestilarias, que podem sem necessariamente grandes investimentos produzir álcool com teor entre 80 e 90% em volume, e que poderia ser utilizado na própria propriedade, tornando-a independente do ponto de vista energético e, conseqüentemente financeiro. Também do ponto de vista ambiental seria vantajoso, pois haveria uma dispersão dos resíduos gerados na produção. Seriam menores quantidades de resíduos e em pontos bem distribuídos; problema de fácil solução.

O EXPERIMENTO

Para realizar os testes experimentais de desempenho e medição do consumo, com combustível com vários teores de conteúdo de água, foi utilizado um motor alimentado a álcool com 1,6 litros, diâmetro dos cilindros de 82,0 mm e curso dos pistões de 75,7 mm, taxa de compressão 12:1, com carburador de corpo duplo e fluxo descendente, estagiado a vácuo e com sistema de alimentação e escape do tipo fluxo cruzado. O motor

foi ligado ao dinamômetro através de um eixo cardã com duas cruzetas e de um eixo ranhurado para compensar a folga axial do conjunto. O banco de testes é um freio dinamométrico que utiliza correntes parasitas (correntes de Foucauld), onde uma corrente continua controla a magnitude do campo magnético que age como elemento frenante do eixo do motor. A energia de frenagem é dissipada por o líquido de arrefecimento, que circula em galerias internas ao redor das bobinas do freio.

O trocador de calor original do sistema de arrefecimento do motor foi substituído por um outro de maior capacidade de troca de calor com aproximadamente 90 litros de capacidade. Neste trocador existe a possibilidade de entrada de água da rede através de uma válvula controlada por um solenóide. Para as medidas de temperatura de bulbo seco e bulbo úmido utilizou-se um psicrômetro. Para medir a pressão do óleo foi usada a própria saída do sistema original do sensor de pressão e acoplada a um manômetro. As temperaturas do óleo e da entrada e saída de água do motor foram medidas por meio de termopares do tipo K. As medidas de giro do motor foram feitas utilizando-se um frequencímetro digital YOKOGAWA. A força de frenagem foi obtida por meio de uma célula de carga acoplada à carcaça do dinamômetro.

O combustível utilizado foi adquirido em um posto de serviço da BR Distribuidora, apresentado uma composição de 94,8° GL medidos com um alcolômetro de Gay-Lussac. Nos diferentes testes foi sendo adicionada água destilada e deionizada ao álcool, mantendo-se a regulagem original e posteriormente substituindo-se os calibres do primeiro de do segundo corpo do carburador.

RESULTADOS

Os resultados foram obtidos através de testes experimentais realizados de acordo com a NBR 5484 de fevereiro de 1985 editada pela ABNT, que descreve o método para testar motores para veículos automotivos e mostra como apresentar as curvas características de desempenho (torque, consumo específico e potência efetiva) a plena carga e abertura máxima da borboleta do carburador. No presente caso foram obtidas as curvas de torque efetivo líquido e calculadas as curvas de potência efetiva líquida, ou seja, são curvas de desempenho do motor em condições normais de utilização.

Para cálculo de potência de um motor de ciclo Otto devem ser usados os fatores de correção dados na norma como $k_o = (99/ps)^{1.2} (273 + t/298)^{0.6}$, onde ps é a pressão do ar seco (kPa) e t a temperatura do ar de admissão (°C); $ps = pb - 1/7,5 \{e^{(21,106 - 5345,5/(t_u + 273))} - 0,49(ts - t_u)pb/100\}$, onde pb é a pressão barométrica (kPa), ts é a temperatura de bulbo seco e tu a temperatura de bulbo úmido. O parâmetro k_o normalmente varia entre 0,93 e 1,07.

A fig. 1 mostra a curva de potência a freio em função do giro do eixo do motor, obtida de acordo com a norma acima, para as diversas combinações de hidratação e calibres do carburador. Na curva com álcool 94,8° GL, adquirido no posto de serviço, o motor foi equipado com os calibres originais de dosificação de combustível do carburador (132 e 162 no primeiro e segundo corpo respectivamente) e não foi alterada a posição inicial do ponto de ignição. As temperaturas de bulbo seco e úmido foram 18,2 e 15,6 °C, respectivamente, e a pressão atmosférica, 98,29 kPa. As temperaturas do ar de admissão e do óleo do motor variaram entre 26 e 30 °C e 105 e 121 °C, respectivamente, do início ao fim do teste.

A outra curva mostra o resultado com o mesmo álcool mas outras temperaturas e fatores de correção com regulagem e calibres originais. Entretanto, com pressão atmosférica de 102,1 kPa e com temperaturas de 18,6 e 16,1 °C para os termômetros de bulbo seco e úmido respectivamente. As temperaturas do ar de admissão e do óleo do motor variaram entre 26 e 28 °C e 110 e 122 °C, respectivamente, desde o início até fim do teste. Observa-se aqui uma ligeira redução na potência em virtude das diferentes condições ambientes de pressão, temperatura e umidade

Para as medições do motor alimentado com álcool 88,5° GL, os calibres foram mantidos os originais do motor, e não houve alteração na regulagem especificada pelo fabricante. As temperaturas de bulbo seco e úmido foram de 16,6 e 11,8 °C, respectivamente, portanto bastante inferiores às indicadas nos testes anteriores. A pressão atmosférica foi de 103,5 kPa. A temperatura do ar de admissão permaneceu quase constante ao redor de 32 °C e as temperaturas do óleo de lubrificação variaram entre 118 e 127 °C do início ao fim do teste.

Para o combustível 89° GL, os calibres do primeiro e segundo corpo do carburador foram alterados para as medidas de 140 e 170, respectivamente, e manteve-se o ponto inicial da ignição inalterado. Os termômetros de bulbo seco e úmido marcaram 17,8 e 11,9 °C, respectivamente. A pressão atmosférica foi de 102,17 kPa. A temperatura do ar de admissão variou entre 23 e 26 °C e a do óleo de lubrificação de 110 a 130 °C do início ao fim do teste, respectivamente.

Finalizando, a última curva mostra o resultado com álcool 84° GL. Os calibres do carburador foram de 140 e 170 do primeiro e segundo corpo, respectivamente. As temperaturas de bulbo seco e úmido foram de 17,8 e 11,9 °C, respectivamente. A pressão atmosférica foi de 102,18 kPa. As temperaturas do ar de admissão variaram entre 33 e 34 °C, e as temperaturas do óleo de lubrificação ficaram entre 120 e 127 °C, do início ao fim do teste.

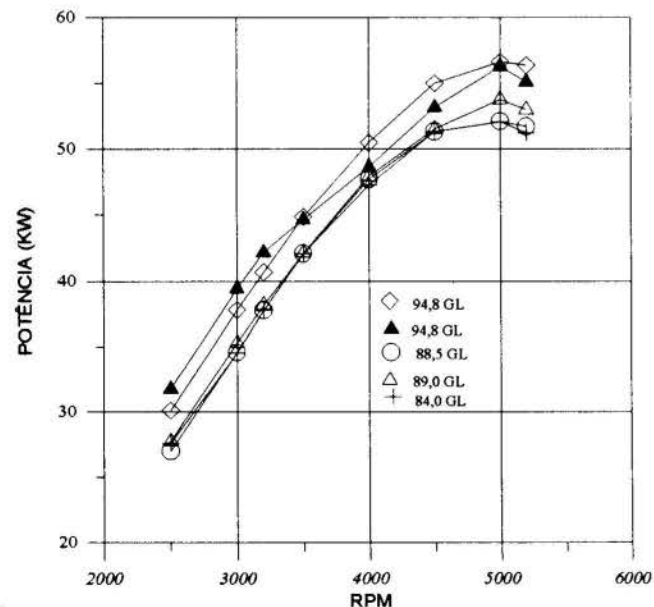


Figura 1. Curvas de potência líquida para os diferentes graus de hidratação.

Em todos os testes foram efetuadas medidas das temperaturas de entrada e saída do líquido de arrefecimento do motor, que manteve-se entre 90 e 92 °C. Foram também medidas as pressões do óleo do sistema de lubrificação, que variou entre 275 a 345 kPa do início ao fim dos testes. Essa variação é devido à diminuição de viscosidade do óleo em função do aumento de temperatura com o aumento de giro do motor.

Como continuação dos testes, foi inclusive iniciado o levantamento dos dados para cálculo de uma curva de potência deste motor alimentado com álcool 79° GL. Os calibres do primeiro e segundo corpo do carburador foram aqui alterados para 152 e 195, respectivamente. Aqui foram levantados apenas dois pontos para as velocidades de 4500 e 5000 RPM e que resultaram em potências de 47,49 e 48,743 kW respectivamente. Os testes foram neste ponto interrompidos por questões de segurança, pois embora o motor aparentemente tenha funcionado de forma regular com estas condições de alimentação, necessitava de uma nova regulagem do sistema de ignição e do próprio sistema de alimentação; embora em momento algum tenha-se notado qualquer tipo de funcionamento irregular, como ruído provocado por processo de combustão anormal (detonação). Isso serve apenas para demonstrar claramente a viabilidade do uso do álcool hidratado com teores de água superior ao usual como combustível para motores de ciclo Otto.

Com relação à ausência de detonação podemos ressaltar que a Petrobrás realizou um trabalho para a medição do índice de octano em amostras de combustíveis (álcoois) com diversos graus de hidratação. A tabela 1 nos dá uma idéia clara que realmente a não ocorrência do fenômeno da detonação era de se esperar. Com o aumento gradativo do grau de hidratação temos um aumento, também gradativo, do índice de octano; logo uma diminuição na tendência à detonação.

Tabela 1. Octanagem do álcool para diversos graus de hidratação.

Grau INPM	IOM	IOR
	97,4	
	96,0	
	95,4	
	93,9	
	91,9	
	91,2	
	90,8	

IOM- Índice Octano motor

IOR- Índice Octano Pesquisa

A fig. 2 mostra a curva de consumo específico de combustível em função do giro do motor, utilizando-se álcool 94,8 GL e calibres originais (132,162). Notar que o ponto de menor consumo específico é sempre ao redor do ponto de máximo torque do motor.

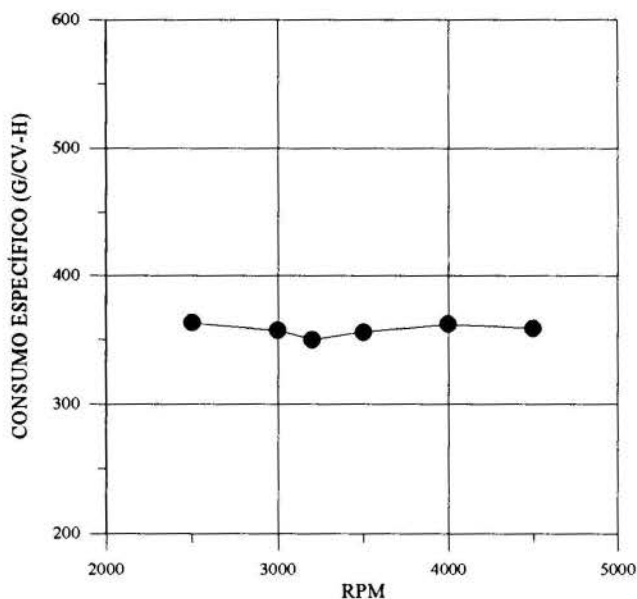


Figura 2. Consumo específico para o álcool 94,8 GL.

A fig. 3 mostra a curva de consumo específico em função do giro do motor para o álcool 88,5 GL com calibres originais (132,162). Notar que o consumo específico mínimo até diminuiu com a maior hidratação, permanecendo semelhante nas médias rotações e aumentando nas baixas .

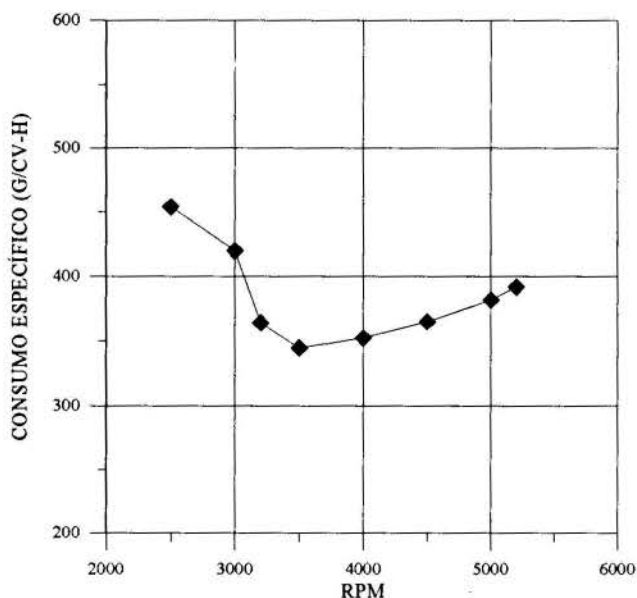


Figura 3. Consumo específico para o álcool 88,5 GL.

A fig. 4 mostra o gráfico do consumo total em uma hora de funcionamento em função do giro do motor para os álcoois 94,8 GL e 88,5 GL . Notar que o consumo total de álcool 88,5 GL é menor do que o do álcool do posto (94,8 GL), o que não deixa de ser no mínimo curioso e alentador. Uma explicação para isto talvez seja o fato de que a densidade do álcool altamente hidratado seja superior, logo a sua retirada do carburador

através dos calibres seja prejudicada pelo mínimo aumento da perda de carga, logicamente em níveis muito pequenos.

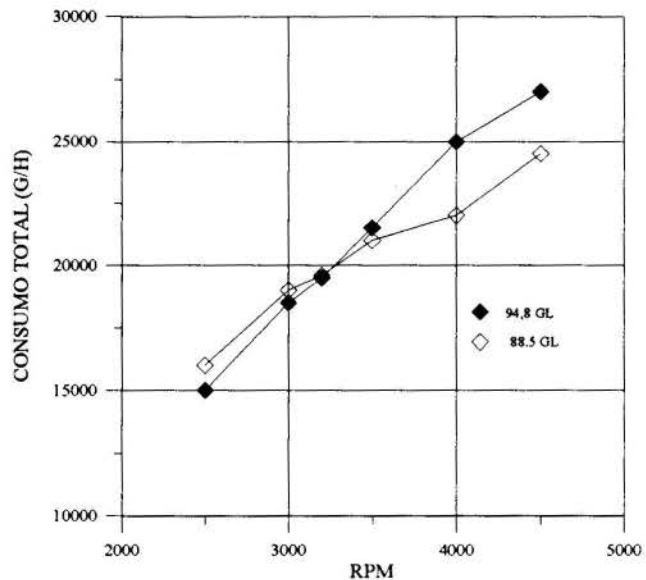


Figura 4. Curvas de consumo total para dois diferentes tipos de misturas (álcool 94,8 GL 88,5 GL).

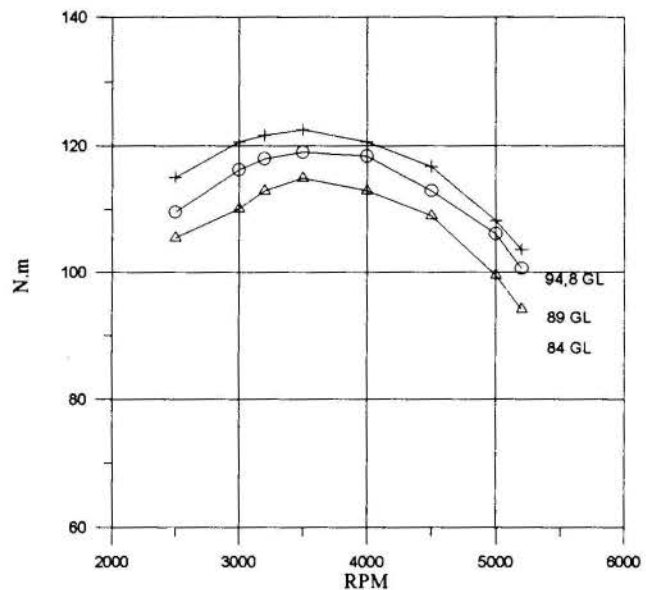


Figura 5. Curvas de torque para os diversos graus de hidratação.

A fig. 5 mostra como o torque motor varia com a variação da hidratação, tendo sido medido diretamente em N.m.

CONCLUSÕES

De acordo com alguns autores, o uso do álcool hidratado com teores de água superior a o usual como combustível para motores de combustão interna pode trazer alguns inconvenientes como,

por exemplo a redução do poder calorífico, com conseqüente aumento no consumo específico. Por outro lado, a água tem alto calor de vaporização, e com isso a temperatura máxima de combustão seria reduzida, o que possibilita um menor índice de formação dos chamados óxidos de nitrogênio, e aumenta também o poder antidetonante da mistura, mas na verdade isso também pode levar a um decréscimo na velocidade do processo de combustão, que pode ser compensado com o aumento do avanço inicial de ignição.

Indiscutivelmente, entretanto, os dados apresentados neste trabalho são muito alentadores no que se refere ao uso de um álcool com maior teor de água do que o atualmente utilizado, pois a redução de potência do motor está dentro de padrões absolutamente aceitáveis e explicáveis devido às características do combustível utilizado e, considerando-se uma única modificação na regulagem de fábrica do motor, que foram as substituições dos calibres de dosificação do carburador à medida que aumentava-se o teor de água no álcool. Obteve-se com este motor de apenas 1,6 litros uma potência de mais de 48 kW com álcool 79° GL. Essa mistura contém aproximadamente 25% de água da massa. Para esse percentual de água, houve uma redução na potência de cerca de 15,5%, e como não efetuou-se nenhuma otimização do motor, o estudo mostra ser então realmente viável.

(Stumpf, U.E., 1978) mostra, em estudos realizados com uma mistura hidro-alcoólica em um motor CFR que o consumo específico do combustível não é linear com a variação do teor alcoólico. Ele demonstrou que com 11% de água no álcool 96° GL, o consumo específico aumenta em apenas 8%; após esse valor a curva inclina-se de forma mais acentuada até cerca de 15%, e novamente fica mais plana até cerca de 30%. Existem alguns aspectos capazes de fornecer subsídios para explicar as diferenças entre consumo específico e potência como mostrado acima. Como anteriormente citado a água tem grande calor de troca de fase e enorme expansão volumétrica por ocasião dessa troca. Se por um lado existe um aumento do poder antidetonante, por outro lado essa expansão age com se houvesse um aumento na relação volumétrica de compressão do motor e como a eficiência térmica aumenta com a taxa de compressão, tem-se definitivamente uma redução menor no consumo específico do que aquela teoricamente esperada. Isso em parte também vale para o potência. Pois embora haja uma redução na temperatura máxima de combustão em função do calor de vaporização e uma redução do calor desenvolvido pela combustão, devido a água teoricamente comportar-se como uma substância inerte; podem talvez ocorrer reações não conhecidas durante o processo de combustão inclusive formando produtos, que por meio de reações intermediárias aumentam a taxa de calor total desenvolvido durante a combustão.

Finalmente, é necessário recorrer-se a alguns dados citados por (Del Pino, J., 1994) a respeito da produção do álcool. E, como citado anteriormente, a quantidade de energia necessária a produção e destilação do álcool 96° GL é da mesma ordem de grandeza da quantidade de energia liberada pela combustão deste álcool, ou seja, é um caso real de autofagia. O autor afirma que, para produzir um álcool 85° GL, essa quantidade de energia fica reduzida para torno de 12 vezes, isto é, ao redor de 8%. Com estes dados e com os resultados acima colocados deve-se enfatizar novamente que o uso do álcool hidratado com teores superiores aos usuais é do ponto de vista do balanço energético viável e pode seguramente ser utilizado para alimentar motores de combustão interna, desde que haja uma otimização na

regulagem do motor para as diferentes condições de alimentação e, tudo isso significa economia de divisas para o país e traz também grandes benefícios no que se refere ao aspecto ambiental.

REFERÊNCIAS

- Bristoti, A. et al, 1987 "Análise Econômica de um Modelo Microdestilaria Simplificado", I Congresso Brasileiro de Energia, p. 1145-1150, Rio de Janeiro,
- Del Pino, J.C., 1994, "Usos Alternativos do Bagaço de Cana de Açúcar na Indústria Avícola e da Borracha", Tese de Doutorado, PROMEC-UFRGS,
- Goldenberg, J. Menezes, J.R., 1989 Programa Nacional do Álcool em 1988", Revista Brasileira de Energia, p. 25-44, São Paulo,
- Mc Cabe, M.R. et al., 1967 "Unit Operations of Chemical Engineering", Mc Graw Hill, New York,
- Paul, J.K., 1979, "Álcool Production and Use a Motor Fuel", Noyes Data Corporation, New Jersey,
- Penido, P., 1981, "O Álcool Combustível obtenção e aplicação em motores", Livraria Nobel S.A. Editora e Distribuidora, São Paulo,
- Stumpf, U.E., 1978, "Aspectos Técnicos de Motores a Álcool", Ciência e Cultura, v 30, p. 428-435,
- Tolmasquim, M.T., 1987 "Análise Comparativa entre Grandes Destilarias de Álcool e Sistemas Integrados de Produção de Energia e Alimentos (SIPEAS)", I Congresso Brasileiro de Energia, p. 1159-1166, Rio de Janeiro.

ABSTRACT

In this work wide-open-throttle operating parameters (Brake Power, Torque and specific fuel consumption) of a production spark-ignition automotive engine is presented.

The power break is the net the power for the engine; this is depends only on the built accessories.

All tests was performed using various concentrations of alcohol-water mixtures as work fuel.



SPARK PLUG POSITION EFFECTS ON COMBUSTION, EMISSIONS AND PERFORMANCE OF AN ENGINE ACCORDING TO A FLAME GEOMETRY MODEL



José R. Sodré* and David A. Yates
UMIST, Department of Mechanical Engineering
Thermodynamics and Fluid Mechanics Division
PO Box 88, George Begg Building
Manchester M60 1QD - United Kingdom

SUMMARY

An analytical model has been developed to calculate the flame geometry parameters of a spark ignition engine. The model is based on a flat combustion chamber shape. The flame geometry model is part of a computer program that simulates the cycle of spark ignition engines. According to the model, the spark plug must be located in the cylinder head, but its position can be anywhere from the center to the corner with the cylinder liner. The effects of the spark plug position on combustion, emissions and performance were investigated. The generalized results have shown that combustion takes shorter periods as the spark plug is closer to the center, and higher cylinder pressures are attained. The performance parameters looked insensitive to the plug position, but lower emission levels were registered with the plug located in the corner. Experiments carried out on a research engine have provided the basic information to the program to perform the simulations.

INTRODUCTION

The need of the automotive industry to reduce and control emissions, to be in accordance with the regulation laws, contrasts with the always present objective to built more powerful engines. One way car manufacturers have long been trying to overcome the problem it through better combustion chamber designs, in different aspects. In this work, the effects of the spark plug location on combustion, emissions and performance have been studied through simulations made with a flame geometry model. The flame geometry model is written on an analytical basis, based on a combustion chamber of flat surfaces (disc). The spark plug can be located at any position in the cylinder head. A spherical flame front propagation is considered, with center in the spark plug. The flame geometry model is part of a spark ignition engine cycle simulation program, SPIE.

SPIE is a zero-dimension model, which does not account for flow fields and variations in mixture temperature and properties through the combustion chamber. Combustion occurs according to a mean flame front model, and the flame speed is calculated by a laminar flame speed expression multiplied by a turbulent flame speed factor. The model calculates the engine performance parameters, such as power, specific fuel consumption and mean effective pressure, the exhaust concentration of the main pollutant gases (CO_2 , CO , NO , HC , etc.), and other information relevant to analyze the energy conversion in spark ignition engines. Better descriptions of the SPIE program are given by Benson et al. (1975), Benson and Baruah (1976) and Sodré (1995).

FLAME GEOMETRY CALCULATION

The parameters calculated by the flame geometry model are the flame surface area and the flame contact areas with

the cylinder head, cylinder liner and piston crown. These parameters are evaluated as a function of the flame radius. The calculation of the flame radius requires the knowledge of the combustion products volume and the piston position. Cylinder bore, vertical distance between cylinder head and piston at TDC (top dead center) position, and minimum spark plug distance from cylinder liner are also required. Some integrals in the analytical process are solved numerically, as a result of their complexity.

There are eight possible flame positions for a flat combustion chamber, with the spark plug located in the cylinder head (Fig. 1). In the first case, the flame is described by a complete hemisphere, keeping contact just with the cylinder head. In the second case, the flame is a hemisphere cut by the piston, keeping contact with the cylinder head and the piston crown. The third case depicts the flame as a hemisphere cut in one side by the cylinder liner, where the flame contacts the cylinder head and the cylinder liner. The fourth case is a sum of the second and the third. In the fifth case, the flame is a hemisphere cut all around by the cylinder liner, without contact with the piston. In case six, the flame is a hemisphere cut by the cylinder liner and the piston crown, contacting the corner between those surfaces. Case seven is a sum of cases two and five. In the eighth case, the flame is occupying almost all the combustion chamber, except the corner between the cylinder liner and the piston crown far from the spark plug.

Only in cases one and two is an exact solution presented for all the parameters. For the other cases, an exact solution is given just for the flame contact areas with the cylinder head (A_{ch}) and the piston crown (A_{pc}). The flame contact area with the cylinder liner (A_{cl}) and the flame surface area (S_f) are expressed in terms of integrals to be solved numerically. In most of the cases, the flame radius (R_f) appears as an implicit integral function of the products volume (V_b), and is determined through the application of a numerical iterative method.

*Present address: PUC-Rio, Department of Mechanical Engineering, Rua Marquês de São Vicente 225 - Gávea, 22453-900 - Rio de Janeiro, Brazil.

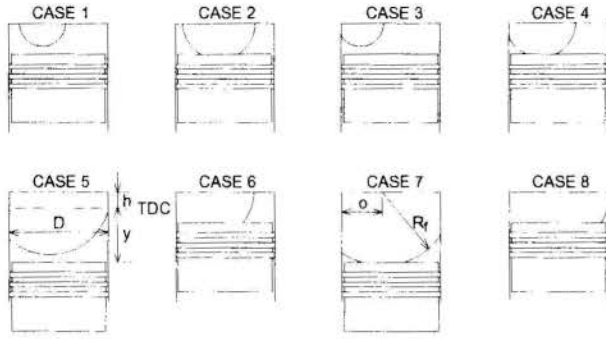


Figure 1- Flame geometry for a flat combustion chamber.

Flame Position Case 1

Here, the flame is at its beginning, and has contact with the cylinder head only, not reaching the cylinder liner or the piston crown. This case is the start point for any spark plug position in the cylinder head, except when it is located in the corner ($o = 0$). The expressions for V_b , A_{ch} , A_{cl} , A_{pc} and S_f are as follows,

$$V_b = \frac{2}{3}\pi R_f^3 \quad (1)$$

$$A_{ch} = \pi R_f^2 \quad (2)$$

$$A_{cl} = 0 \quad (3)$$

$$A_{pc} = 0 \quad (4)$$

$$S_f = 2\pi R_f^2 \quad (5)$$

In this case, the flame radius is solved directly from Eq. (1),

$$R_f = \left(\frac{3 V_b}{2 \pi}\right)^{1/3} \quad (6)$$

Flame Position Case 2

This is a continuation of case 1, when the flame has developed enough to make contact with the piston crown, although it does not touch the cylinder liner due to a more central position of the spark plug. The geometric parameters are so given,

$$V_b = \pi(y+h) \left[R_f^2 - \frac{(y+h)^2}{3} \right] \quad (7)$$

$$A_{ch} = \pi R_f^2 \quad (2)$$

$$A_{cl} = 0 \quad (3)$$

$$A_{pc} = \pi[R_f^2 - (y+h)^2] \quad (8)$$

$$S_f = 2\pi R_f(y+h) \quad (9)$$

The flame radius can be written in an explicit form from Eq. (7),

$$R_f = \left[\frac{V_b}{\pi(y+h)} + \frac{(y+h)^2}{3} \right]^{1/2} \quad (10)$$

Flame Position Case 3

This case can be a continuation of case 1, when the spark plug is located in a more off-center position than in case 2, or the flame beginning, for a plug located in the corner between the cylinder head and the cylinder liner. The flame touches the cylinder head and the cylinder liner, and has not developed enough to make contact with the piston crown.

It is convenient now to define the following parameters, as they are going to appear frequently,

$$\alpha_1 = \arccos \left[\frac{o(D-o) - R_f^2}{2R_f(D/2-o)} \right] \quad (11)$$

$$\alpha_2 = \arccos \left[-\frac{R_f^2 + o(D-o)}{R_f D} \right] \quad (12)$$

$$\alpha_3 = \arccos \left[\frac{(D/2)^2 + (D/2-o)^2 - R_f^2}{D(D/2-o)} \right] \quad (13)$$

$$\alpha_4 = \arccos \left[\frac{o(D-o) - [R_f^2 - (y+h)^2]}{2\sqrt{R_f^2 - (y+h)^2}(D/2-o)} \right] \quad (14)$$

$$\alpha_5 = \arccos \left[\frac{R_f^2 - (y+h)^2 + o(D-o)}{D\sqrt{R_f^2 - (y+h)^2}} \right] \quad (15)$$

$$\alpha_6 = \arccos \left[\frac{(D/2)^2 + (D/2-o)^2 - [R_f^2 - (y+h)^2]}{D(D/2-o)} \right] \quad (16)$$

The flame geometric parameters are then written,

$$V_b = \frac{2}{3} \left\{ \pi R_f^3 - \int_0^{\alpha_1} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} - (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{3/2} d\alpha \right\} \quad (17)$$

$$A_{ch} = [R_f^2 - (D/2)^2](\pi - \alpha_1) + (D/2)^2 \alpha_2 - R_f(D/2-o) \left\{ 1 - \left[\frac{R_f^2 - o(D-o)}{2R_f(D/2-o)} \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (18)$$

$$A_{cl} = D \int_0^{\alpha_3} \left\{ R_f^2 - (D/2)^2 - (D/2-o)[(D/2-o) - D \cos \alpha] \right\}^{1/2} d\alpha \quad (19)$$

$$A_{pc} = 0 \quad (4)$$

$$S_f = 2R_f \left\{ \pi R_f - \int_{\pi-\alpha_1}^{\pi} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} + (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{1/2} d\alpha \right\} \quad (20)$$

R_f must be solved by an iterative method from the expression for V_b , as it will be in the subsequent cases.

Flame Position Case 4

Case 4 is a continuity of either case 2 or case 3. The flame has reached a stage in which it makes contact with both the cylinder liner and the piston crown. The geometric parameters, then, become,

$$V_b = \pi(y+h) \left[R_f^2 - \frac{(y+h)^2}{3} \right] - \frac{2}{3} \int_0^{\alpha_1} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} - (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{3/2} d\alpha \quad (21)$$

$$A_{ch} = [R_f^2 - (D/2)^2](\pi - \alpha_1) + (D/2)^2 \alpha_2 - R_f(D/2-o) \left\{ 1 - \left[\frac{R_f^2 - o(D-o)}{2R_f(D/2-o)} \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (18)$$

$$A_{cl} = D \int_0^{\alpha_3} \left\{ R_f^2 - (D/2)^2 - (D/2-o)[(D/2-o) - D \cos \alpha] \right\}^{1/2} d\alpha \quad (19)$$

$$A_{pc} = \pi[R_f^2 - (y+h)^2] \quad (8)$$

$$S_f = 2R_f \left\{ \pi(y+h) - \int_{\pi-\alpha_1}^{\pi} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} + (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{1/2} d\alpha \right\} \quad (22)$$

Flame Position Case 5

Case 5 is typical for a very early ignition, a very late ignition or a slow flame propagation. The flame makes contact with all the cylinder head, touches all around the cylinder liner, but has not reached the piston crown yet. This case evolves from either case 1 or case 3. The geometric parameters are,

$$V_b = \frac{2}{3} \left\{ \pi R_f^3 - \int_0^{\pi} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} - (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{3/2} d\alpha \right\} \quad (23)$$

$$A_{ch} = \pi(D/2)^2 \quad (24)$$

$$A_{cl} = D \int_0^{\pi} \left\{ R_f^2 - (D/2)^2 - (D/2-o)[(D/2-o) - D \cos \alpha] \right\}^{1/2} d\alpha \quad (25)$$

$$A_{pc} = 0 \quad (4)$$

$$S_f = 2R_f \left\{ \pi R_f - \int_0^{\pi} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} + (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{1/2} d\alpha \right\} \quad (26)$$

Flame Position Case 6

This case is an evolution of either case 3, if the spark plug is located in the corner ($o = 0$), or case 4, for any other plug location in the cylinder head. Typical of an off-center plug position, the flame has covered one complete side of the combustion chamber, and the propagation from then is parallel to the piston crown and cylinder head. The following equations describe the geometric parameters,

$$V_b = (y+h) \left\{ \left[R_f^2 - \frac{(y+h)^2}{3} \right] \pi - \left[R_f^2 - (D/2)^2 - \frac{(y+h)^2}{3} \right] \alpha_4 - (D/2)^2 \alpha_5 - (D/2-o) [R_f^2 - (y+h)^2]^{1/2} \times \left\{ 1 - \left[\frac{o(D-o) - [R_f^2 - (y+h)^2]}{2[R_f^2 - (y+h)^2]^{1/2}(D/2-o)} \right]^2 \right\}^{1/2} \right\} - \frac{2}{3} \int_{\alpha_4}^{\alpha_1} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} - (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{3/2} d\alpha \quad (27)$$

$$A_{ch} = [R_f^2 - (D/2)^2](\pi - \alpha_1) + (D/2)^2 \alpha_2 - R_f(D/2-o) \left\{ 1 - \left[\frac{R_f^2 - o(D-o)}{2R_f(D/2-o)} \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (18)$$

$$A_{cl} = D \left\{ (y+h) \alpha_6 + \int_{\alpha_6}^{\alpha_3} \left(R_f^2 - (D/2)^2 - (D/2-o)[(D/2-o) - D \cos \alpha] \right)^{1/2} d\alpha \right\} \quad (28)$$

$$A_{pc} = [R_f^2 - (y+h)^2 - (D/2)^2](\pi - \alpha_4) + (D/2)^2(\pi - \alpha_5) - (D/2-o) [R_f^2 - (y+h)^2]^{1/2} \times \left\{ 1 - \left[\frac{R_f^2 - (y+h)^2 - o(D-o)}{2[R_f^2 - (y+h)^2]^{1/2}(D/2-o)} \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (29)$$

$$S_f = 2R_f \left\{ (y+h)(\pi - \alpha_4) - \int_{\pi-\alpha_1}^{\pi-\alpha_4} \left[R_f^2 - \left([(D/2-o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} + (D/2-o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{1/2} d\alpha \right\} \quad (30)$$

Flame Position Case 7

This is a continuity of cases 2, 4 or 5, and is the ultimate stage of the flame for a central spark plug. The flame covers all the cylinder head, touches all around the cylinder liner and makes contact with the piston crown. The geometric parameters are thus written,

$$V_b = \pi(y+h) \left[R_f^2 - \frac{(y+h)^2}{3} \right] - \frac{2}{3} \int_0^\pi \left\{ R_f^2 - \left[(D/2 - o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o) \right]^{1/2} - (D/2 - o) \cos \alpha \right\}^{3/2} d\alpha \quad (31)$$

$$A_{ch} = \pi(D/2)^2 \quad (24)$$

$$A_{cl} = D \int_0^\pi \left\{ R_f^2 - (D/2)^2 - (D/2 - o)[(D/2 - o) - D \cos \alpha] \right\}^{1/2} d\alpha \quad (25)$$

$$A_{pc} = \pi[R_f^2 - (y+h)^2] \quad (8)$$

$$S_f = 2R_f \left\{ \pi(y+h) - \int_0^\pi \left[R_f^2 - \left([(D/2 - o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} + (D/2 - o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{1/2} d\alpha \right\} \quad (32)$$

Flame Position Case 8

This is the last stage of the flame for an off-center plug. The flame covers all the combustion chamber, excluding the corner region between the cylinder liner and the piston crown which is farther from the spark plug. The flame geometric parameters are so expressed,

$$V_b = (y+h) \left\{ \left[R_f^2 - \frac{(y+h)^2}{3} \right] \pi - \left[R_f^2 - (D/2)^2 - \frac{(y+h)^2}{3} \right] \alpha_4 - (D/2)^2 \alpha_5 - (D/2 - o) [R_f^2 - (y+h)^2] \times \left\{ 1 - \left[\frac{o(D-o) - [R_f^2 - (y+h)^2]}{2[R_f^2 - (y+h)^2]^{1/2}(D/2 - o)} \right]^2 \right\}^{1/2} - \frac{2}{3} \int_0^{\alpha_1} \left[R_f^2 - \left([(D/2 - o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} - (D/2 - o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{3/2} d\alpha \right\} \quad (33)$$

$$A_{ch} = \pi(D/2)^2 \quad (24)$$

$$A_{cl} = D \left\{ (y+h) \alpha_6 + \int_{\alpha_6}^\pi [R_f^2 - (D/2)^2 - (D/2 - o)[(D/2 - o) - D \cos \alpha]]^{1/2} d\alpha \right\} \quad (34)$$

$$A_{pc} = [R_f^2 - (y+h)^2 - (D/2)^2](\pi - \alpha_4) + (D/2)^2(\pi - \alpha_5) - (D/2 - o)[R_f^2 - (y+h)^2]^{1/2} \times \left\{ 1 - \left[\frac{R_f^2 - (y+h)^2 - o(D-o)}{2[R_f^2 - (y+h)^2]^{1/2}(D/2 - o)} \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (29)$$

$$S_f = 2R_f \left\{ (y+h)(\pi - \alpha_4) - \int_0^{\pi - \alpha_4} \left[R_f^2 - \left([(D/2 - o)^2 \cos^2 \alpha + o(D-o)]^{1/2} + (D/2 - o) \cos \alpha \right)^2 \right]^{1/2} d\alpha \right\} \quad (35)$$

In the SPIE program, combustion is initiated with the products volume being considered as a very small percentage of the total volume in the cylinder ($1/10^9$). The flame geometry subroutine always starts with case 1, and through a series of tests decides which way to follow. The flame advance is determined by the flame speed model.

RESULTS

Results of simulation using the flame geometry model described in the previous section are shown next. The turbulent flame speed factor and the ignition delay angle were set according to experiments made in a single cylinder Ricardo E6 research engine. These parameters are estimated to make the pressure diagram furnished by the program coincide with the experimental one. The engine featured a bore of 76.22mm, stroke of 111.23mm, and a flat combustion chamber (disc). Running conditions were 1500rev/min, fuel/air equivalence ratio 1.0, compression ratio 8.0 and ignition at $36^\circ BTDC$. The wall temperature was assumed to be 450K, for a coolant and lubricating oil temperature of 343K. The minimum spark plug distance to the cylinder liner in the engine was $o = 7.53mm$. The turbulent flame speed factor and the ignition delay angle were kept the same for all simulated plug positions.

The influence of the plug position on the flame related parameters using the can be observed in Figs. 2 to 6. A longer combustion time duration is noticed as the plug is farther from the center position, in Fig. 2, which is a consequence of a longer flame travel path. The flame surface area (Fig. 3) and the cylinder liner contact area (Fig. 5) were more affected than the cylinder head and piston crown contact areas (Figs. 4 and 6). Central spark showed the highest flame surface area (Fig. 3), while edge spark presented the highest cylinder liner contact area (Fig. 5).

Figure 7 shows the spark plug position effects on the indicated power and mean effective pressure. It can be seen that there is no significant variation on the performance parameters when the spark plug position is altered. Figure 8 helps to explain why. Although a central plug position produces a higher peak pressure, it happens by the time the piston is in the TDC position. The volume of the cylinder contents varies little by this time, being the reason why there is no appreciable implementation on the work done. On the other hand, the peak pressure for an edge plug is smaller, but it happens when there is a bigger cylinder volume variation. In the end, the work done for all cases is approximately the same and, consequently, power and specific fuel consumption are the same as well.

It should be mentioned that this analysis was made based on a fixed spark timing for all plug positions. The engine conditions established in the simulation was set according to experiments for an edge plug, very near to the corner ($o/D = 0.099$). In real circumstances for a central plug, the spark timing could possibly have to be retarded, due to the high peak pressure shown by the simulation. This measure

might be necessary to avoid knock and structural problems on the engine.

Figure 9 shows the effects of varying plug position on exhaust hydrocarbons (HC) and nitric oxide (NO). The HC concentration is seen to be higher for a central plug, lowering as the plug is closer to the corner. Combustion chamber sources, such as crevices and fuel absorption/desorption by the lubricating oil, produces more unburned HC for higher cylinder pressures (Sodré, 1995), which is the case for a central plug. The NO formation is associated to high cylinder temperatures (Heywood, 1988), which explains why its calculated kinetic concentration is bigger for a central plug. Finally, Fig. 10 shows the results for the equilibrium concentrations of carbon monoxide (CO) and carbon dioxide (CO₂). No representative variation is noticed for any of these elements, as they are more sensitive to the mixture strength rather than to pressure or temperature (Heywood, 1988).

CONCLUSION

From the results shown for the tested conditions, in which the spark timing and the other engine variables were kept the same, it is concluded that no implement in performance is achieved by varying the plug position. Combustion takes a shorter period for a central plug, in which case higher cylinder pressures are attained. Lower HC and NO emission levels are reached if the spark plug is located in the farthest position from the center, the corner between the cylinder head and the cylinder liner. The concentrations of CO and CO₂ have shown no variation with the spark location.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank the Brazilian Government's Science and Technology body, CNPq, for the financial support to this project.

REFERENCES

- Benson, R. S., Annand, W. J. D., and Baruah, P. C., "A Simulation Model Including Intake and Exhaust Systems for a Single Cylinder Four-Stroke Cycle Spark Ignition Engine", *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 17, pp. 97-124, 1975.
- Benson, R. S., and Baruah, P. C., "A Generalized Calculation for an Ideal Otto Cycle with Hydrocarbon-Air Mixture Allowing for Dissociation and Variable Specific Heats", *IJMEE*, vol. 4, n. 1, pp. 49-81, 1976.
- Sodré, J. R., "Formulation and Experimental Validation of a Computer Model for Spark Ignition Engine Exhaust Hydrocarbons", Ph.D. Thesis, UMIST, UK, October 1995.
- Heywood, J. B., "Internal Combustion Engine Fundamentals", McGraw-Hill Book Company, Singapore, 1988.

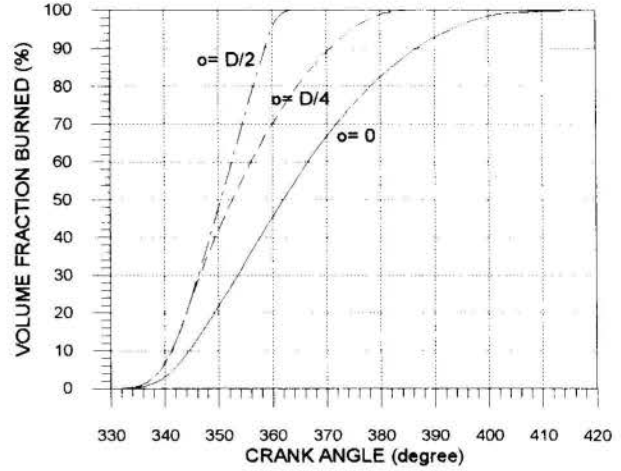


Figure 2- Plug position effect on products volume.

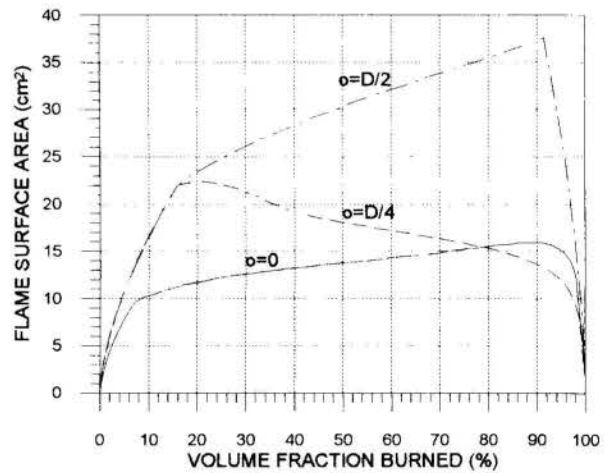


Figure 3- Plug position effect on flame surface area.

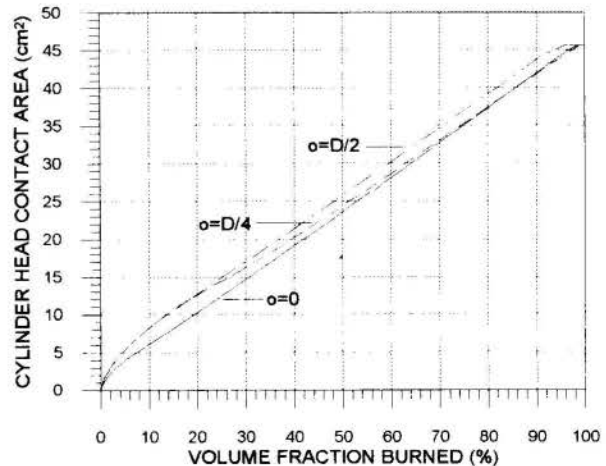


Figure 4- Plug position effect on cylinder head contact area.

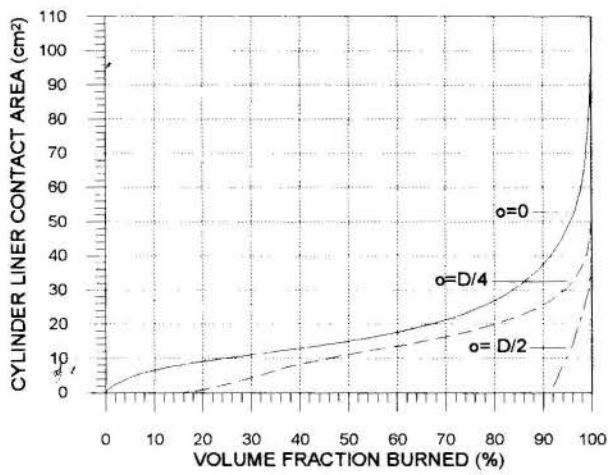


Figure 5- Plug position effect on cylinder liner contact area.

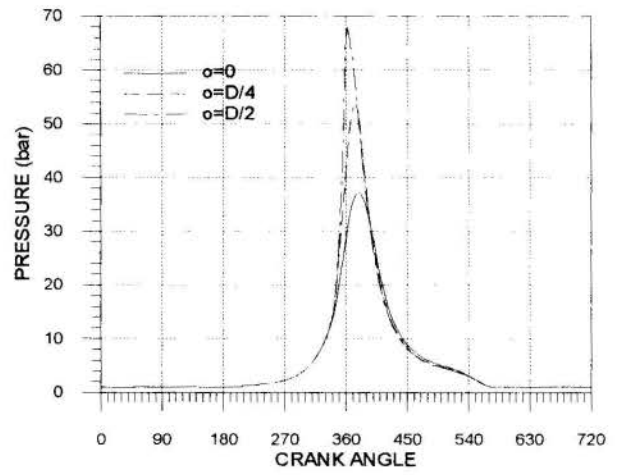


Figure 8- Plug position effect on cylinder pressure.

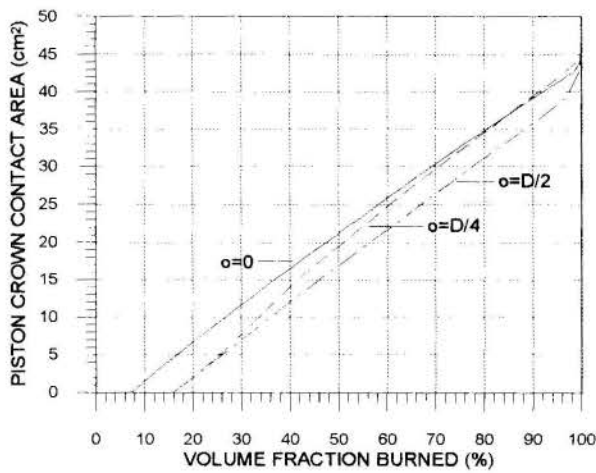


Figure 6- Plug position effect on piston crown contact area.

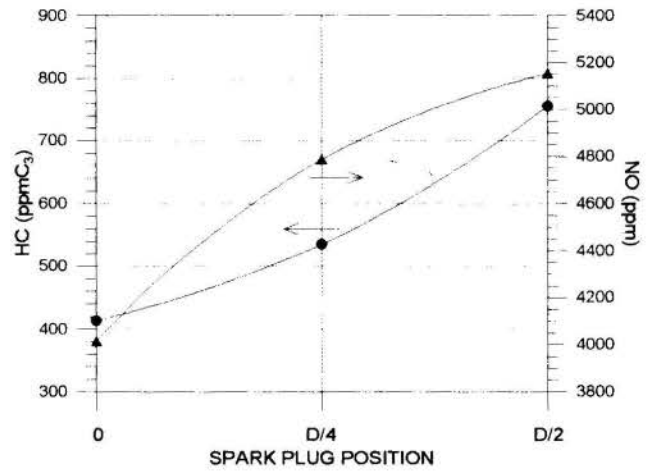


Figure 9- Plug position effect on HC and NO emissions.

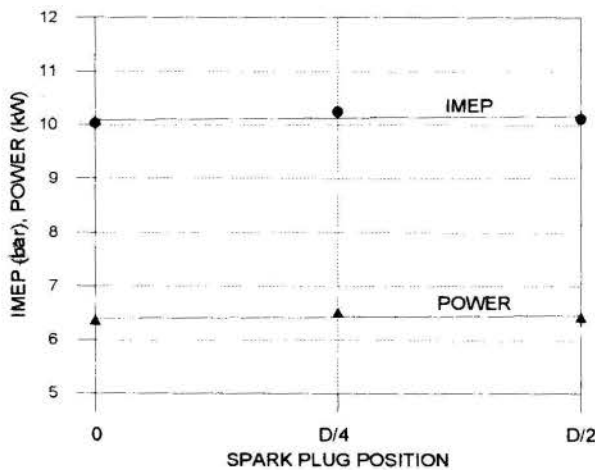


Figure 7- Plug position effect on imep and power.

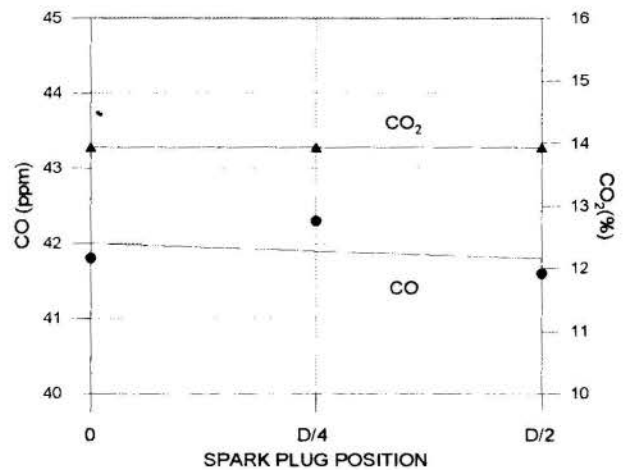


Figure 10- Plug position effect on CO and CO₂ emissions.



ESTUDIOS PARAMÉTRICOS DE LOS CICLOS DE LOS MOTORES DE ENCENDIDO POR CHISPA

Martín V., María J., Fygueroa S., Simón J., Hernández H., Domingo.
GRUMOTE. Facultad de Ingeniería. Universidad de Los Andes.
Av. Tulio Febres Cordero, Facultad de Ingeniería Tel 58-74-402928/21
Mérida - Venezuela

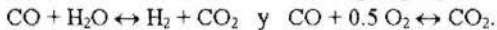


RESUMEN

Este trabajo presenta los principales resultados de una serie de estudios paramétricos obtenidos con un modelo termodinámico cerodimensional del ciclo de los motores de encendido por chispa, que utiliza como fluido de trabajo una mezcla aire-hidrocarburo y que tiene en cuenta su cambio de composición, la disociación y el equilibrio químico, así como la variación de las propiedades con la temperatura. Los resultados muestran el comportamiento de la composición de los productos con el volumen y la temperatura; de la presión media indicada, temperatura máxima y eficiencia térmica con la riqueza, así como la variación de la eficiencia térmica con la presión media indicada en función de la temperatura de la mezcla, relación de compresión y la riqueza respectivamente. Finalmente se presentan las conclusiones obtenidas.

INTRODUCCION

Para los estudios cuyos resultados se muestran en el trabajo se utiliza un programa de cálculo generalizado de los ciclos de los motores de encendido por chispa que tiene en cuenta el cambio de composición del fluido de trabajo, la disociación y el equilibrio químico de los productos de la combustión y la variación del calor específico con la temperatura, según el método postulado por Benson (1977). Se supone que se comprime una mezcla aire-hidrocarburo (C_nH_m) y se obtienen como productos de la combustión CO_2 , CO , H_2O , H_2 , O_2 y N_2 ; no se tienen en cuenta otros productos a causa de las temperaturas que entran en juego en los ciclos de los motores de encendido por chispa y porque aparecen en los gases en muy pequeña cantidad. La determinación de los productos implica, entonces, seis incógnitas; el balance de masas para cada elemento (C,H,O,N) proporciona cuatro ecuaciones, las dos restantes para que el sistema sea determinado se obtienen considerando dos reacciones de disociación, las más características son la agua-gas y la del CO:



Para obtener las propiedades termodinámicas del fluido de trabajo al final de la compresión se divide la etapa en una serie de procesos adiabáticos elementales. Aplicando la primera ley de la termodinámica y la ecuación de estado se calculan las propiedades finales del primer proceso elemental partiendo de las propiedades iniciales. Las propiedades finales de éste se toman como iniciales del segundo y se realizan sucesivas iteraciones, desde el volumen máximo hasta el volumen mínimo de la cámara de combustión.

Para calcular la temperatura máxima del ciclo, temperatura final de la combustión o temperatura de llama adiabática, T_{max} , se parte de un valor supuesto (Benson et al., 1975), se utilizan las condiciones de equilibrio químico para hallar la composición de los productos y se aplica a esta mezcla la primera ley de la termodinámica para encontrar una nueva temperatura que se compara con la supuesta. El proceso termina cuando la diferencia entre las dos temperaturas es menor que un error previamente establecido.

Las propiedades termodinámicas al final de la expansión se calculan de igual manera que en la compresión, pero se toma en cuenta el equilibrio químico.

Una vez que se ha calculado el ciclo se pueden averiguar los parámetros característicos del motor, como son: La presión media indicada (pmi), la eficiencia indicada (η) y el consumo específico de combustible indicado (g) para diferentes valores de la relación de compresión (r_c) y de la relación combustible-aire relativa o riqueza (F_r)

ALCANCE DEL ESTUDIO

El programa mediante el cual se desarrolla el estudio del ciclo termodinámico de los MECH, permite realizar varios análisis; se puede calcular un solo ciclo, para obtener como resultados los datos necesarios para graficarlo junto con la variación de la composición de los productos de la combustión durante la expansión; también se pueden variar los valores de la relación combustible-aire relativa, relación de compresión, temperatura y presión al final de la admisión, para determinar su influencia sobre los parámetros característicos del ciclo.

Los resultados que a continuación se presentan corresponden a un motor con las siguientes características: diámetro del pistón, D, 0.0824 m; carrera, c, 0.076 m; relación de compresión, r_c , variando entre 6 y 11; relación combustible-aire relativa, F_r , variando entre 0.80 y 1.43, combustible C_3H_8 , presión final de admisión, p_m , 101.3 kPa; temperatura final de admisión, T_m , 298 K.

En la Fig. 1 se muestra cómo varía la concentración de CO_2 y CO de los productos de la combustión a la temperatura máxima y al final de la expansión para diferentes riquezas.

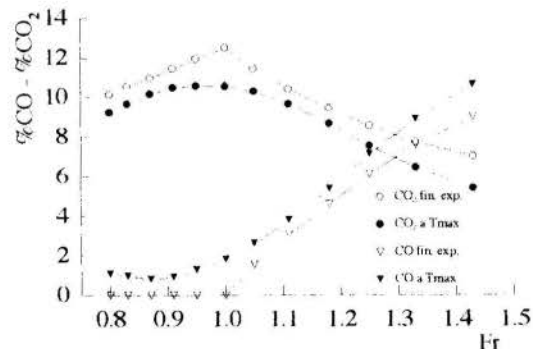


Fig. 1 Porcentajes de CO y CO_2 a T_{max} y al final de la expansión.

En esta figura se observa que el CO se encuentra presente en los productos a la temperatura máxima, aún para mezclas pobres, pero desaparece de los mismos al final de la expansión. Se nota además, que a la temperatura máxima es mayor la concentración de CO que al final de la expansión. Para el CO₂ se aprecia el comportamiento contrario, lo que implica una reasociación; es decir, que durante la expansión parte del CO se combina con el O₂ para formar CO₂. La diferencia entre la concentración de CO y CO₂ al principio y al final de la expansión es mínima para una cierta riqueza, esto se debe a que la influencia combinada de la disociación y del calor específico sobre la temperatura máxima es mínima.

La Fig. 2 muestra la influencia de la riqueza sobre la temperatura máxima del ciclo para una relación de compresión constante.

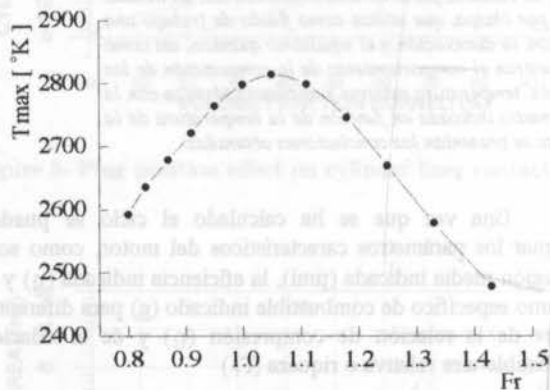


Fig. 2 Variación de T_{max} con la riqueza para $r_c=7$.

En la figura se observa que, al aumentar la riqueza aumenta la T_{max} a causa de la disminución del calor específico por la presencia del combustible, para riquezas superiores a la estequiométrica aparece un efecto contrario debido a la disociación. Por esta razón, el mayor valor de la máxima temperatura no se presenta para la mezcla estequiométrica, sino para una mezcla ligeramente rica, puesto que para esta condición, la influencia de la disociación y de la variación del calor específico con la temperatura es mínima.

Ahora se analiza la influencia de la riqueza de la mezcla sobre la eficiencia, la presión media indicada y el consumo específico de combustible.

La Fig. 3 presenta los datos de eficiencia del ciclo contra la riqueza para relaciones de compresión entre 6 y 11.

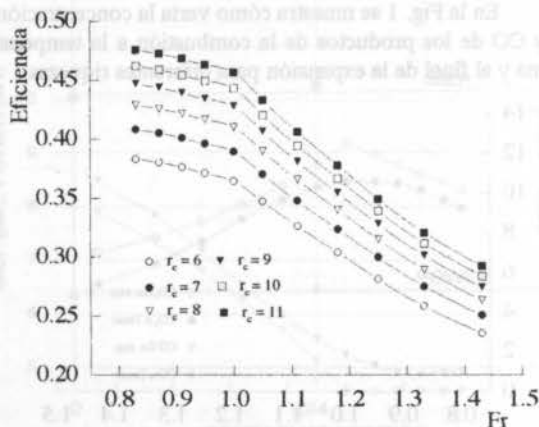


Fig. 3 Influencia de la riqueza sobre la eficiencia para varias r_c .

En esta figura se observa que para una r_c constante, la eficiencia disminuye muy poco al enriquecerse la mezcla, hasta la riqueza que produce la mayor temperatura máxima; esto se debe fundamentalmente al aumento del calor específico de los productos debido al incremento de la temperatura máxima con la riqueza. Para relaciones combustible-aire superiores la reducción, más notoria, se debe a la influencia del exceso de combustible sobre la concentración de los productos, pues al aumentar la riqueza, crece la cantidad de CO presente en estos, lo que equivale a una reducción del calor suministrado durante la combustión. Además, se observa que para una riqueza constante la eficiencia aumenta con la relación de compresión.

La Fig. 4 presenta la variación de la presión media indicada con la riqueza para diferentes valores de la relación de compresión.

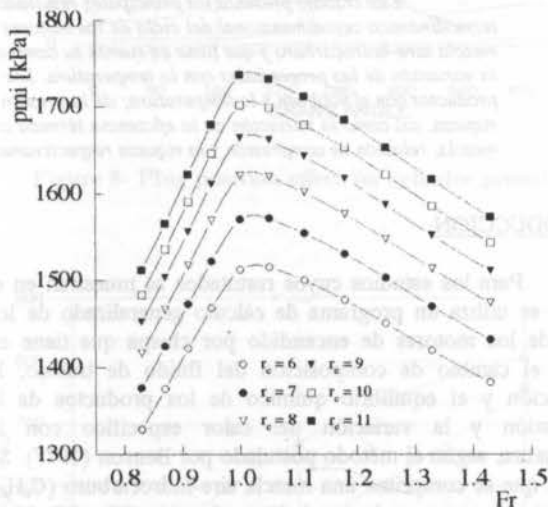


Fig. 4 Influencia de la riqueza sobre la pmi para diferentes r_c .

En esta figura se ve que la pmi aumenta con la riqueza, hasta que alcanza un valor ligeramente superior al estequiométrico y luego el comportamiento se invierte. El máximo ocurre para la riqueza que da la mayor temperatura máxima del ciclo y su valor aumenta al elevarse la relación de compresión.

En la Fig. 5 se observa la influencia de la riqueza sobre el consumo específico de combustible, g , en función de la relación de compresión.

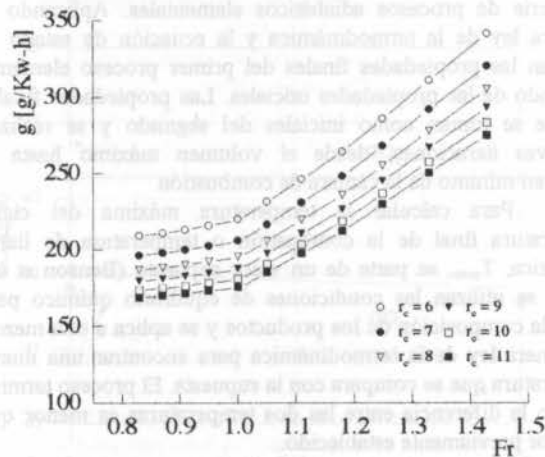


Fig. 5 Valores del consumo específico de combustible Vs. la riqueza para diferentes r_c .

La gráfica permite deducir que el consumo específico de combustible aumenta al enriquecerse la mezcla, lo que, como era de esperarse, se debe a la disminución de la eficiencia del ciclo al aumentar F_r (Fig. 3) ya que la eficiencia y el consumo específico de combustible son inversamente proporcionales.

En la Fig. 6 se presenta la variación de la eficiencia del ciclo cuando varía la relación de compresión, para diferentes riquezas.

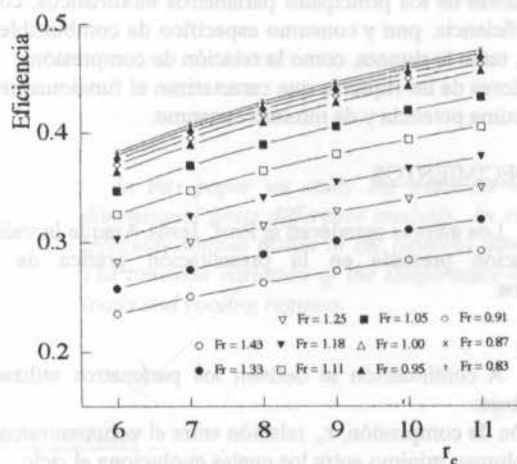


Fig. 6 Valores de eficiencia vs. r_c para diferentes riquezas.

En la figura puede observarse que la eficiencia aumenta al elevarse la relación de compresión, pero disminuye al aumentar la riqueza; también se observa que las curvas se hacen más densas cuando disminuye la riqueza de la mezcla, tendiendo a un límite.

En la Fig. 7 se muestra la influencia de la pmi sobre la eficiencia, para diferentes relaciones de compresión y riquezas.

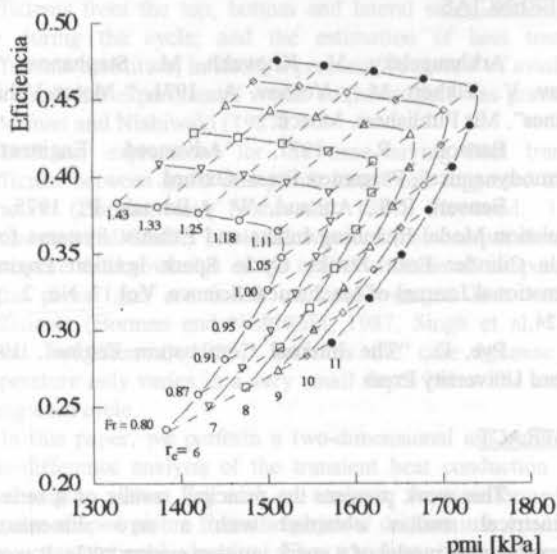


Fig. 7 Valores de eficiencia contra pmi para diferentes relaciones de compresión y diferentes riquezas.

En la figura se observa que para una relación de compresión constante, si se aumenta la pmi a partir del punto de eficiencia máxima, la eficiencia varía muy poco, hasta alcanzar el punto de máxima pmi, que corresponde a máxima potencia; enriquecimientos posteriores hacen disminuir notoriamente la eficiencia; también puede verse que a riqueza constante si

aumenta la relación de compresión, crece la eficiencia. La máxima pmi (máxima potencia) se obtiene para una mezcla rica, (Fig. 4), a causa de la disociación, con una eficiencia menor, (Fig. 5), respecto a mezclas más pobres.

La Fig. 8 muestra la influencia de la pmi sobre el consumo específico de combustible para diferentes relaciones de compresión

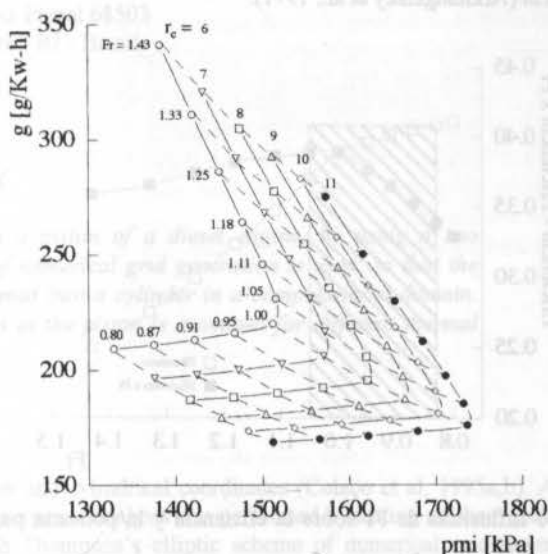


Fig. 8 Variación del consumo específico de combustible con la pmi.

En la figura se ve que para cada relación de compresión cuando se enriquece la mezcla a partir del punto de consumo mínimo, el consumo específico de combustible experimenta un ligero incremento hasta que se alcanza la máxima pmi; un posterior aumento de la riqueza incrementa considerablemente el consumo específico de combustible.

En la Fig. 9 se observa cómo varía la presión media indicada con la concentración de Oxígeno a la temperatura máxima para una relación de compresión constante.

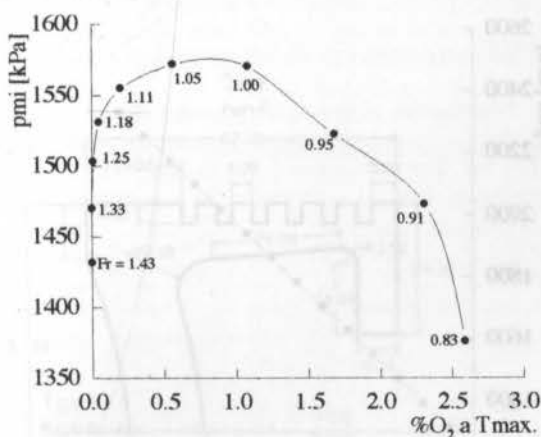


Fig. 9 Pmi vs. concentración de O_2 en los productos para T_{max} y $r_c=7$.

En esta figura puede observarse que en la mezcla estequiométrica existe aproximadamente un 1% de O_2 presente en los productos y que esta concentración se reduce a la mitad en la mezcla de máxima pmi; esto permite inferir que el parámetro que más influye sobre la conversión de la energía

química en trabajo es la cantidad de oxígeno presente en los productos y no la cantidad de hidrocarburo presente en la mezcla fresca, tal y como lo analiza Pye (1937) en sus estudios cuando establece una eficiencia térmica basada en el consumo de aire.

La Fig. 10 muestra la influencia de la riqueza sobre la eficiencia, η y el parámetro $\eta \times Fr$, que es proporcional a la potencia (Arkhangelsky et al., 1971).

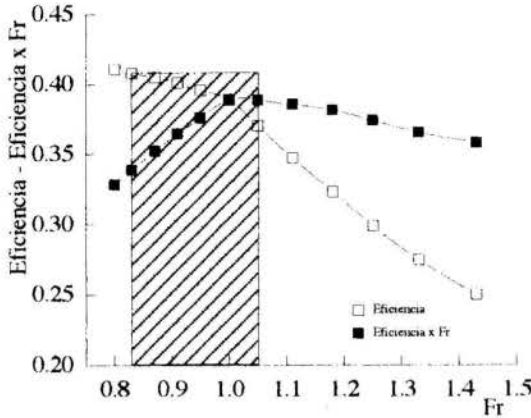


Fig. 10 Influencia de Fr sobre la eficiencia y la potencia para $r_c=7$.

En la gráfica se observa que la riqueza de máxima eficiencia y la de máxima potencia no coinciden; para una relación de compresión de 7, que es la que se analiza en la figura, la máxima eficiencia (máxima economía) se consigue para una Fr menor que la unidad, mientras que para obtener la máxima pmi (máxima potencia) Fr debe ser mayor que la unidad. El área rayada caracteriza los valores de Fr que controlan el motor entre la máxima potencia y el mínimo consumo.

En la Fig. 11 se muestra la influencia de la presión de admisión sobre la pmi, para una mezcla estequiométrica y una relación de compresión de 7.

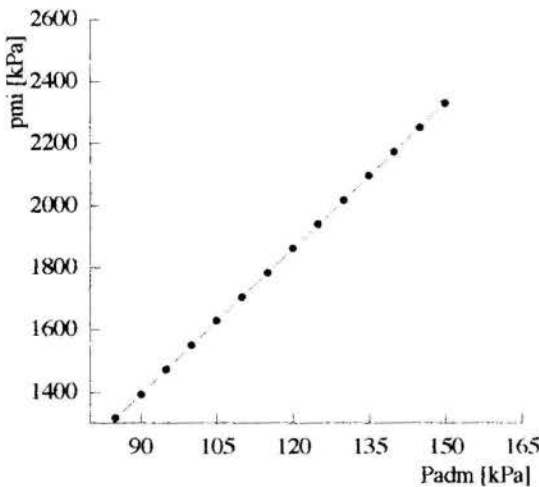


Fig. 11 Valores de presión de admisión vs. pmi para $Fr=1$ y $r_c=7$.

En esta figura se observa que al sobrealimentar el motor la pmi aumenta apreciablemente, lo cual se traduce en un aumento considerable del trabajo desarrollado por el motor.

CONCLUSIONES

Con los estudios paramétricos teóricos realizados en un MECH se pudo determinar:

- El comportamiento del contenido del CO y el CO₂ a la temperatura máxima del ciclo y al final de la expansión, para diferentes valores de la riqueza.
- La variación de la temperatura máxima del ciclo en función de la riqueza.
- Los valores de los principales parámetros motorísticos, como son, eficiencia, pmi y consumo específico de combustible, al variar, tanto la riqueza, como la relación de compresión.
- Los valores de las riquezas que caracterizan el funcionamiento de máxima potencia y de mínimo consumo.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Prof. Jesús Araque la valiosa colaboración prestada en la presentación gráfica de los resultados.

ANEXO

A continuación se definen los parámetros utilizados en el trabajo:

- Relación de compresión, r_c , relación entre el volumen máximo y el volumen mínimo entre los cuales evoluciona el ciclo
- Relación combustible-aire relativa o riqueza, Fr , relación entre la cantidad de combustible presente en una mezcla y la cantidad del mismo presente en una mezcla estequiométrica
- Temperatura máxima del ciclo, temperatura final de combustión o temperatura adiabática de llama, T_{max}
- Presión media indicada, pmi, trabajo producido por unidad de volumen desplazado por el ciclo
- Consumo específico de combustible, g , cantidad de combustible consumido para producir un trabajo unitario

REFERENCIAS

- Arkhangelsky, V., Khovakh, M., Stephanov, Y., Rusov, V., Vikhert, M. y Voinov, A., 1971, "Motor Vehicle Engines", Mir Publishers, Moscú.
- Benson, R., 1977, "Advanced Engineering Thermodynamics", Pergamon Press. Oxford.
- Benson, R.S., Annand, W. y Baruah, P., 1975, "A Simulation Model Including Intake and Exhaust Systems for a Single Cilinder Four Stroke Cycle Spark Ignition Engine", International Journal of Mechanical Science, Vol 17, No. 2, pp. 97-124.
- Pye, D., "The Internal Combustion Engine", 1937, Oxford University Press.

ABSTRACT

This work presents the principal results of a serie of parametrical studies obtained with a zero dimensional thermodynamic model of a spark ignition engine cycle. It works with a hydrocarbon-air mixture as working fluid. The model considers the composition change, the dissociation and the chemical equilibrium as well as the change of properties with temperature. The results show the temperature and volume effect on products composition, mixture richness on mean indicated pressure, maximum temperature and thermal efficiency. In addition to, the effect of the mean indicated pressure on thermal efficiency as a function of mixture temperature, compression ratio and richness. Finally conclusions are shown.

convection (third-kind) boundary conditions at all boundaries. The piston is heated through its top surface by the gases inside the combustion chamber. The gases temperature (T_{gas}) and the heat transfer coefficient between gases and piston (h_{gas}) are assumed to be constant. The piston is cooled by oil on its bottom surfaces and by a coolant fluid flowing through passages in the cylinder wall. The oil temperature (T_{oil}), as well as the heat transfer coefficient between oil and piston (h_{oil}) are supposed to be constant. The heat transfer to the coolant fluid is taken care by using a constant overall heat transfer coefficient (h_{∞}), which takes into account the heat transfer from the piston to the cylinder wall, the conduction through the wall, and the convection from the wall to the coolant fluid. The fluid temperature (T_{∞}) is assumed to be constant.

The mathematical formulation of such physical problem is given by:

$$\frac{1}{\alpha^*} \frac{\partial T(\bar{r}, t)}{\partial t} = \nabla^2 T(\bar{r}, t) \quad \text{in the region, for } t > 0 \quad (1.a)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial \bar{n}_i} = h_i(T - T_i) \quad \text{on the boundary surface } \Gamma_i, \quad (1.b)$$

for $t > 0$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{on the symmetry axis } (r = 0), \text{ for } t > 0 \quad (1.c)$$

$$T = T_0(\bar{r}) \quad \text{for } t = 0 \text{ in the region} \quad (1.d)$$

where h_i , T_i and $\frac{\partial T}{\partial \bar{n}_i}$ are, respectively, the heat transfer coefficient, the fluid temperature and the normal derivative of temperature at boundary surface Γ_i . α^* and k are the thermal diffusivity and thermal conductivity, respectively.

For the solution of the problem given by Eqs. (1) we have used the finite-difference method as described next.

ANALYSIS

The discretization of the piston presented in the figure 1 is difficult due to its irregular shape. In order to overcome such difficulty, we have transformed the irregular piston in the physical domain (z, r) into a cylinder in the computational domain (ξ, η), as shown in figure 2.

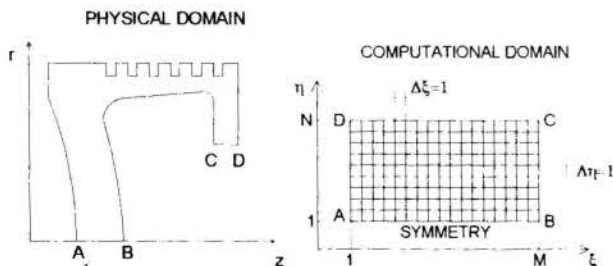


Figure 2 - Physical and computational domain

In figure 2, M and N are the number of lines of the ξ and η variables, respectively. The transformation above is defined by the solution of two elliptic partial differential equations, used to generate the finite-difference grid for the piston (Thompson et al, 1985, Maliska, 1995, Özisik, 1994). In the computational domain, such equations are given by:

$$\alpha z_{\xi\xi} - 2\beta z_{\xi\eta} + \gamma z_{\eta\eta} + J^2 [P(\xi, \eta)z_{\xi} + Q(\xi, \eta)z_{\eta}] = 0 \quad (2.a)$$

$$\alpha r_{\xi\xi} - 2\beta r_{\xi\eta} + \gamma r_{\eta\eta} + J^2 [P(\xi, \eta)r_{\xi} + Q(\xi, \eta)r_{\eta} - \frac{1}{r}] = 0 \quad (2.b)$$

where the subscripts denote partial derivatives and

$$\alpha = z_{\eta}^2 + r_{\eta}^2 \quad \beta = z_{\xi}z_{\eta} + r_{\xi}r_{\eta} \quad (3.a,b)$$

$$\gamma = z_{\xi}^2 + r_{\xi}^2 \quad J = z_{\xi}r_{\eta} - r_{\xi}z_{\eta} \quad (3.c,d)$$

$P(\xi, \eta)$ and $Q(\xi, \eta)$ are control functions, which can be used to refine the grid in regions of large temperature gradients (Thompson et al, 1985, Maliska, 1995, Özisik, 1994).

The problem given by Eqs. (1) is also transformed into the computational domain (ξ, η), where it is solved for the temperatures $T(\xi, \eta, t)$. Since the transformation given by Eq. (2) is one-to-one for a non-vanishing jacobian J , the solution $T(z, r, t)$ in the physical domain can be obtained by knowing $T(\xi, \eta, t)$. In the computational domain, problem (1) takes the form:

$$\frac{1}{\alpha^*} \frac{\partial T(\xi, \eta, t)}{\partial t} = \frac{1}{J^2} \left[\alpha T_{\xi\xi} - 2\beta T_{\xi\eta} + \gamma T_{\eta\eta} \right] + \left[\frac{PT_{\xi}}{J} + \frac{QT_{\eta}}{J} \right] \quad (4.a)$$

in $1 < \xi < M; 1 < \eta < N; t > 0$

$$\frac{k}{J\sqrt{\alpha}} (\alpha T_{\xi} - \beta T_{\eta}) = h_1(T - T_1) \quad \text{at } \xi = 1; 1 < \eta < N; t > 0 \quad (4.b)$$

$$-\frac{k}{J\sqrt{\alpha}} (\alpha T_{\xi} - \beta T_{\eta}) = h_2(T - T_2) \quad \text{at } \xi = M; 1 < \eta < N; t > 0 \quad (4.c)$$

$$(\gamma T_{\eta} - \beta T_{\xi}) = 0 \quad \text{at } \eta = 1; 1 < \xi < M; t > 0 \quad (4.d)$$

$$-\frac{k}{J\sqrt{\gamma}} (\gamma T_{\eta} - \beta T_{\xi}) = h_3(T - T_3) \quad \text{at } \eta = N; 1 < \xi < M; t > 0 \quad (4.e)$$

$$T = T_0(\xi, \eta) \quad \text{for } t = 0; 1 < \xi < M; 1 < \eta < N \quad (4.f)$$

where $h_i = h_i(\eta)$ and $T_i = T_i(\eta)$, appearing in Eqs. (4.b-c) for $i=1,2$, are the heat transfer coefficients and fluid temperatures, respectively, at each piston surface which transforms into the boundaries $\xi=1$ ($i=1$) and $\xi=M$ ($i=2$). Similarly, $h_3 = h_3(\xi)$ and $T_3 = T_3(\xi)$ are the heat transfer coefficient and fluid temperature, respectively, at each piston surface that maps into the boundary $\eta=N$.

Eqs. (2) subjected to appropriate boundary conditions were discretized by finite-differences in order to generate the grid. The program 2DGRID (Colaço et al, 1995a) was used in this paper. Such program can treat boundaries composed by line or circle segments. The program also permits the choice of either first-kind (fixed points) or second-kind homogeneous (orthogonality) boundary conditions at each surface.

The solution of Eqs. (4) for the transient temperature field $T(\xi, \eta, t)$ was also obtained by finite-differences, by using the ADI (Alternating Direction Implicit) method of Peaceman and Rachford (1955). The resulting tri-diagonal systems were solved with a vector version of Thomas' Algorithm (Ortega, 1988) in order to reduce the CPU time in the Cray J90 at COPPE. We have used the program 2DHEAT based on such vectorizable ADI method (Colaço et al, 1995b). This is a quite general program for the solution of transient linear diffusion problems in two-dimensional geometries. It is capable of treating boundary conditions of first, second or third kinds, with constants or variable coefficients, as well as source terms in the region. The program 2DHEAT was validated by comparing its results for regular geometries in rectangular, cylindrical and polar coordinates, with known analytical solutions (Özisik, 1993). We performed more than 75 tests and the relative error between numerical and analytical solutions was always less than 1% (Colaço et al, 1995b). The application of the programs 2DGRID and 2DHEAT to the transient analysis of the diesel engine piston shown in figure 1 is described next.

RESULTS AND DISCUSSION

For the results presented below, the values of various parameters were chosen as follows (Singh et al, 1986):

- (i) Initial temperature: $T_0=120^\circ\text{C}$;
- (ii) Oil temperature: $T_{oil}=50^\circ\text{C}$;
- (iii) Heat transfer coefficient to the oil: $h_{oil}=175\text{W/m}^2\text{C}$;
- (iv) Piston thermal diffusivity: $\alpha^*=0.97 \times 10^{-5}\text{m}^2/\text{s}$;
- (v) Piston thermal conductivity: $k=54\text{W/m}^2\text{C}$;
- (vi) Heat transfer coefficient to the gases in the combustion chamber: $h_{gas}=290\text{W/m}^2\text{C}$.

Other parameters of interest for the analysis were varied for the study of several test-cases. The values of such parameters appear below when required.

Before obtaining results for the piston transient temperature field by using the present numerical approach, a grid convergence analysis is required in order to assess the numerical error involved in the solution. For the same reason, an analysis of the time step used in the ADI method shall be performed.

Five different grids were generated. The number M of ξ lines and N of η lines of each grid are presented in table 1, while figure 3 shows grid G4, with M=20 and N=195.

Table 1 - Finite difference grids

Grid	M	N
G1	30	195
G2	30	163
G3	20	163
G4	20	195
G5	20	210

The temperatures of the 18 points shown in figure 4 were compared for the grids presented in table 1. Such temperatures

were obtained for time $t=10\text{ s}$ and for a water cooled engine with $h_x=1400\text{W/m}^2\text{C}$ and $T_x=85^\circ\text{C}$. The temperature of the gases in the combustion chamber was taken as $T_{gas}=800^\circ\text{C}$. The time step used was $\Delta t=1 \times 10^{-3}\text{ s}$ for grids G1 to G4; but such time step resulted in an unstable solution for grid G5. Therefore, we have used $\Delta t=0.5 \times 10^{-3}\text{ s}$ for grid G5 due to stability requirements.

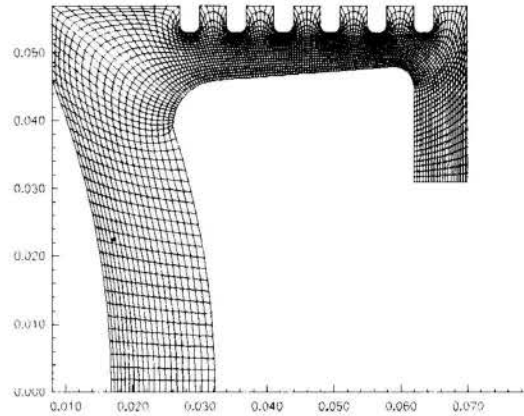


Figure 3 - Grid G4, M=20 and N=195

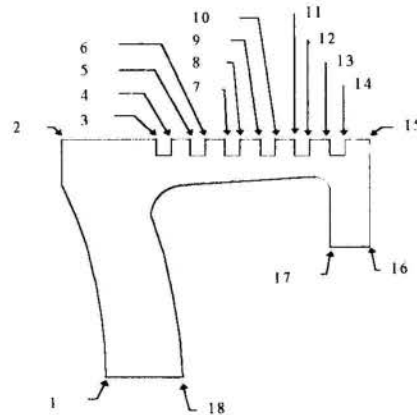


Figure 4 - Points to test the grid convergence

Table 2-Relative temperature difference in percent between grids

Point	G1-G2	G2-G3	G1-G4	G3-G4	G4-G5
1	0.024	0.002	0.002	0.027	0.001
2	0.138	0.207	0.002	0.346	1.117
3	0.348	0.061	0.124	0.412	0.941
4	1.556	0.110	0.461	1.937	1.003
5	1.600	0.115	0.483	1.999	1.022
6	1.585	0.093	0.531	2.055	1.082
7	1.642	0.094	0.556	2.139	1.086
8	1.484	0.020	0.522	2.056	1.094
9	1.511	0.031	0.534	2.108	1.109
10	1.194	0.194	0.466	1.877	1.064
11	1.220	0.220	0.450	1.915	1.082
12	0.815	0.266	0.346	1.440	0.972
13	0.959	0.304	0.285	1.565	0.965
14	0.274	0.123	0.122	0.520	0.827
15	0.445	0.224	0.074	0.747	0.753
16	0.045	0.095	0.100	0.040	0.079
17	0.056	0.159	0.244	0.029	0.080
18	0.015	0.009	0.008	0.015	0.003

The relative difference in percent for the temperatures computed with the different grids used in this study are shown in table 2. It can be noticed in columns 3 and 4 of table 2, that the temperatures vary by less than 0.56 % by using $M=30$ instead of $M=20$, either for $N=163$ or $N=195$. Thus, it appears that the grid is sufficiently converged in the ξ direction for $M=20$. On the other hand, the temperatures vary by more than 1.5 %, for several points by using $N=195$ instead of $N=163$, as shown by columns 2 and 5 of table 2. A relative difference of 1.1% is observed for few points in column 6 of table 2, by increasing N from 195 to 210 with $M=20$; but the CPU time increased by a factor of 2.2 in such case. Based on the foregoing analysis, we decided to use grid G4 with $M=20$ and $N=195$ in this study. The use of grid G5 with $M=20$ and $N=210$ was avoided so that the CPU time would not be excessively large.

The effect of the time step on the solution was also examined. The solution changed by less than 0.002% by reducing the time step from 10^{-3} s to 10^{-4} s. On the other hand, the solution became unstable when the time step was increased to 10^{-2} s. Therefore, we have used in the examples shown below the time step $\Delta t=10^{-3}$ s.

After choosing the grid and the time step, we performed an analysis of the timewise variation of the temperature in the piston for different cooling techniques and thermal loads. The test-cases studied in this paper are summarized in table 3.

Table 3 - Test-cases

Case	Coolant	$T_{\infty}(\text{°C})$	$h_{\infty}(\text{W/m}^2\text{°C})$	$T_{\text{gas}}(\text{°C})$
1	water	85	1400	800
2	water	85	1400	1000
3	water	85	1200	800
4	air	25	123	800
5	air	25	123	1000

Figures 5-9 show the variation for the temperature with time, until the steady-state is reached of selected points in the piston for cases 1-5, respectively. These figures show a temperature reduction for some of the points studied, due to the initial temperature of 120°C used in the analysis, which is larger than the oil and coolant temperatures. Such is the case for a warm engine start-up. By comparing figures 5 and 6 for a water-cooled engine, we notice an increase on the temperatures of points 1-4, when the temperature of the gases inside the cylinder increase from 800°C to 1000°C , which correspond to a larger engine speed or load. However, the temperature of points 10, 15 and 17 are very little affected by such increase on the gases temperature. This is not the case for an air-cooled engine, as can be noticed by comparing figures 8 and 9, for $T_{\text{gas}}=800\text{°C}$ and $T_{\text{gas}}=1000\text{°C}$, respectively, which shows a general increase of the temperatures in the whole piston when the gases temperature is increased. A comparison of figures 5 and 7 shows that for a water-cooled engine, the temperatures of the piston are very little affected by reducing the overall heat transfer coefficient to the cooling fluid from $h_{\infty}=1400\text{ W/m}^2\text{°C}$ to $h_{\infty}=1200\text{ W/m}^2\text{°C}$.

By comparing figures 5 and 8, we notice a general increase on the temperature levels inside the piston, when the engine cooling system uses air instead of water. This fact shows that the piston rings in the air-cooled engine are more likely to degrade due to thermal creep, than those in the water-cooled engine. Also, note that the radial temperature difference between points 1 and 2 is much larger for a water-cooled than for an air-cooled engine. This fact shows that the piston in the water-cooled engine is

subjected to higher thermal stresses than in the air-cooled engine. The conclusion above can also be drawn by comparing figures 6 and 9. Figures 5-9 also show that, for the test-cases studied, the steady-state is reached earlier for water-cooled engines than for air-cooled engines. The steady-state was reached after approximately 600s for a water cooled engine and after approximately 1000s for an air-cooled engine.

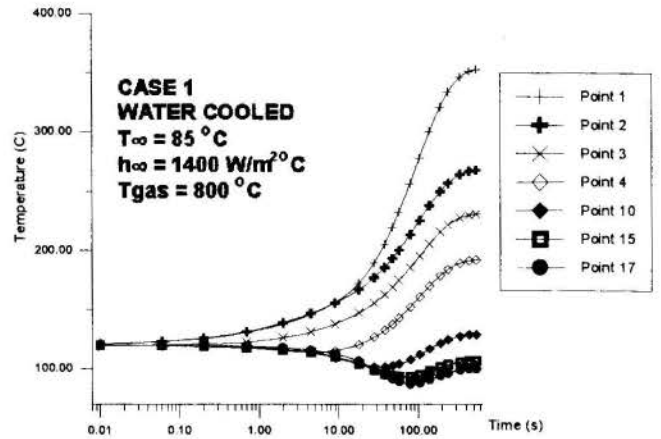


Figure 5 - Temperature variation with time for case 1

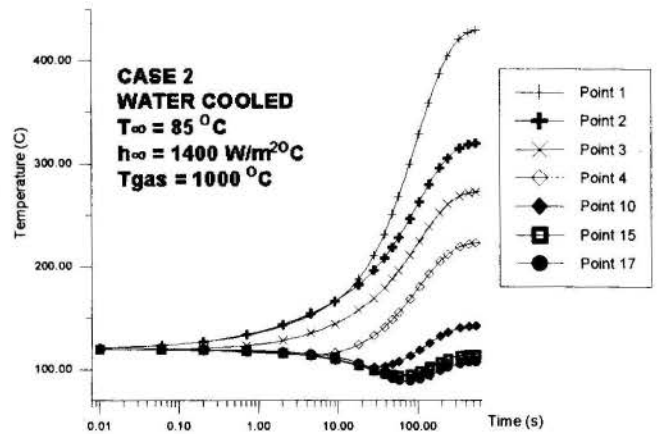


Figure 6 - Temperature variation with time for case 2

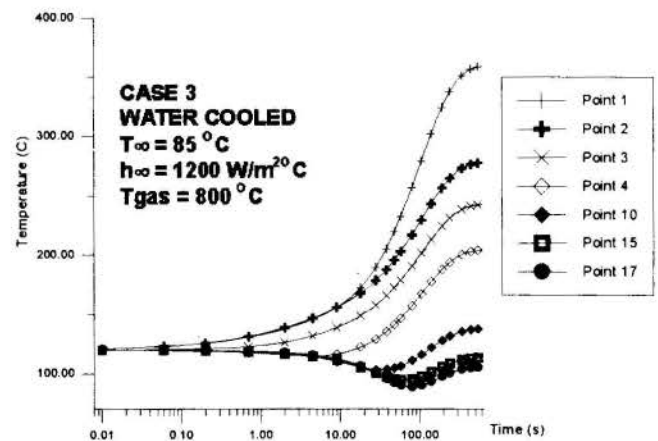


Figure 7 - Temperature variation with time for case 3

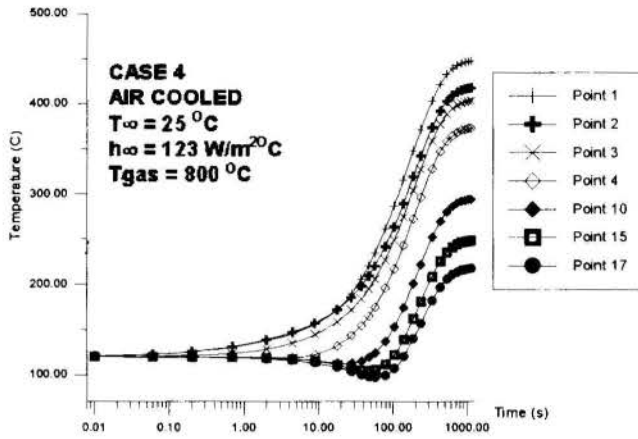


Figure 8 - Temperature variation with time for case 4

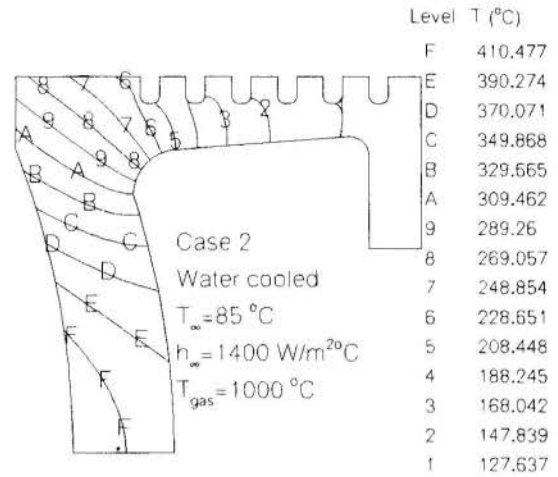


Figure 11 - Steady state temperature distribution for case 2

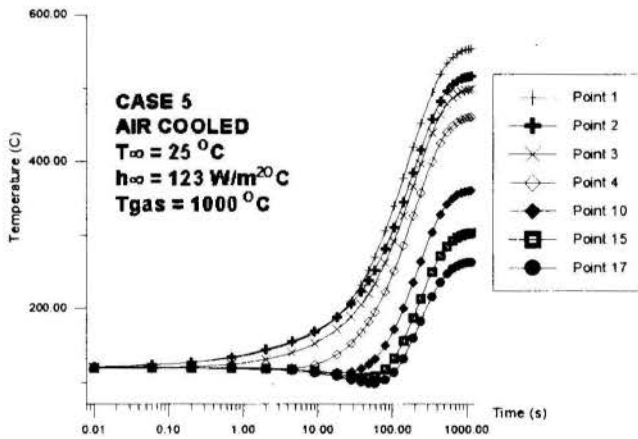


Figure 9 - Temperature variation with time for case 5

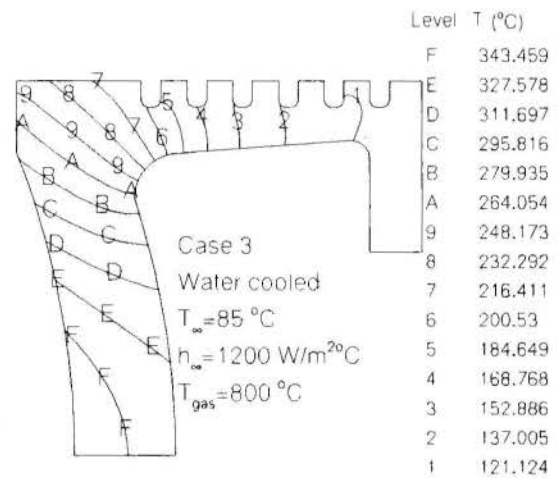


Figure 12 - Steady state temperature distribution for case 3

For illustration, the steady-state temperature distribution in the piston is shown in figures 10-14 for test-cases 1 to 5, respectively. Note in these figures the higher temperatures in the air-cooled engines than in the water-cooled engines. Also, note the higher temperature gradients in the radial direction in the top region of the piston for the water-cooled engines.

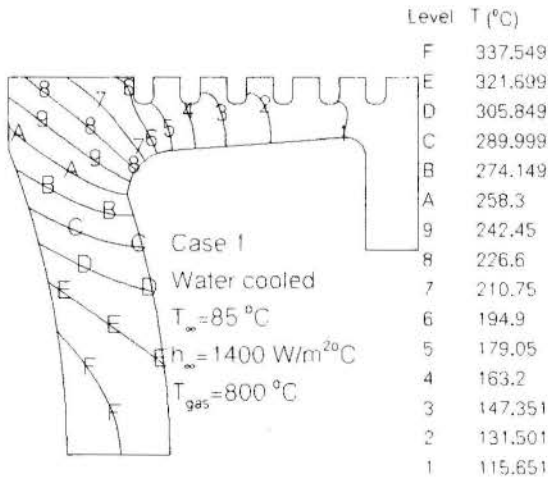


Figure 10 - Steady state temperature distribution for case 1

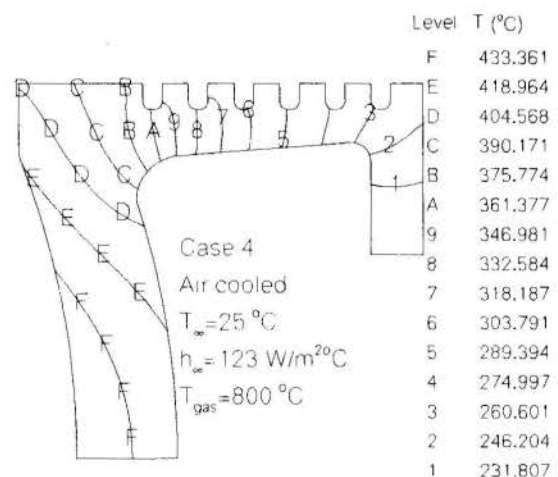


Figure 13 - Steady state temperature distribution for case 4

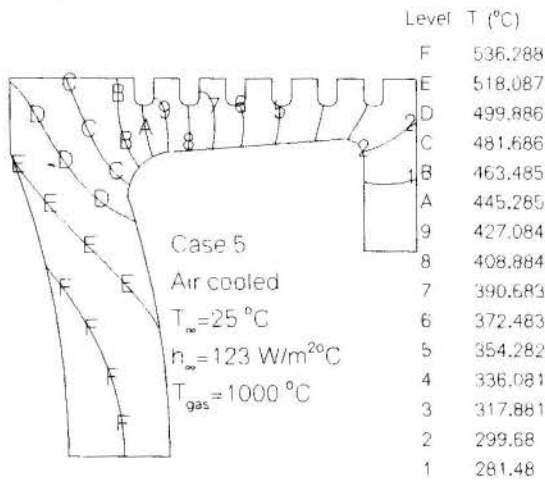


Figure 14 - Steady state temperature distribution for case 5

We have also compared the CPU times for the vectorized version of our code and for the same code with vectorization inhibited. The speed-up of the vectorized code over the non vectorized one was 5.5, on the Cray J90 at COPPE.

CONCLUSIONS

We have applied an elliptic scheme of numerical grid generation in order to solve the transient heat conduction problem in a piston of a diesel engine, subjected to time-averaged boundary conditions.

The analysis performed reveals that, for the cases studied, the steady-state was reached earlier for water-cooled engines than for air-cooled engines. The temperature levels are higher in the air-cooled engine piston; but the water-cooled engine piston is subjected to larger radial temperature gradients, and consequently, to larger thermal stresses.

The use of a vector version of Thomas algorithm to solve the tri-diagonal systems resulting from the discretization with the ADI method, resulted in a speed-up of 5.5 over a non-vector version of the same code.

Next steps to be taken as a continuation of the present work are the study of the piston subjected to time-varying boundary conditions; and the solution of the inverse problem of estimating such boundary conditions.

ACKNOWLEDGEMENT

The CPU time for this work has been provided by NACAD-COPPE-UFRJ.

REFERENCES

- Borman, Gary and Nishiwaki, Kazuie, 1987, "Internal Combustion Engine Heat Transfer", Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 13, pp. 1-46.
- Colaço, M.J., Orlande, H.R.B. and Cotta, R.M., 1995a, "Software para geração de malhas bidimensionais em geometria irregular pelo método de diferenças finitas - 2DGRID", Anais do II Congresso Regional de Estudantes de Engenharia Mecânica, UFRJ, pp.117-121.
- Colaço, M.J., Orlande, H.R.B. and Cotta, R.M., 1995b, "Software para estudo de difusão de calor em geometrias irregulares usando diferenças finitas", Anais do II Congresso Regional de Estudantes de Engenharia Mecânica, UFRJ, pp. 317-322.
- Heywood, J.B., 1988, "Internal Combustion Engine - Fundamentals", MC Graw-Hill, New York.
- Kornhauser, A.A. and Smith, J.L., 1994, "Application of a Complex Nusselt Number to Heat Transfer During Compression and Expansion", ASME J. Heat Transfer, Vol. 116, pp.536-542.
- Maliska, C.R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", LTC, Rio de Janeiro.
- Ortega, J.M., 1988, "Introduction to Parallel and Vector Solution of Linear Systems", Plenum Press, New York.
- Özisik, M.N., 1994, "Finite Difference Methods in Heat Transfer", CRC Press, Boca Raton.
- Özisik, M.N., 1993 "Heat Conduction", 2nd edition, McGraw-Hill International Editions, New York.
- Peaceman, D.W. and Rachford, H.H., 1955, "The Numerical Solution for Parabolic and Elliptic Differential Equations", J. Soc. Ind. Appl. Math, Vol.3, pp. 28-41.
- Prasad, R. and Samria, N.K., "Transient Heat Transfer in an Internal Combustion Engine Piston", 1990, Computers & Structures, Vol. 34, no. 5, pp. 787-793.
- Singh, V.P., Upadhyay, P.C. and Samria, N.K., 1986, "Some heat transfer studies on a diesel engine piston", Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 29, No. 5, pp. 812-814.
- Thompson, J.F., Warsi, Z.U.A. and Mastin, C.W., 1987, "Numerical Grid Generation", North-Holland, New York.



A SIMPLIFIED MODEL FOR IGNITION PROCESS IN A DIESEL COMBUSTION ENGINE

Fernando Fachini Filho

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE
C.Postal 01, 12630-000 Cachoeira Paulista - SP, Brazil

Amable M. Liñán

ETSI Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid
Placa Cardenal Cisneros 3, 28040 Madrid, Spain



Summary

In this work the ignition process in Diesel engines is simulated. It is assumed that the droplets follow the gas phase and their distribution in the chamber is known. Also the molecular transports are neglected in the chamber scale, which permits to describe easily the gas phase in Lagrangean coordinate. From this model it is possible to follow the ignition process through the chamber and to determine the effects of the droplets radii and temperature distributions on the ignition.

Introduction

This paper is concerned with the ignition process in the combustion chamber of Diesel combustion engines, aiming to determine the ignition delay time. This delay has great impact on the temporal change of the cylinder's pressure, which affects the noise, vibration and efficiency of the engine. Further, the understanding of the ignition process may permit the use of new fuel compositions.

Until recently the ignition problem was only studied experimentally. The first study about the influence of the temperature and pressure in the ignition delay was performed by Wolfer (1938). Since then several experimental works have been made to examine the influence of other parameters, e.g., spray and fuels characteristics, and experimental conditions (Kimamoto and Kobayashi, 1991). Nowadays, numerical studies on ignition are performed with a lot of computation time (Ramos, 1989, Reitz, Rutland, 1995).

Another way to analyse the ignition process is to take relative simple models which still include the main processes. This kind of procedure sometimes allows to obtain analytical results that help a better understanding of ignition process. In this sense, Liñán (1990) simulated the ignition in Diesel combustion engines with a non-uniform reacting mixture and pressure variation. This model is able to determine the region where the ignition occurs.

An improvement in the ignition analysis was done by Liñán and Williams (1993). They studied it in an unsteady, strained, variable-pressure fuel-air mixing, which is a common configuration found in turbulent mixing met in the combustion chamber.

In this analysis we use the Liñán's model (1990) to study the reactants mixture imposed by the droplets vaporization.

Model and Mathematical Formulation

We analyse the ignition process of a droplet cloud inside a combustion chamber with changing volume to simulate the processes often met in Diesel combustion engines.

In the model it is adopted a cylindrical combustion chamber with radius r_c , and height $l(t)$ at time t . The atomization process, which determines the distribution of number, size, velocity, and temperature of the droplets inside the chamber, is neglected, then the droplets distribution n_d is assumed known at the injection time $t = t_{inj}$. We assume that the droplets radii are very small, implying that they follow the gas phase flow, and, consequently, the droplets vaporize without being affected by the difference of velocity between the two phases.

Besides these, the fuel mass load in the combustion chamber of Diesel combustion engines is much smaller than the air mass load as a consequence of the stoichiometric condition. This fact guarantees that the distance d between droplets is very large compared to the mean droplet radius, a . Therefore the interaction among droplets does not alter the droplet vaporization rate.

An estimative of the distance d between droplets is obtained assuming uniform the droplets distribution $n_d = N/V$ throughout the chamber, where N is the total number of the droplets in the chamber of volume V . Since the volume occupied by droplet is $1/n_d$, then the distance d is $1/n_d^{1/3}$. Re-

calling that in this model we take $d \sim 1/n_d^{1/3}$ then $\gg a$.

In Diesel combustion engines the fuel is injected near the crank point where the pressure and temperature are high, consequence of the work done to reduce the volume. We consider that the gas phase temperature and pressure values are very below the critical point values. This assumption together with the zero difference between the velocities in the two phases and the large distance among the droplets justify the use of the quasi-steady state model for the droplet vaporization and combustion processes. Furthermore, it is considered the thermal conductivity of the liquid phase very large, leading to the temperature inside the droplet to be uniform, equal to the surface temperature.

We consider that the piston velocity and the gas phase velocity, which is assumed zero at the fuel injection, are much smaller than the sound speed. Therefore, it is assumed that the pressure is uniform, $P = P(t)$, in the combustion chamber.

In this problem we consider that the characteristic diffusive (or conductive) time corresponding to the chamber scale is much larger than the characteristic time of the motion of the piston t_c , therefore the molecular transports (diffusion and conduction) can be neglected in the combustion chamber scale. They are important only in the droplet scale, and are responsible for determining the droplet vaporization rate. Neglecting those processes make easier to describe the gas phase in the chamber scale in the Lagrangean coordinate system.

In this coordinate system we follow the fluid particle, which we assume with cylindrical symmetry, that at the injection time t_{inj} is between the radii ζ and $\zeta + d\zeta$. For $t > t_{inj}$ the fluid particle will be between $r(\zeta, t)$ and $r(\zeta, t) + dr(\zeta, t)$, where the function r satisfies the initial condition $r(\zeta, 0) = \zeta$ and the boundary conditions $r(0, t) = 0$ and $r(r_c, t) = r_c$.

It is assumed that each fluid particle is filled with n_d droplets per unit volume with the same radius and temperature, which correspond to the mean value of the radii a , and temperatures T_s , of the droplets. In addition n_d , a and T_s change continuously along the chamber. In the chamber scale, the gas phase sees the droplets as a source of fuel and sources of heat and sinks of oxidant if there is combustion, and the intensities of these source and sink are determined by the droplet processes analysis.

The nondimensional variables of this problem

are

$$\begin{aligned} \tau &= t/t_c, \quad x = r/r_c, \quad \xi = \zeta/r_c, \quad J = n_d/n_d, \\ \eta &= n_d/\bar{n}_{d0}, \quad \varphi = l(t)/l_0, \quad \theta = T/\bar{T}_0, \quad \varrho = \rho/\bar{\rho}_0, \\ p &= P/P_0, \quad y_O = Y_O/\bar{Y}_{O0}, \quad \text{and} \quad y_F = Y_F \end{aligned}$$

where τ , x , ξ and J are nondimensional time, position of the fluid particle at τ , its position at τ_i , and its volume in comparison of that at τ_{inj} , respectively. Also, θ , ϱ , p , y_O , y_F , ϕ , are nondimensional temperature, density, pressure, oxidant and fuel concentration and volume of the chamber at τ relatively with that at τ_{inj} . The subscript ()₀ indicates the profile or a value of certain variable at the injection time and ($\bar{\quad}$) represents the average value of the initial profile, given by

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_0 &= \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \rho \, d\Omega_0, \quad \bar{Y}_{O0} = \frac{1}{\bar{\rho}_0 V_0} \int_{V_0} \rho Y_{O0} \, d\Omega_0, \\ \bar{T}_0 &= \frac{P_0}{R_g \bar{\rho}_0} = \frac{1}{\bar{\rho}_0 V_0} \int_{V_0} \rho T_0 \, d\Omega_0, \\ \bar{n}_{d0} &= \frac{1}{V_0} \int_{V_0} n_{d0} \, d\Omega_0 \end{aligned}$$

where V_0 is the chamber volume at τ_{inj} .

The processes inside each fluid particle are described by the conservation equations (Fachini, 1992)

$$\int_0^1 2J\zeta \, d\zeta = \varphi(\tau) \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\varrho J) = \dot{m}\eta_0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\varrho J y_F) = \dot{m}\eta_0 - J\dot{\omega} \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\varrho J y_O) = -sJ\dot{\omega} \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\varrho J \theta) = -(\gamma - 1)p \frac{\partial}{\partial \tau}(J) - q_d \eta_0 + QJ\dot{\omega} \quad (5)$$

$$p = \varrho \theta, \quad (6)$$

where $Q = q/c_p \bar{T}_0$ is the nondimensional heat released from the chemical reaction per unit fuel mass, $s = \nu/\bar{Y}_{O0}$, where ν is the amount of oxidant reacting stoichiometrically with the unit mass of fuel and $\gamma = c_p/c_v$. The chemical reaction is assumed to be one-step, irreversible and following the Arrhenius kinetics, thus the reaction term is

$$\dot{\omega} = D_a \varrho y_O^n y_F^m \exp(-\Theta/\theta), \quad (7)$$

where $\Theta = E/R\bar{T}_0$, E is the activation energy, R is the universal constant of the gases, and $D_a = Bt_c \bar{Y}_{O0}^n$ is the Damköhler number, B is the frequency factor, and n and m are the global order

of the reaction. The total heat exchanging q_d between the gas phase and each droplet is

$$q_d = (\dot{m}\hat{L} - \dot{m}\gamma\theta_s + c_l/c_v \bar{Y}_{O_0}/R_{O/F} a^3 \partial\theta_s/\partial\tau) \quad (8)$$

where c_l and c_p are the specific heat of the fuel and of the air, respectively.

From the quasi-steady state model for the droplet problem, the vaporization rate \dot{m} is given by (Borghiet al. 1985)

$$\dot{m} = -\frac{\bar{Y}_{O_0}}{R_{O/F}} \frac{da^3}{d\tau} = \frac{3}{2} \frac{\bar{Y}_{O_0}}{R_{O/F}} \Delta\lambda_{v,c}a, \quad (9)$$

where $\dot{m} = \dot{M}\bar{n}_{d0}t_v/\bar{\rho}_0$, \dot{M} is the droplet vaporization rate, $a(\tau)$ is the nondimensional droplet radius scaled by the initial radius a_0 , \bar{n}_{d0} and $\bar{\rho}_0$ are references droplet number per volume and gas density, respectively, $\lambda_{v,c}$ is the vaporization rate constant for pure vaporization and for vaporization with combustion respectively, $\bar{Y}_{O_0}/R_{O/F} = 4\pi/3 \rho_l/\bar{\rho}_0 \bar{\eta}_{d0}a_0^2$ is the ratio of fuel and air masses inside the combustion chamber, $\Delta = 2 \rho_l/\bar{\rho}_0 \alpha t_c/a_0^2$ is the relation between the characteristic times of chamber volume variation t_c and of droplet vaporization, where $\alpha = k/c_p\bar{\rho}_0$ is the thermal diffusivity (k and c_p are thermal conductivity and the constant pressure specific heat of the gas phase, respectively) The value of $\lambda_{v,c}$ is

$$\lambda_v = 1/Le \ln [(1 - y_F)/(1 - y_{Fs})], \quad (10)$$

$$\lambda_c = \ln [(s + y_O)/(s(1 - y_{Fs}))^{1/Le}], \quad (11)$$

where Le is the fuel Lewis number, y_O and y_F are the nondimensional oxygen and fuel concentrations in the far region from the droplet surface, respectively, y_{Fs} the fuel concentration at the droplet surface is related with the droplet temperature θ_s by the Clausius-Clapeyron formula

$$y_{Fs} = \exp [\beta(1 - \theta_B/\theta_s)], \quad (12)$$

where θ_B is the nondimensional boiling temperature, $\beta = L/R_g T_B$, L is latent heat of vaporization, R_g is the gas constant, and T_B is the boiling temperature. The variables y_F and y_O are the local oxygen and fuel concentrations in the chamber scale determined by equations (3) and (4).

From the assumption that thermal conductivity of the liquid phase is very large, the droplet temperature is uniform. It is given by the conservation equation (Borghiet al. 1985),

$$\frac{8\pi c_l a^2 d\theta_s}{3 c_p \Delta d\tau} = (\theta - \theta_s) \frac{\lambda_{v,c}}{\exp(\lambda_{v,c}) - 1} - \frac{\lambda_{v,c}\hat{L}}{\gamma}$$

$$\text{for } \theta_s < \theta_B, \quad (13)$$

where ρ_l and c_l are the density and specific heat of the liquid, respectively, and $\hat{L} = L/c_v\bar{T}_0$ is the non-dimensional latent vaporization heat, where \bar{T}_0 is a reference temperature. θ is the nondimensional temperature far from the droplet surface determined by equation (5).

When fuel has a high value for β , which is the case of the heavy fuels, the droplets are heated with very small vaporization rate until they reach the boiling temperature and only after that they vaporize. This fact permits to treat separately the two processes. In the heating period $\lambda_{v,c} \ll 1$, then the right hand side of equation (9) is in first approximation equal to $\theta - \theta_s$.

Equations (1) to (13) must be integrated with the initial conditions, $\tau = \tau_{inj}$,

$$e_0 = \rho_0/\bar{\rho}_0, \quad y_{O0} = Y_{O0}/\bar{Y}_{O0}, \quad \theta_0 = T_0/\bar{T}_0,$$

$$y_{F0} = 0, \quad J = 1, \quad p = 1, \quad a = 1, \quad \theta_s = \theta_{s0}. \quad (14)$$

The position of the fluid particle at time $\tau > \tau_{inj}$ is determined by the equation (1) in the derivative form,

$$\partial x/\partial \xi = J\xi/\varphi x, \quad (15)$$

which must satisfy the boundary and initial conditions

$$x(0, \tau) = 0, \quad x(1, \tau) = 1, \quad x(\zeta, \tau_{inj}) = \zeta \quad (16)$$

The chamber pressure in this problem is an eigenvalue and its determination is by the imposition of the extra boundary condition (16) in equation (15).

The volume chamber variation $\varphi(\tau)$ is a known data determined by the piston motion. As $\varphi(\tau)$ near the crank point can be described by a square law in the time, we here take it as

$$\varphi(\tau) = [1 + R_c(\tau - 1)^2]/1 + R_c \quad (17)$$

where $1 + R_c$ is the relation of compression at $\tau = 1$.

Ignition Analysis

The ignition process is determined by the rapid increase of the temperature following the rapid decrease of the reactants concentration. However, the induction period, the variation of the temperature is only enough to vary the chemical reaction rate in an order of unity. As the activation energy has a high value, then that variation is small, of the order of the inverse of the activation energy. So, the temperature in the induction time can be written as (Liñán, 1974)

$$\theta = \theta_I(1 + \varepsilon\hat{\theta}), \quad (18)$$

where $\varepsilon = 1/\Theta$. The reactants variation is of the same order, so

$$y_O = y_{OI}(1 + \varepsilon \hat{y}_O), \quad y_F = y_{FI}(1 + \varepsilon \hat{y}_F). \quad (19)$$

The value $(\)_I$ represents the chamber condition at the ignition. Also, from (6) and (18), the density and the pressure can be expressed as

$$\rho = \rho_I(1 + \varepsilon \hat{\rho}), \quad p = p_I(1 + \varepsilon \hat{p}). \quad (20)$$

The vaporization rate, radius and temperature of the droplets follow the same behavior of the variables in the chamber scale (18) to (20). So that,

$$J = J_I(1 - \varepsilon \hat{J}), \quad \theta_s = \theta_{sI}(1 + \varepsilon \hat{\theta}_s),$$

$$\dot{m} = \dot{m}_I(1 + \varepsilon \hat{m}), \quad a_i = a_{iI}(1 + \varepsilon \hat{a}_i). \quad (21)$$

The time scale must be modified in order to observe the variation of the properties of the order ε and to be able to follow the processes. The new time is defined as

$$\tau = \tau_I(1 + \varepsilon \hat{\tau}) \quad (22)$$

In this new time scale the chamber's volume changes are given by

$$\varphi = \varphi_I(1 - \varepsilon \hat{\varphi}). \quad (23)$$

From (17), the expression for $\hat{\varphi}$ is

$$\hat{\varphi} = 2R_c \tau_I (1 - \tau_I) / [1 + R_c(\tau_I - 1)^2] \hat{\tau}. \quad (24)$$

Using these properties in equations (1) to (13) it is obtained

$$\int_0^1 2J_I \hat{J} \zeta \, d\zeta = \varphi_I \hat{\varphi}(\hat{\tau}) \quad (25)$$

$$\partial(\hat{\rho} - \hat{J})/\partial \hat{\tau} = \sigma \eta_{d0} \quad (26)$$

$$\partial(\hat{y}_F)/\partial \hat{\tau} = -\delta/y_{FI} \exp(\hat{\theta}) \quad (27)$$

$$\partial(\hat{y}_O)/\partial \hat{\tau} = -\sigma \eta_{d0} - s\delta/y_{OI} \exp(\hat{\theta}) \quad (28)$$

$$\partial \hat{\theta}/\partial \hat{\tau} = (\gamma - 1)\partial \hat{J}/\partial \hat{\tau} + Q\delta/\theta_I \exp(\hat{\theta}) - \chi \quad (29)$$

$$\hat{p} = \hat{\theta} + \hat{\rho} \quad (30)$$

where $\sigma = \dot{m}_I \tau_I J_I / \rho_I$, $\delta = \mathcal{D} \tau_I y_{OI}^n y_{FI}^m e^{-\Theta/\theta_I}$, and

$$\chi = \eta_{d0} [\sigma(\theta_I + \hat{L} - \gamma \theta_{sI})/\theta_I] +$$

$$c_I/c_v \bar{y}_{O0}/R_{O/F} \theta_{sI} a_{Ii}^3 / \rho_I J_I \theta_I \partial \hat{\theta}_s / \partial \hat{\tau}]$$

When the droplets number distribution is uniform in the combustion chamber, the fuel concentration is uniform too, the fluid particles have the same volume variation as the chamber volume,

and the function J becomes equal to the chamber volume, $J = \varphi(\tau)$. The distribution η_{d0} of the droplets of different radii is $\eta_{d0} = \sum_i \eta_{d0i}$. The fuel mass vaporization rate is given by $\eta_{d0}\sigma = \sum \eta_{d0i}\sigma_i$. So that the net heat, heat released by the work of compression less the heat for droplets heating and vaporization, provided to the gas phase is

$$\hat{\chi}(\tau_I) = (\gamma - 1) d\varphi/d\hat{\tau} -$$

$$\sum_{i=1}^N \left\{ \eta_{d0i} \left[\sigma_i(\theta_{Ii} + \hat{L} - \gamma \theta_{sIi})/\theta_{Ii} \right] + \frac{c_I}{c_v} \frac{\bar{y}_{O0}}{R_{O/F}} \frac{\theta_{sIi} a_{Ii}^3}{\rho_I \varphi_{Ii} \theta_{Ii}} \frac{d}{d\hat{\tau}} (\hat{\theta}_{si}) \right\} \quad (31)$$

In this case the ignition time τ_I is easily determined, it is given by the condition (Fachini 1992)

$$Q\delta(\tau_I)/\theta_I(\tau_I) = \hat{\chi}(\tau_I) \quad (32)$$

The interesting case occurs when the droplets distribution is not uniform, so that the fuel and oxygen concentrations are not uniform inside the combustion chamber. As we can see from equations (27) to (29), for studying the induction period of the ignition the fuel and oxygen concentrations are not important.

Using the condition that the fuel mass load is much smaller than the air mass load, then $\sigma \eta_{d0} \ll 1$ and, consequently, $\chi \ll 1$ which, from (29), leads to

$$\hat{\rho} = \hat{J} \quad (33)$$

in first approximation. Moreover, the gas properties change a little from the process of compression without droplets (Fachini 1992). Then, we may suppose that

$$\theta_I = \theta_{isen}(\tau_I)(1 - \varepsilon \hat{\theta}_I), \quad (34)$$

where θ_{isen} is the temperature in the isentropic conditions at $\tau = \tau_I$.

Then, the ignition problem is formulated by the energy conservation equation (29), that written as a function of the pressure is given by

$$\partial \hat{p}/\partial \hat{\tau} - \gamma \partial \hat{J}/\partial \hat{\tau} = Q D \tau_I \exp(-\Theta/\theta_{isen})/\theta_{isen} y_{OI}^n y_{FI}^m \exp(-\hat{\theta}_I) \exp(\hat{p} - \hat{J}). \quad (35)$$

The formulation is completed by the equation (25) and with the following initial condition

$$\hat{\tau} \rightarrow -\infty : \quad \hat{J} = \hat{p} \rightarrow 0 \quad (36)$$

It is more convenient to use the function U , $\hat{p}/\gamma - \hat{J}$, and the time π , defined as

$$d\pi/d\hat{\tau} = Q D \tau_I \exp[-\Theta/\theta_{isen} + \hat{p}(\gamma - 1)/\gamma]/\gamma \theta_{isen}. \quad (37)$$

Then, equation (35) written for U in the time π takes the form

$$\partial U / \partial \pi = [y_{O_I}^n y_{F_I}^m \exp(-\hat{\theta}_I)] \exp(U), \quad (38)$$

whose solution is

$$e^{-U} = C_1 - \pi y_{O_I}^n y_{F_I}^m e^{-\hat{\theta}_I} \quad (39)$$

From (37) and (39), it is found that $C_1 = 1$ and

$$U = \pi \rightarrow 0, \quad \text{as } \hat{\tau} \rightarrow -\infty \quad (40)$$

The ignition occurs when $U \rightarrow \infty$, which leads to

$$\pi_{ig} = [y_{O_I}^n y_{F_I}^m \exp(-\hat{\theta}_I)]^{-1} \quad (41)$$

As we do not know the evolution of \hat{p} , it is not possible to integrate equation (37) together with equation (40) for finding the ignition time τ_I . To avoid this difficulty \hat{p} is expressed as a function of U . For this we multiply by $2J_I \zeta$ the expression that defines the function U and integrate it in the interval 0 to 1. This procedure leads to

$$\hat{p} = \gamma \left[\hat{\varphi} + \frac{1}{\varphi_I} \int_0^1 2J_I \ln(1 - \pi y_{O_I}^n y_{F_I}^m e^{-\hat{\theta}_I}) \zeta d\zeta \right]. \quad (42)$$

Then, substituting equation (42) in the (37) and integrating it between $0 \leq \pi \leq \pi_{ig}$ and $-\infty \leq \hat{\tau} \leq 0$, the value of the τ_I is determined by

$$\bar{\delta} \int_{-\infty}^0 \exp[(\gamma-1)\hat{\varphi}] d\hat{\tau} = \int_0^{\pi_{ign}} \exp \left\{ \frac{(\gamma-1)}{\varphi_I} \left[\int_0^1 J_I \ln(1 - \phi Y_{O_I}^n Y_{F_I}^m e^{\hat{\theta}_I}) 2\zeta d\zeta \right] \right\} d\phi \quad (43)$$

where $\bar{\delta} = QD\tau_I \exp(-\Theta/\theta_I) / \gamma\theta_I$. Observe that the left hand side of this expression is the heat released by the work of reducing the chamber volume, and the right hand side of it is the heat generated by the chemical reaction.

Results and Comments

It is presented now an example of the combustion inside a Diesel engine. The fuel is that the molecular weight is 184 g/mol, the latent heat of vaporization is 300 cal/g, the liquid specific heat is 0.42 cal/gK, the boiling temperature is 508 K, and the stoichiometric ratio oxygen and fuel masses ν is 3.16 (Taylor, 1985). It is taken $c_p = 0.2489$ cal/gK, $c_v = 0.1844$ cal/gK, $D_a = \exp(10)$, $\Theta = 21$, $R_c = 10$. The initial droplets distribution is $\eta_0 = (1 - 0.9\zeta)/0.55$, the ratio of oxygen and fuel masses $R_{O/F}$ is 7 and the initial droplet radius is such that $\Delta = 5.625$. The initial temperature of the gas phase is such that

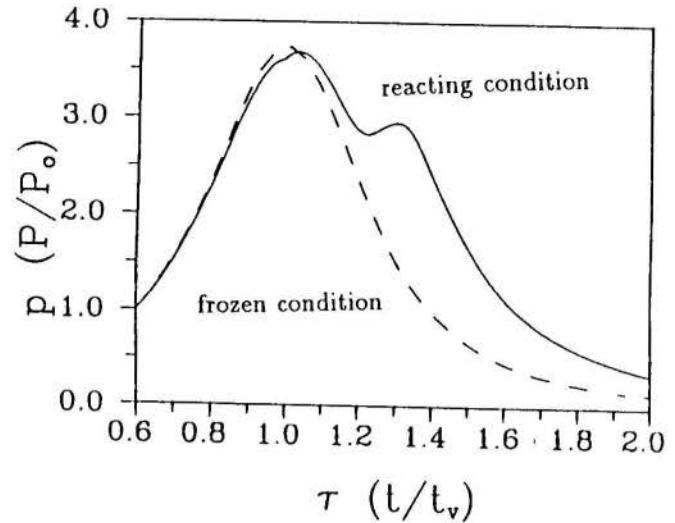


Figure 1: Chamber pressure variation with time.

with the volume reduction of a factor 11 the temperature reaches the value of 1050 K if the process were isentropic, and the initial temperature of the droplets is 300 K.

In these conditions, the behavior of the pressure in the combustion chamber is according to figure 1.

The imposed initial droplets distribution has a simple linear variation with the chamber radius, where the largest droplets density is at the center. So that, in that position with the droplets vaporization the fuel concentration will be larger than other position. Then, the ignition occurs there first as it is showed in figure 2, since the gas phase temperature is assumed uniform, remaining so until the ignition. After ignition the chamber temperature increases depending on the fuel concentration, as we can see in figure 3.

Conclusion

The simplified treatment of the ignition analysis for a nonuniform chamber temperature is possible because the combustion in a Diesel combustion engine occurs with very large air-fuel mass ratios, which leads to a small variation of temperature from the isentropic value.

The model can be also used for studying the influence of main parameters on the vaporization, ignition and combustion processes of the droplets, which allows to follow the pressure behavior in the chamber.

Without losing simplicity, it is possible to improve this model including the effect of the difference of the velocities between the two phases and the turbulence in the droplet vaporization rate.

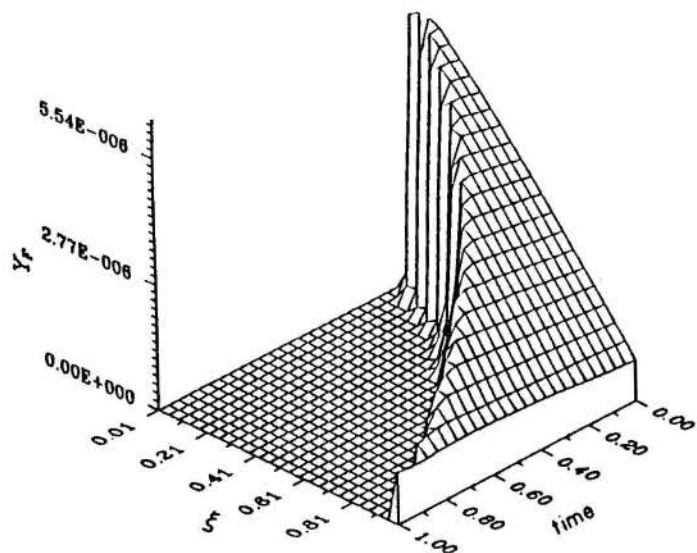


Figure 2: Behavior of the fuel concentration during the ignition in the chamber, the period of ignition is $0.9926 \leq \tau \leq 0.9972$, but it is represented between 0 to 1.

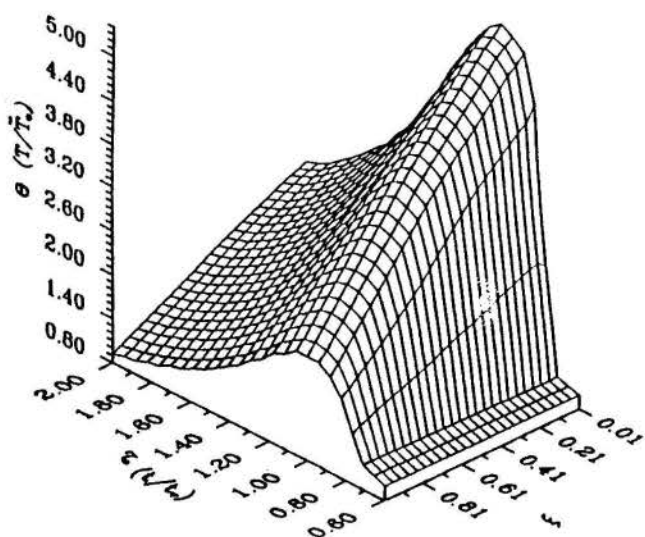


Figure 3: Behavior of the temperature inside the chamber.

Another step is to take the heat and mass molecular transport between fluid particles and with the chamber wall.

Acknowledgements This work was supported by Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico - CNPq under the Grant 200554/83.

References

1. Borghi, R., Clavin, P., Liñán, A., Pelcé, P. e Sivashinsky, G., Modélisation des phénomènes de combustion, Collection de la Direction des Études et Recherches D'Électricité de France, Editions Eyrolles, Paris, 1985.
2. Fachini F.F., Vaporización y combustión de gotas aisladas y en grupo, *Doctoral Thesis*, Universidad Politécnica de Madrid, Spain, 1992.
3. Liñán, A., The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies, *Acta Astronautica*, vol. 1, pag. 1007-1039, 1974.
4. Liñán, A., Ignition of a Non-Uniform Mixture in a Chamber of Variable Volume, Private Communication, 1990
5. Liñán, A., Williams, F.A., Ignition in an Unsteady Mixing Layer Subject to Strain and Variable Pressure, *Combustion and Flame*, vol. 95, pag. 31-46, 1993.
6. Kimamoto, T., Kobayashi, H., Combustion Processes in Diesel Engines, *Progress in Energy and Combustion Science*, Pergamon/Elsevier Science Ltd, Oxiford, UK, vol. 17, pag 163-189, 1991.
7. Ramos, J.I., Internal Combustion Engine Modelling, *Hemisphere Publishing Corporation*, New York, chap. 3, pag. 97-235, 1989
8. Reitz, R.D., Rutland, C.J., Development and Testing of Diesel Engine CFD Models, *Progress in Energy and Combustion Science*, Pergamon/Elsevier Science Ltd, Oxiford, UK, vol. 21, pag 173-196, 1995.
9. Taylor, C.F., The Internal Combustion Engines in Theory and Practice, *The MIT Press*, Boston, Massachussets, pp. 120-121, 1985.



MODELADO Y SIMULACIÓN DE MOTORES DE ENCENDIDO POR CHISPA DE CUATRO TIEMPOS

Jesús F. Morea-Roy; Mariano Muñoz; Francisco Moreno; Alfredo González
Laboratorio de Análisis de Motores. CIRCE.
Centro Politécnico Superior. Universidad de Zaragoza
50015 - Zaragoza - España



RESUMEN

Se presenta un modelo termodinámico multizona que se ha utilizado para predecir el comportamiento de un motor de encendido por chispa (ECH) de cuatro tiempos. El modelado incluye blowby, renovación de la carga, transferencia de calor, un exhaustivo análisis de la composición de los gases así como de sus propiedades termodinámicas y de transporte. El proceso de combustión se caracteriza mediante leyes empíricas ajustadas experimentalmente.

INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas se han desarrollado una gran variedad de modelos que describen la evolución del fluido dentro del cilindro de un motor de encendido por chispa (ECH) de cuatro tiempos. Estos modelos se pueden clasificar en dos grupos principales: termodinámicos y fluidodinámicos o dimensionales dependiendo de la resolución espacio-temporal del campo de flujo. Los modelos termodinámicos pueden clasificarse en dos subgrupos: modelos de una zona y multizona de acuerdo con el número de fases en las cuales la carga contenida dentro el cilindro es dividida. Del mismo modo, los modelos dimensionales pueden dividirse en uni y multidimensionales en función del número de dimensiones espaciales que analizan.

La elección de un tipo u otro de modelado supone conjugar una serie de factores como son el conocimiento del proceso que realmente tiene lugar en el M.C.I.A., la obtención de datos experimentales que permitan comprobar los resultados obtenidos computacionalmente y el grado de exactitud deseado del modelo conjugado con el gasto computacional que lleva.

Con el modelo que aquí se presenta se ha pretendido conseguir un cálculo razonablemente preciso y predictivo en el cilindro sin un excesivo incremento en el tiempo de cálculo a la vez que se analizan todos los fenómenos que tienen lugar dentro de él. Como criterio básico se ha intentado analizar por separado cada uno de los fenómenos que tienen lugar dentro de un ECH con objeto de conseguir una modularidad que permita posteriores mejoras. Consecuencia de esta modularidad es el hecho de una posible transformación a un modelo dimensional.

El modelo desarrollado permite simular distintos tipos de combustible con diferentes composiciones de aire realizando un exhaustivo análisis de la composición y de las propiedades termodinámicas de la mezcla de gases contenida dentro del cilindro, considerando un total de 13 especies químicas diferentes. Asimismo permite emplear diferentes correlaciones para el cálculo de la transferencia de calor (tanto convectiva como radiativa) y de las propiedades de transporte a la vez que permite simular diferentes leyes de quemado ya sea mediante leyes empíricas con coeficientes variables o bien ajustadas a partir del análisis de diagramas presión-volumen obtenidos experimentalmente. Del mismo modo se realiza un modelado

termodinámico para analizar el flujo de masa a través de las válvulas de admisión y escape y las pérdidas por blowby.

ESTRUCTURA DEL MODELO

El modelado termodinámico de los gases contenidos dentro del cilindro se realiza considerando un sistema abierto. El modelo es apropiado tanto cuando el gas contenido dentro del sistema puede considerarse uniforme en composición y estado en cada punto e instante de tiempo, como cuando el estado y la composición varían de un instante a otro debido a la transferencia de calor, transferencia de trabajo y de flujo de masa a través de la frontera del sistema y/o desplazamiento de la frontera. Las ecuaciones fundamentales que se utilizan para modelar un sistema como el mencionado son la ecuación de conservación de la masa Eq. (1) y la primera ley de la termodinámica Eq. (2).

$$\dot{m} = \sum_j \dot{m}_j \quad (1)$$

$$\delta \dot{Q} - \delta \dot{W} + \sum_j h_j \cdot dm_j = \frac{dU}{dt} \quad (2)$$

de tal modo que a partir de la integración en el tiempo de Eq. (1) y Eq. (2) se puede calcular la evolución del estado de los gases presentes en el cilindro en función del ángulo girado por el cigüeñal.

Desde un punto de vista meramente termodinámico se pueden distinguir una serie de procesos claramente diferenciados a lo largo de los 720 grados que dura el ciclo operativo de un ECH de cuatro tiempos (Heywood, 1988). Estos procesos son: proceso de compresión, combustión, expansión, escape y admisión.

El proceso de compresión comprende el intervalo de tiempo que va desde que se cierran las válvulas de admisión hasta que comienza el proceso de combustión. La mezcla de gases que se comprime está formada por una mezcla aire combustible y gases residuales y reciclados de escape.

Durante este proceso la mezcla contenida dentro del cilindro intercambia masa con el exterior a través de los segmentos del cilindro. Además existe una transferencia de calor entre los gases y la pared interior del cilindro, culata y cabeza del pistón,

y el pistón realiza un trabajo sobre los gases al comprimirlos. Durante la compresión, en el cilindro se tiene una única zona de modo que solo existe una única presión p y una única temperatura T .

El proceso de combustión en un motor ECH tiene lugar cuando salta la chispa en la bujía, aproximadamente unos 20° antes de que el pistón alcance el punto muerto superior. Este proceso dura hasta que se quema el combustible contenido dentro de la cámara.

Durante la combustión el estado termodinámico y la composición del gas quemado es no uniforme ya que se tienen diferentes zonas de masa quemada y no quemada a diferentes temperaturas. Un análisis de la combustión en M.E.P. bajo el enfoque del Primer Principio, o lo que es lo mismo, bajo un modelado termodinámico, es capaz de cuantificar estos estados del gas (Ramos, 1989).

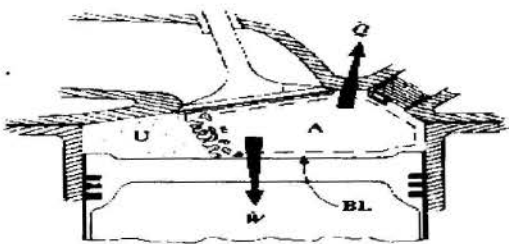


Figura 1 - Esquema de la llama en un ECH durante el proceso de combustión. U zona no quemada, A zona quemada, W trabajo, Q flujo de calor transferido hacia las paredes (Heywood, 1988).

El modelo multizona desarrollado considera la geometría de la cámara de combustión y la presencia de los gases quemados y los no quemados (figura 1). En este modelo, la mezcla contenida en el cilindro se divide en dos zonas, quemados y no quemados, los cuales están separados por una superficie discontinua (la llama) de volumen despreciable. Durante un diferencial de ángulo de giro, existe transferencia de masa de la zona de no quemados U hacia la zona de quemados A . La temperatura y composición de los gases quemados y no quemados son diferentes, y la presión es uniforme a través de la cámara de combustión. Asimismo no hay transferencia de calor entre la zona quemada y no quemada. Si bien puede parecer que este modelo es extremadamente simple, los datos experimentales muestran que estas suposiciones están bien justificadas (Ferguson, 1986; figura 6).

El proceso de expansión tiene lugar después del proceso de combustión. Este proceso dura hasta justo antes de la apertura de la válvula de escape. Este proceso es idéntico al proceso de compresión salvo que ahora se produce una expansión de la mezcla contenida dentro del cilindro dando lugar a un trabajo sobre el pistón. La mezcla está formada por los productos de combustión del combustible con el aire, los cuales se encuentran a una presión y temperatura elevada.

El propósito de los procesos de escape y admisión es renovar la carga de gases quemados que hay al final de la carrera de potencia y admitir carga fresca para el próximo ciclo. Debido a que la apertura de las válvulas no es instantánea, a la variación de volumen dentro del cilindro, a los efectos de inercia de la masa gaseosa y a los fenómenos de propagación de ondas dentro del sistema de admisión y escape, la presión en la admisión, cilindro y escape durante estos procesos varían de una forma complicada. El modelo elegido para analizar el proceso de renovación de la carga en un ECH corresponde al modelo cuasiestacionario. El modelo cuasiestacionario considera al

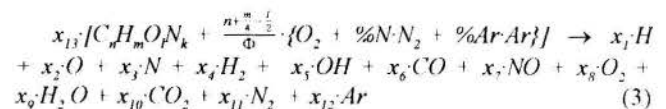
motor como un conjunto de elementos (colectores de admisión y escape, cilindro, compresor, turbina, etc.) interconectados en serie, considerando que el flujo a través de cada uno de ellos se comporta como estacionario durante cada intervalo de tiempo analizado pero variable de uno a otro. Asimismo, no considera los fenómenos de inercia de la masa gaseosa ni las ondas de presión que se propagan en los conductos. La no consideración de este último fenómeno no supone una fuente de errores importante (Reyes, 1993).

Dependiendo pues del proceso que se este considerando se deben evaluar unos términos u otros en las ecuaciones Eq. (1) y Eq. (2). Esto ha hecho que se hayan desarrollado una serie de submodelos que son: modelo para el cálculo de la composición de los gases (mezcla de gases quemados o mezcla de aire más combustible más residuales y reciclados de escape) así como el cálculo de las derivadas parciales de las fracciones molares con respecto a la presión, la temperatura y el dosado relativo. Cálculo de las propiedades termodinámicas y de transporte tanto para un gas individual como para una mezcla de gases. Submodelo para el cálculo de la transferencia de calor (radiativa y convectiva), análisis del flujo de masa (proceso de renovación de la carga y pérdidas por blowby), submodelo para el cálculo de la fracción de masa quemada y submodelo para el cálculo de parámetros geométricos como son la superficie de contacto de los gases, volumen de cada zona, etc.

COMPOSICIÓN DE LOS GASES

El conocimiento de las fracciones molares de cada uno de los gases que compone la mezcla de gas total es necesario para calcular las propiedades termodinámicas y de transporte de la mezcla. Para calcular las fracciones molares debe distinguirse entre dos tipos de mezcla de gases: mezcla formada por aire más combustible, gases residuales y reciclados de escape denominada mezcla de gases no quemados y una segunda mezcla formada por los productos de combustión del aire con el combustible denominada mezcla de gases quemados.

Mezcla de Gases Quemados. El cálculo de las fracciones de gases quemados se realiza a partir de Eq. (3) de modo que en equilibrio termodinámico las fracciones molares de los productos de combustión son función de la presión, la temperatura y el dosado relativo.



Los productos de combustión a bajas temperaturas (1700K) para mezclas pobres son O_2 , N_2 , H_2O , CO_2 y Ar , y para mezclas ricas H_2 , CO , N_2 , H_2O , CO_2 y Ar . Para temperaturas superiores (Horlock and Winterbone, 1986) se deben considerar todos los productos de combustión indicados en Eq. (3) tal y como se puede observar en la figura 2. Para la resolución de las ecuaciones se considera además de las ecuaciones de balance atómico para cada elemento, siete ecuaciones de equilibrio químico. El método de resolución se basa en la reducción del sistema de ecuaciones no lineales a otro de sólo dos ecuaciones dependientes de x_{13} y $b = x_7/x_8$. Esta resolución es distinta a la presentada por Olikara y Borman (1975) de modo que es más rápida en tiempo de cálculo además de no presentar los problemas de mal condicionamiento de la matriz entorno a dosados relativos comprendidos entre 1 y 1.1 que son los dosados relativos típicos de funcionamiento de un ECH.

El cálculo de las derivadas de las fracciones molares con respecto a la presión, temperatura y dosado relativo se realiza derivando el sistema de ecuaciones no lineales que permiten calcular las fracciones molares de los productos de combustión y resolviendo el sistema que se obtiene.

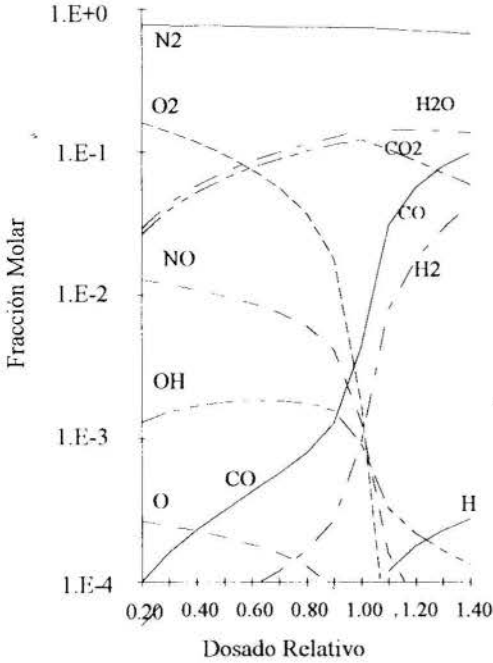


Figura 2 - Resultados obtenidos de las fracciones molares de los productos de combustión en equilibrio de una mezcla aire - isooctano en función del dosado relativo a 30 atms y 2250 K.

Mezcla de Gases No Quemados. El otro tipo de mezcla a considerar es la formada por el aire, el combustible, los gases residuales y los gases reciclados de escape (durante los procesos de compresión y admisión).

Las fracciones molares de los gases que forman una mezcla de aire más combustible se pueden obtener a partir de Eq. (3). Para calcular las fracciones molares de una mezcla aire más combustible que contiene una fracción en peso f de gases reciclados y de escape se debe aplicar Eq. (4)

$$y_i = y_i' (1 - y_r) + y_i'' y_r \quad (4)$$

donde y_i es la fracción molar de los productos de combustión en la mezcla aire más combustible y y_i' y y_i'' son las fracciones molares de un gas i cualquiera en la mezcla de aire-combustible y de productos de combustión respectivamente.

PROPIEDADES TERMODINÁMICAS

Para evaluar Eq. (2) es necesario conocer la energía interna u , la entalpía h , los calores específicos a presión c_p y volumen constante c_v , la relación de estos calores específicos γ y el peso molecular P_m en la zona de quemados y no quemados tanto para cada gas que compone la mezcla como para la mezcla de gases.

El modelo usado para predecir las propiedades termodinámicas considera una mezcla *frozen* en la zona no quemada y una mezcla en equilibrio termodinámico en la zona quemada (Carreras et al., 1993). El modelo de cálculo de las

propiedades está basado en curvas polinomiales del tipo de la ecuación Eq. (5) que fijan las propiedades termodinámicas a partir de las tablas JANAF (1971)

$$c_{p,i} = A_{1,i} + A_{2,i}T + A_{3,i}T^2 \quad (5)$$

Los coeficientes A_i son fijos y distintos para cada especie. Por integración de Eq. (5) se obtiene la entalpía específica de cada especie. Una vez obtenidas estas dos propiedades termodinámicas para cada especie y conocida la composición, el cálculo de las propiedades termodinámicas consiste en la suma de las propiedades de cada especie ponderada con la fracción molar de cada una de ellas Eq. (6)

$$W = \sum_i w_i \cdot x_i \quad (6)$$

donde W es una cualquier propiedad termodinámica de la mezcla.

Señalar que para aplicar el primer principio de la termodinámica Eq. (2) se deben de evaluar las derivadas con respecto a la presión, la temperatura y el dosado relativo de la energía interna específica, entalpía específica y de la constante R de los gases. Dichas derivadas se calculan sin más que derivar en Eq. (6).

PROPIEDADES DE TRANSPORTE

Las propiedades de transporte que se analizan son la viscosidad y la conductividad de la mezcla de gases contenidos en el interior del cilindro. Estas propiedades físicas juegan un papel importante en los fenómenos de transferencia de masa, de calor y de momento de una parte del sistema a otra.

La carga del motor está constituida siempre por una mezcla de gases y en relación a ello hay que señalar que las propiedades físicas antes mencionadas no son aditivas, siendo notable la desviación en el caso de que las propiedades de los componentes sean muy diferentes entre sí.

La viscosidad de una mezcla de gases puede calcularse a partir de la ecuación Eq. (7)

$$\mu_{MEZCLA} = \frac{\sum_{i=1}^n \mu_i x_i}{\sum_{j=1}^n x_j \Psi_{ij}} \quad (7)$$

donde x_i es la fracción molar de cada gas, μ_i la viscosidad de cada gas y Ψ_{ij} una función de los pesos moleculares y viscosidades de los gases que forman la mezcla (Reid et al. 1987).

La conductividad térmica de una mezcla de gases puede definirse de forma análoga a la realizada para la viscosidad de una mezcla de gases. Entre las diferentes correlaciones que se han implementado destacan la de Wassiljewa, la de Heywood y la de Ferguson.

TRANSFERENCIA DE CALOR

Las diversas formas de transferencia de calor que se analizan son la transferencia de calor por convección y por radiación entre el gas contenido dentro del cilindro y las paredes que lo rodean. Se considera tres temperaturas fijas para las paredes que rodean al gas contenido dentro del cilindro. Estas tres temperaturas están asociadas a la culata, paredes del cilindro y cabeza del pistón.

Para calcular la transferencia de calor mediante convección se considera un coeficiente convectivo h_c promediado superficialmente siendo diferente para cada zona (Pucher, 1986). Se consideran diversas correlaciones semiempíricas para calcular el coeficiente de transferencia de calor convectivo h_c en motores. Todas ellas se basan en la definición dada por Eq.(8).

$$\left(\frac{h_c \cdot L}{k}\right) = const \cdot \left(\frac{\rho \cdot v \cdot L}{\mu}\right)^m \cdot \left(\frac{\mu \cdot c_p}{k}\right)^n \quad (8)$$

Dentro de la familia de correlaciones se han implementado distintas expresiones como las propuestas por Woschni, Annand o Eichelberg (Muñoz and Payri, 1989).

El cálculo de la transferencia de calor radiativa solo se considera en la zona de quemados durante los procesos de combustión y escape. Para el cálculo de la misma se han implementado las correlaciones de Annand y de Flynn.

FLUJO DE MASA

Los flujos de masa que se consideran en un ECH son los asociados al proceso de renovación de la carga y el flujo de masa asociado a las pérdidas por blowby.

Pérdidas por Blowby. Se puede considerar que el flujo de masa tiene lugar siempre en dirección del cilindro hacia el carter y que es proporcional a la masa contenida en el cilindro (Ferguson 1986).

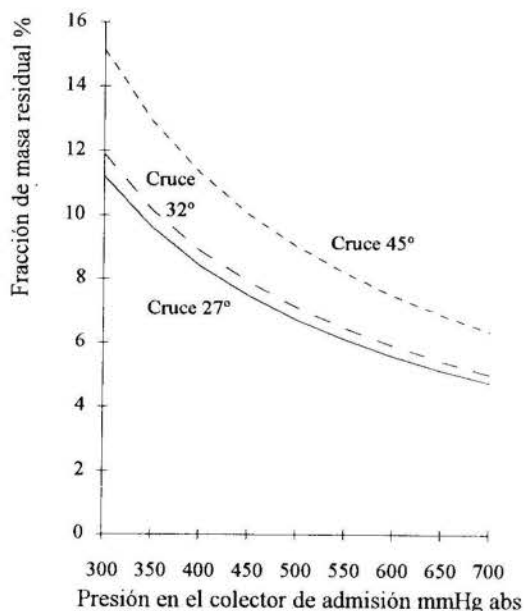


Figura 3 - Resultados obtenidos de la fracción de gas residual en un ECH en función de la presión en el colector de admisión para diferentes tiempos de cruces de válvulas

Renovación de la Carga. La solución de la ecuación de la energía requiere del conocimiento del flujo de masa instantáneo a través de las válvulas de escape y admisión durante cada paso de integración. Para el cálculo de este flujo se ha introducido un modelo cuasiestacionario de tal manera que el flujo instantáneo a través de las válvulas se calcula suponiendo que estas se comportan como un orificio con una sección equivalente de flujo. Las ecuaciones que relacionan el flujo a través de este orificio

son función del salto de presiones, del coeficiente de descarga instantáneo y del área de referencia (Heywood, 1988) tal como se puede observar en la figura 3.

LEYES DE COMBUSTIÓN

El proceso de combustión se caracteriza mediante leyes empíricas que se han ajustado a partir del análisis de diagramas presión-volumen obtenidos experimentalmente. Estas leyes permiten conocer en cada instante la fracción de mezcla fresca que ha reaccionado con el aire pasando a productos quemados.

Leyes Empíricas. Entre las diferentes leyes empíricas se han implementado la ley del coseno (Carreras et al., 1993) y la ley de Wiebe Eq. (9) (Heywood, 1988).

$$x_b = 1 - \exp[-a \cdot \Theta^{m+1}] \quad (9)$$

Esta última ley está caracterizada por dos parámetros a y m . El parámetro a constituye un indicador del grado de combustión, es decir de la fracción máxima de calor puesta en juego. El parámetro m da idea de como y cuando se libera energía. En la Figura 4 puede verse que a medida que m disminuye mayor es la velocidad de quemado al inicio de la combustión y viceversa, cuanto mayor es m mayor es la tasa de liberación de energía en el estado final de la combustión.

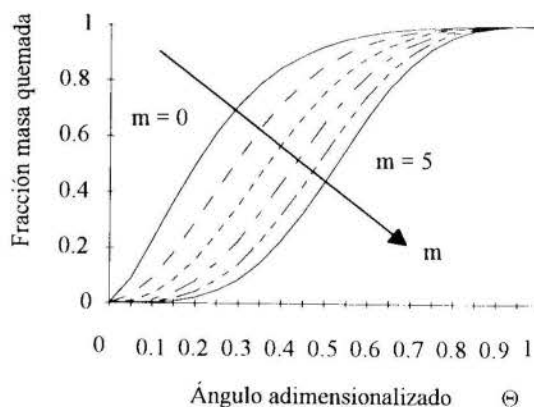


Figura 4 - Ley de combustión de Wiebe Eq. (9) para diferentes valores de m y $a = 6.908$

Ajuste Experimental. El ajuste de las leyes empíricas se ha realizado a partir del análisis de datos de presión-volumen obtenidos en un motor monocilíndrico. La adquisición de pares de valores presión-volumen se ha realizado cada grado girado por el cigüeñal. Empleando el método de Marvin y el MLK (Amann, 1985) se obtiene la fracción de masa quemada en función del ángulo girado por el cigüeñal. En concreto para el motor mencionado anteriormente la ley de Wiebe se ajusta mediante los coeficientes $a = 4.68$ y $m = 2.07$.

PROCEDIMIENTO DE CALCULO

Una vez presentados los diferentes submodelos que modelan cada proceso que tiene lugar en el ciclo de un ECH, en este apartado se presentan los pasos a seguir para obtener el estado de los gases presentes en el cilindro en función del ángulo girado por el cigüeñal. Para calcular la presión y las

temperaturas dentro del cilindro se debe integrar la ecuación de la masa Eq. (1) y de la energía Eq. (2) aplicada al contenido del cilindro o a cada zona del mismo siguiendo los pasos que muestran la figura 5. Durante el paso de integración correspondiente a un diferencial de giro del cigüeñal se utiliza la información proporcionada por cada uno de los submodelos anteriormente descritos.

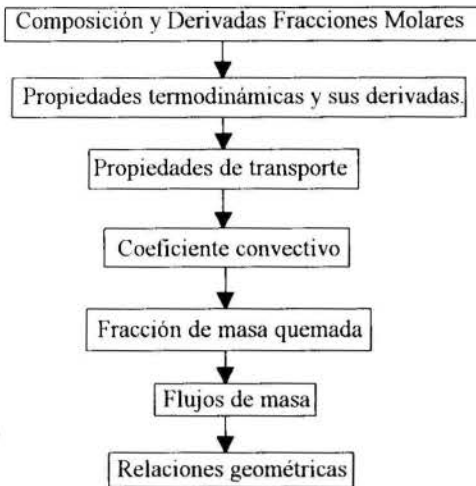


Figura 5 - Diagrama de flujo para el cálculo en el cilindro

En primer lugar se debe calcular la composición y las derivadas de las fracciones molares con respecto a la presión y la temperatura. Una vez conocidos estos valores se deben evaluar las propiedades termodinámicas, de transporte y las derivadas de las propiedades termodinámicas respecto de la presión y la temperatura. A continuación se debe de evaluar el coeficiente convectivo de transferencia de calor. Caso de que exista combustión se debe calcular la fracción de masa quemada desde la zona de no quemados a quemados o bien emplear los datos de los registros experimentales presión-volumen. Finalmente se debe evaluar la variación de masa del sistema debida al flujo de masa a través de las válvulas de admisión y escape (caso de que se encuentre el ciclo en los procesos de escape y admisión), la debida a pérdidas por blowby y las relaciones geométricas del sistema como pueden ser el volumen ocupado por los gases dentro del cilindro o las superficies de transferencia de calor (para la zona de quemados y no quemados). Una vez realizados todos estos pasos ya se puede integrar Eq. (1) y Eq. (2) en cada zona.

A continuación se presentan diferentes gráficas donde se comparan los registros presión-volumen obtenidos experimentalmente con los valores simulados.

RESULTADOS

En la figura 6 se comparan las curvas de presión instantánea en el cilindro medida y calculada para un ECH monocilindrico con una relación de compresión de 6.8 a 3000 rpm durante los procesos de compresión, combustión y expansión. Se observa un buen ajuste especialmente durante el proceso de compresión en el que la diferencia máxima entre los datos obtenidos experimentalmente y mediante simulación es del 0.06%.

Durante los procesos de combustión y expansión los valores calculados de presión se sitúan ligeramente por debajo de los obtenidos experimentalmente. La diferencia máxima entre el

valor calculado y el simulado es del 2.37% en el proceso de combustión y del 4.49% en el proceso de expansión. El error absoluto medio cometido durante todo el ciclo cerrado es del 1.5%.

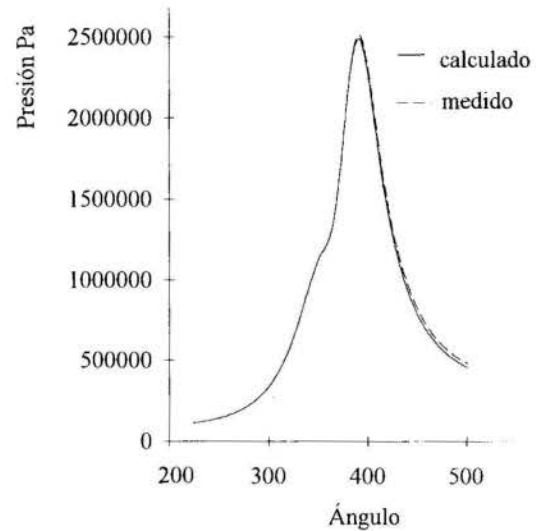


Figura 6 - Comparación presión medida y calculada

A partir de los datos experimentales de la figura 6 y empleando el método MLK se ha obtenido la ley que caracteriza la fracción de masa quemada en función del ángulo adimensionalizado girado por el cigüeñal tal y como se puede observar en la figura 7. Así mismo se puede observar el ajuste obtenido empleando la ley de Wiebe. El inicio de la combustión tiene lugar 8 grados antes de que el pistón alcance el punto muerto superior. Esto se traduce en un aumento brusco de la presión a partir de ese punto tal y como se puede observar en la figura 6. El final del proceso de combustión tiene lugar 49 grados después del punto muerto superior.



Figura 7 - Fracción de masa quemada obtenida experimentalmente y ajustada

Del análisis de la figura 7 se puede observar que hasta que no se ha quemado la mitad de la masa contenida en el cilindro aproximadamente, el modelo ajustado proporciona valores inferiores de fracción de masa quemada que los datos obtenidos experimentalmente. Esto se traduce en que la presión obtenida mediante simulación va a tomar valores inferiores que la presión obtenida experimentalmente tal y como se puede observar en la figura 6. Sin embargo, el ajuste realizado es lo suficientemente bueno tal y como se puede advertir en la figura 6.

CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo termodinámico multizona para calcular la presión instantánea dentro del cilindro de un ECH. El modelo creado permite conocer la composición de la mezcla quemada y no quemada a lo largo de todo el ciclo teniendo en cuenta las reacciones de disociación de las diferentes especies consideradas (13 en total). Permite además conocer las propiedades termodinámicas y de transporte de la mezcla quemada y no quemada. También analizar la fracción de masa quemada durante la combustión empleando diferentes leyes de quemado o bien emplear leyes de quemado que se obtienen de registros experimentales de la presión frente al volumen. El modelo también permite analizar la transferencia de calor convectiva y radiativa mediante diferentes correlaciones, conocer la cantidad de masa que entra y sale del cilindro durante el proceso de renovación de la carga y ver como afecta el reglaje de las válvulas entre otros factores. Asimismo, y de gran importancia, la simulación permite realizar estudios paramétricos además de calcular el diagrama indicado del motor.

process is characterised by experimental adjustment of empirical laws.

BIBLIOGRAFÍA

- Amann, C. A., 1985, "Cylinder-Pressure Measurement and Its Use in Engine Research", *SAE Technical Paper Series* 852067.
- Carreras, R., Comas A., Calvo. A., 1993, "Motores de Combustión Interna. Fundamentos", Ediciones UPC.
- Ferguson, C. R., 1986, "Internal Combustion Engines", John Wiley & Sons.
- Heywood, J.H., 1988, "Internal Combustion Engine Fundamentals", McGraw-Hill International Editions.
- Horlock, J. H. and Winterbone, D. E., 1986, "The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines", Vol. II, Clarendon Press.
- JANAF, 1971, "Thermochemical Tables", National Standard Reference Data System, Second Edition.
- Muñoz, M., Payri F. 1989, "Motores de Combustión Interna Alternativos", Sección de publicaciones de la ETSII. Fundación General - UPM, Tercera Edición.
- Olikara, C. and Borman, G. L. 1975, "A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with some Applications to I.C. Engines", *SAE Technical Paper Series* 750468.
- Pucher, H., 1986, "Internal Combustion Engine Cycle Simulation Methods and Engine Development", *J. Non-Equilibrium Thermodyn.*, Vol II. pp 123-142.
- Ramos, J. I. 1989, "Internal Combustion Engine Modeling", Hemisphere Publishing Corporation.
- Reid, R. C., Prausnitz, J. M., Poling, B. E., 1987, "The Properties of Gases and Liquids" Fourth Edition McGraw-Hill Book Company.
- Reyes M., 1993, "Modelos Cuasiestacionarios". *CEC C'OMET Programme. Curso: Proceso de renovación de la carga en motores de combustión interna Alternativos.*

ABSTRACT

A multizone thermodynamic modeling is presented that has been used to predict the behavior in a spark ignition engine. Modeling includes blowby, gas exchange processes, heat transfer and a deep analysis of the gas composition as well as thermodynamical and transport properties. The combustion



João Nildo de S. Vianna, Guilherme L. de Oliveira, Lúcio H. H. de Oliveira
Departamento de Engenharia Mecânica - Universidade de Brasília
70910-900 Brasília - DF - Brasil

RESUMO

Neste trabalho é apresentado um estudo comparativo do desempenho de um programa simulador onde os coletores de admissão e de descarga são modelados pelo método dos volumes de controle e pelo método da ação das ondas. Os valores calculados pelo dois métodos são comparados com os resultados experimentais. Para validar o método da ação das ondas um coletor de descarga foi especialmente construído. Os resultados indicam que o método da ação das ondas melhora sensivelmente o desempenho do programa simulador, muito embora aumente o tempo de cálculo.

INTRODUÇÃO

O fluxo de massa que atravessa as válvulas de admissão e descarga depende da geometria das válvulas e das condições existentes nos coletores e no cilindro. Quando a válvula de descarga se abre, uma onda de pressão se propaga no coletor e, ao se chocar com a atmosfera, se reflete e volta em direção ao cilindro como uma onda de expansão. Neste caso, a atmosfera se comporta como uma parede isobárica. Uma sucessão de ondas de compressão e expansão se repetem até o final do processo.

Os processos de admissão e descarga podem ser modelados por dois métodos diferentes. O primeiro método, proposto por Sherman et al (1970), ignora a ação destas ondas e trata os coletores como volumes de controle, admitindo simplesmente que os gases nos seus interiores possuem propriedades correspondentes à estagnação, uniformes e constantes. Benson (1986) propõe que as variações espaciais e temporais das propriedades sejam consideradas na modelagem dos coletores de admissão e descarga, como uma alternativa ao método clássico dos volumes de controle. Outros autores, entre eles Oliveira (1995) mostram que a compreensão e cálculo dos efeitos da ação das ondas é indispensável, tanto para otimizar o desempenho dos programas simuladores quanto para realizar um correto "matching" dos turbocompressores pulsantes.

O objetivo deste trabalho é apresentar um estudo comparativo entre o desempenho de um programa simulador de motores de combustão interna com os coletores de admissão e descarga modelados, tanto pelo método da ação das ondas quanto pelo método clássico dos volumes de controle.

Para compreensão do processo físico e validação do modelo numérico de propagação das ondas, foi desenvolvido um coletor de escapamento especial que, além de eliminar a interferência do processo de descarga dos outros cilindros, permitia a instalação de uma instrumentação adequada para medir a amplitude e frequência de passagem da onda em várias seções do coletor.

Os resultados calculados pelos dois métodos são comparados com os resultados experimentais. São analisados a influência dos dois modelos tanto sobre as curvas de pressão no interior do cilindro quanto sobre as curvas de desempenho global do motor.

MODELAGEM DOS COLETORES

Modelo considerando um volume de controle. Trata-se de um modelo de programação relativamente mais simples, muito embora dependa do conhecimento preciso de algumas relações geométricas e cinemática das válvulas. Neste modelo o fluxo de massa é calculado pela combinação das equações da conservação da massa e da energia aplicadas a um escoamento compressível isoentrópico. Na entrada e saída das válvulas as propriedades são de estagnação. Após a expansão na garganta da válvula a pressão é mantida constante, dissipando a energia cinética. No início do processo o escoamento pode alcançar velocidades sônicas para gradativamente diminuir sua velocidade, a medida que a pressão interna diminui e a área de passagem da válvula aumenta.

O limite sônico é definido por:

$$\frac{P_e}{P_s} = \left(\frac{k+1}{2}\right)^{\frac{k}{k-1}} \quad (1)$$

Para os escoamentos sônicos (M=1):

$$\frac{dm}{dt} = c_d P_e F_g \sqrt{\frac{k}{RT_e} \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k+1}{k-1}}} \quad (2)$$

Para os escoamentos subsônicos:

$$\frac{dm}{dt} = c_d P_e F_g \sqrt{\frac{1}{RT_e} \frac{2k}{k-1} \left(\frac{P_s}{P_e}\right)^{\frac{2}{k}} \left[1 - \left(\frac{P_s}{P_e}\right)^{\frac{k-1}{k}}\right]} \quad (3)$$

Os índices *e*, *s* e *g* referem-se às condições na entrada, na saída e na garganta da válvula. *c_d* é o coeficiente de descarga da válvula e é função das suas características geométricas.

$$c_d = -1,5 \left(\frac{H_v}{D_v} \right) + 1 \quad (4)$$

Onde H_v é a elevação instantânea da válvula e D_v seu diâmetro nominal.

Modelo Considerando a Ação das Ondas. Neste método, a dinâmica dos escoamentos em coletores é considerada, sendo as propriedades dos gases variantes no espaço e no tempo.

O modelo baseia-se nas equações diferenciais parciais de conservação de massa, quantidade de movimento e energia que governam a propagação de ondas em um meio compressível.

O método adotado neste trabalho para a solução destas equações foi proposto por Benson (1986).

O escoamento é considerado transiente em regime subsônico, sônico e supersônico. Admite-se por hipótese que os fluidos nos coletores comportam-se como gases perfeitos compressíveis e invíscidos. Os efeitos de atrito e troca de calor com as paredes dos coletores são negligenciados, sendo o escoamento homentrópico, ou seja, com entropia constante no espaço e no tempo. O tratamento das ondas de pressão é feito via processos isoentrópicos, o que só é justificado para pequenas relações de pressão quando da transição do regime subsônico para supersônico. A Fig. 1 apresenta esquematicamente o domínio de aplicação do modelo dinâmico dos coletores.

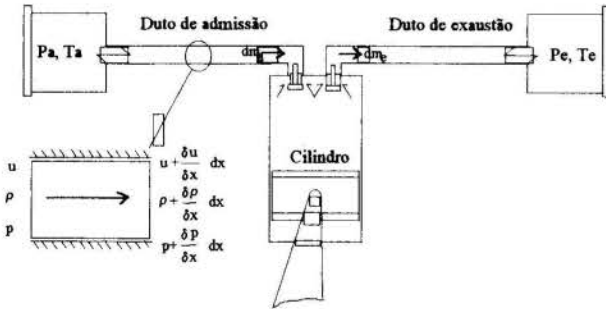


Figura 1 : Dinâmica de coletores - modelo esquemático.

As equações de conservação para um escoamento homentrópico, unidimensional de seção transversal constante, são:

- conservação da massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (5)$$

- conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \quad (6)$$

- conservação de energia - é satisfeita pela segunda lei da termodinâmica aplicada a processos isoentrópicos.

$$a^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{rev} = \frac{dP}{d\rho} = \frac{kP}{\rho} = kRT \quad (7)$$

ou, para uma mudança de estado entre um ponto de referência com a_{ref} , P_{ref} e ρ_{ref} constantes e um ponto genérico com a , P e ρ ,

$$\frac{P}{P_{ref}} = \left(\frac{\rho}{\rho_{ref}} \right)^k = \left(\frac{a}{a_{ref}} \right)^{\frac{2k}{k-1}} \quad (8)$$

A expressão (8) pode ser reescrita na forma diferencial e substituindo-se em (6) e (7), obtêm-se as equações de conservação de massa e quantidade de movimento em função de apenas a e u , caracterizando um sistema de duas equações e duas incógnitas:

- conservação de massa

$$\frac{\partial a}{\partial t} + u \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{k-1}{2} a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

- conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{2}{k-1} a \frac{\partial a}{\partial x} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (10)$$

O sistema formado por (9) e (10) pode ser escrito na forma matricial, cuja a matriz coeficiente tem autovalores reais e diferentes, representados por $\gamma_1 = u+a$ e $\gamma_2 = u-a$, que conforme Oliveira (1995), mostra a natureza hiperbólica deste sistema de equações. No caso de escoamento interno aos coletores de descarga, onde observa-se grandes variações nas propriedades, o método de solução mais adequado é o das características.

SOLUÇÃO PELO MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS

O método das características se baseia no conceito de curvas características, sobre as quais as equações diferenciais parciais do sistema hiperbólico são transformadas em equações diferenciais ordinárias, que são de fácil discretização e resolução.

Com aplicação do método de mudança da natureza do sistema (9) e (10), chega-se às expressões diferenciais ordinárias ao longo das características:

- para γ_1 :

$$\frac{da}{dt} + \frac{k-1}{2} \frac{du}{dt} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{da}{du} = -\frac{k-1}{2} \quad (11)$$

com inclinação $\frac{dx}{dt} = u + a$

- e para γ_2 :

$$\frac{da}{dt} - \frac{k-1}{2} \frac{du}{dt} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{da}{du} = +\frac{k-1}{2} \quad (12)$$

com inclinação $\frac{dx}{dt} = u - a$

É conveniente adimensionalizar as variáveis a , u , x e t . Admitindo-se um estado de referência para o fluido e um comprimento qualquer x_{ref} de referência, pode-se definir o seguinte grupo adimensional:

$$A = \frac{a}{a_{ref}}; \quad U = \frac{u}{a_{ref}}; \quad X = \frac{x}{x_{ref}};$$

$$Z = \frac{a_{ref}}{x_{ref}} t \quad \text{onde} \quad a_{ref} = \sqrt{kRT_{ref}}$$

Adota-se igualmente para os dois dutos $P_{ref} = 1.0$ bar e x_{ref} igual ao incremento ΔX no duto de exaustão. A temperatura de referência T_{ref} é admitida entre 800 e 1000 K no duto de exaustão e 300 K no de admissão de acordo com a recomendação de Alegre (1993). Com estas temperaturas minimiza-se os erros provenientes da hipótese de gases perfeitos: constante do gás R e a razão de calores específicos k constantes no interior de cada duto.

Integrando-se as equações (11) e (12) e incluindo-se a novas variáveis adimensionais, chega-se a forma final das equações governantes:

$$\lambda = A + \frac{k-1}{2} U \quad \text{válido para} \quad \left(\frac{dX}{dZ} \right)_\lambda = U + A$$

$$\beta = A - \frac{k-1}{2} U \quad \text{válido para} \quad \left(\frac{dZ}{dZ} \right)_\beta = U - A$$

As constantes λ e β são as variáveis de Riemann, e as características correspondentes a $U+A$ e $U-A$ são, respectivamente, as características λ e β .

PROCEDIMENTO DE CÁLCULO

O método de solução das equações características adotado neste trabalho segue o esquema proposto por Benson [1982] e detalhado por Oliveira(1995).

Os dutos de admissão e exaustão são discretizados, com 13 e 215 nós respectivamente, sobrepondo-se uma malha de cálculo sobre o diagrama de posição de tal modo que os extremos dos dutos correspondam aos nós extremos da malha. O incremento ΔX da malha é fixo e ΔZ varia de acordo com o critério de estabilidade de Courant-Friedrich-Lewis. As características λ e β são calculadas a partir das condições conhecidas no instante anterior e das condições de contorno. Os contornos são: o carburador, que é modelado como o escoamento de um reservatório para um duto; o cilindro, cujo o modelo são os processos nas válvulas de admissão e descarga e o duto de escape com uma das extremidades abertas.

Os valores calculados com esta configuração estão coerentes com os valores apresentados na literatura esoczializada, Benson (1986) e Watson (1982).

METODOLOGIA DE ENSAIOS E INSTRUMENTAÇÃO

Para avaliação dos modelos, foram planejados ensaios no dinamômetro hidráulico Froud utilizando-se um motor de 4 cilindros, de 1000 cm³, a gasolina.

Primeiramente foram feitos testes com o motor com um coletor de descarga especial, com seção constante, alimentado unicamente por um cilindro, de maneira a evitar a interferência do pulso de pressão oriundo de um cilindro vizinho. Os resultados destes testes permitiram, simultaneamente, a compreensão de vários detalhes do processo e validação da solução numérica.

Os coletores foram instrumentados com dois sensores piezoelétricos de pressão instalados em um adaptador resfriado a água de sorte a manter sua linearidade em torno de 0,8%. Um sensor foi instalado próximo à válvula de descarga e o outro a um metro de distância. Um terceiro sensor de pressão foi instalado no interior do cilindro. Todo o sistema de medição, aquisição e tratamento de dados de pressão tem um a incerteza de 2%. O coletor de admissão foi mantido o original.

Os ensaios foram realizados com o motor operando entre 2000 e 4000 rpm, ± 10 rpm.

ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

O modelo de combustão progressiva, de uma zona de combustão, foi empregado na simulação por independer de dados experimentais. A cinética de reação do NO e CO não foi considerada.

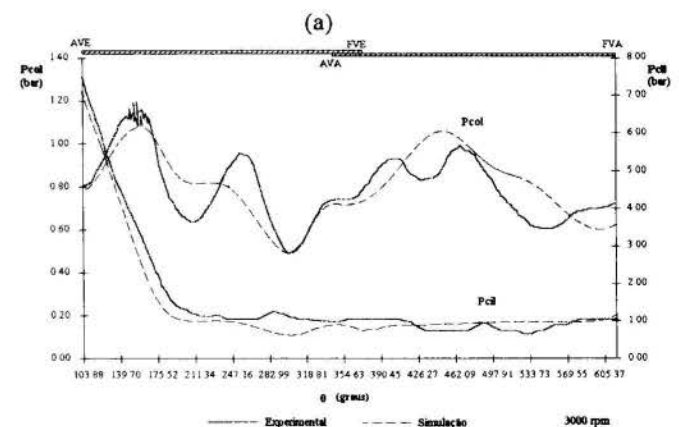
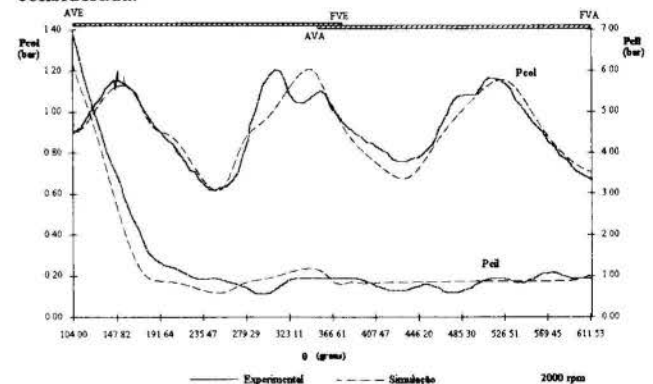


Figura 2 - Pressão no coletor de descarga e no cilindro por ângulo a 2000 rpm (a) e 3000 rpm (b) medido e simulado

A Fig. 2 apresenta os diagramas de pressão por ângulo do eixo de manivelas obtidos simultaneamente no coletor

de exaustão, próximo à, válvula de descarga, e no interior do cilindro, para 2000 e 3000 rpm.

Verifica-se que há uma boa concordância entre os resultados experimentais e simulados a 2000 rpm, Fig. 2(a). Segundo Benson, a pequena flutuação observada na curva simulada de pressão no coletor, a aproximadamente 160 graus, pode ser atribuída a instabilidades nas condições de contorno do método numérico. Isto porque, numericamente, verifica-se neste ponto a transição do regime sônico para subsônico na onda de pressão gerada no instante da abertura da válvula de descarga. Entretanto, os resultados experimentais registram a mesma flutuação na mesma região para todos os ensaios realizados.

A 3000 rpm, Fig. 2 (b), verifica-se que os resultados da simulação afastam-se mais daqueles obtidos experimentalmente, apresentando erros para a amplitude da pressão no coletor de até 40% a 260 graus. Cabe salientar, entretanto, que estas variações observadas nos diagramas de pressão do coletor não podem ser associadas à simulação da pressão no interior do cilindro, uma vez que os resultados, para este caso, não apresentaram erros superiores a 10% na amplitude da pressão.

Para outras rotações os resultados são semelhantes aos de 3000 rpm.

Com o objetivo de se entender melhor o fenômeno físico de propagação de ondas no coletor de exaustão, foram realizados ensaios nas mesmas condições de operação do motor, porém com dois sensores de pressão deslocados de um metro no coletor de exaustão. Os resultados destes ensaios estão apresentados na Fig. 3, juntamente com o sinal do PMS.

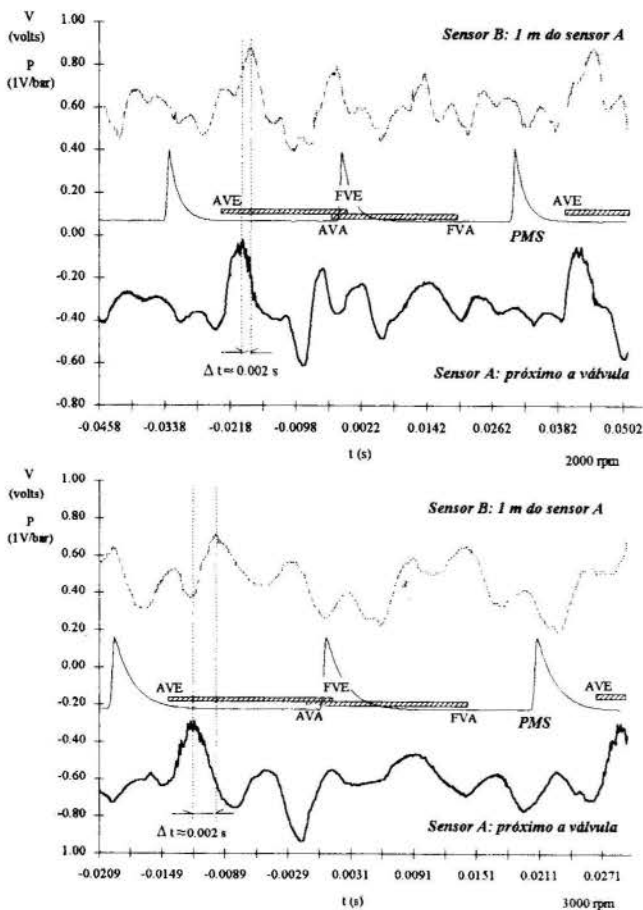


Figura 3 - Pulso de pressão no coletor de descarga medidos com sensores a 1 metro de distância, a 2000 e 3000 rpm.

A aquisição dos dados experimentais seguiu a mesma metodologia dos ensaios anteriores, utilizando-se um sensor "A" próximo à válvula de escape, e um outro "B", a 1 m de distância de "A". Ambos os sensores utilizaram adaptadores refrigerados, com características dinâmicas semelhantes. Os sinais de variação de pressão foram adquiridos para uma escala de tempo maior, compreendendo vários PMS, a fim de avaliar o amortecimento da onda de pressão no coletor durante a fase fechada do ciclo.

Os resultados experimentais apresentados na Fig. 3 permitiram a constatação dos seguintes fatos importantes:

- a amplitude da onda de pressão do ciclo anterior, presente no interior do coletor no momento em que a válvula de escape se abre, é da ordem de 0,08 bar a 2000 rpm e 0,2 bar a 3000 rpm;
- o tempo requerido para a onda se propagar de um sensor para o outro é aproximadamente 2 ms para as duas rotações, o que equivale a uma velocidade de propagação da ordem de 500 m/s.

Esses resultados levam a crer que a interferência das ondas geradas num mesmo cilindro durante dois ciclos consecutivos é tanto mais expressiva, quanto maior for a rotação do motor. Tal hipótese é reforçada quando se compara as distâncias percorridas pelas ondas de pressão geradas a 2000 e 3000 rpm durante um ciclo termodinâmico completo. Supondo uma velocidade média para a onda de 500 m/s, e sabendo-se que a duração de um ciclo a 2000 rpm é 60 ms e a 3000 rpm é 40 ms, verifica-se que uma onda gerada a 2000 rpm percorre aproximadamente 10 metros a mais que a onda gerada a 3000 rpm, o que representa 4 vezes o comprimento do duto de exaustão.

A interferência de ondas remanescentes de ciclos anteriores pode justificar as discordâncias observadas nos diagramas simulados e experimentais de pressão no coletor. Isto porque, a cada iteração, na abertura da válvula de escape, admiti-se na modelagem dos coletores que os gases estão em repouso, sendo a ação das ondas do ciclo anterior desconsiderada.

Quando se simula na mesma disposição mostrada na Fig. 3, constata-se que a onda de pressão simulada requer o tempo de 1,65 ms para se propagar à mesma distância do sensor "A" ao sensor "B". Observa-se, também, que da mesma forma que na curva experimental, nas curvas simuladas a instabilidade atribuída ao método desaparece.

Na Fig. 4 observa-se que os modelos dos coletores têm forte influência sobre a pressão no interior dos cilindros. Os valores calculados com o modelo considerando os efeitos

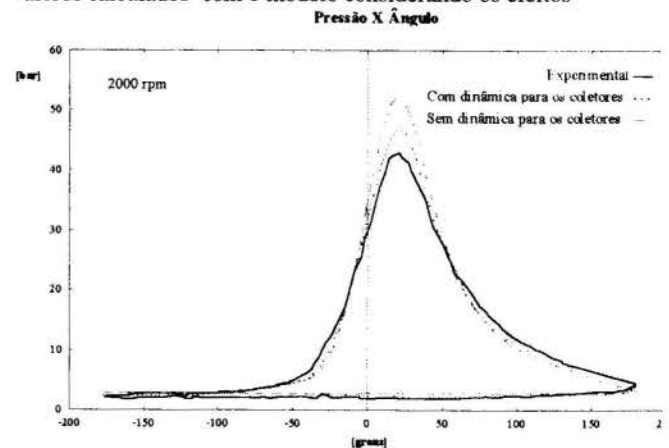


Figura 4 - Pressão no interior do cilindro por ângulo experimental e simulados com os dois modelos de coletor

dinâmicos da ação das ondas estão bem mais próximos dos valores experimentais que a calculada com o coletor modelado como um volume de controle. Como a Potência de Atrito, de acordo com o modelo proposto por Farinha e Vianna(1990), é proporcional à pressão máxima no interior do cilindro, os resultados da simulação, considerando-se a dinâmica dos coletores, serão mais aderentes aos resultados experimentais, obtidos em banco de ensaio.

A Fig. 5 apresenta os resultados obtidos para a potência efetiva observada em função da rotação do motor. Uma variação inferior a 8% é verificada entre os valores calculados com os dois modelos de troca de gases. A curva de potência simulada obtida considerando-se a dinâmica de escoamentos nos coletores aproximou-se mais do caso experimental. As diferenças observadas entre os resultados numéricos e experimentais variam de 3,7 a 17,4 % para o modelo de troca de gases com dinâmica nos coletores e de 10,3 a 22,1% para o modelo com propriedades constantes nos coletores.

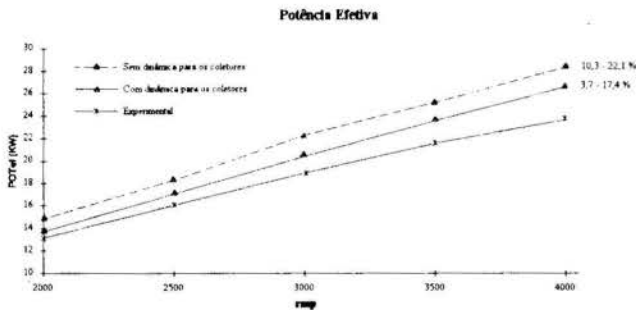


Figura 5 - Curvas de potência efetiva simulada e experimental

Quanto ao rendimento volumétrico, Fig. 6, observa-se uma maior discordância entre as curvas simuladas com variações de até 14% nos resultados. Em relação ao caso experimental, verificam-se diferenças de 5,4 a 8,5% e 16,3 a 20,6% para os modelos com e sem dinâmica nos coletores, respectivamente.

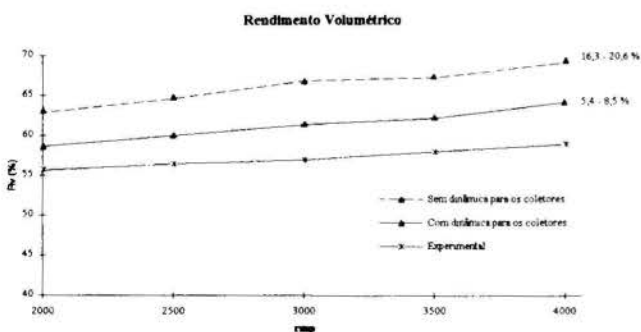


Figura 6 - Curvas de rendimento volumétrico simulada e experimental.

Cabe notar que a utilização do modelo de troca de gases sem dinâmica para os coletores implicou em grandes erros para o rendimento volumétrico, mas não para a potência efetiva. De acordo com a curva de rendimento volumétrico, Fig. 6, a diferença entre as massas admitidas calculadas pelo programa simulador, não acarreta grandes variações no cálculo da potência efetiva. Tal comportamento pode ser explicado em parte pelo aumento da potência de atrito verificado na Fig. 7, bem como pela variação de de pressão no interior do cilindro, Fig. 4. Nesta

figura observa-se um aumento na pressão máxima dos ciclos indicados simulados, que é condizente com as curvas obtidas para o rendimento volumétrico e potência de atrito, uma vez que, para uma rotação fixa, quanto maior for a pressão máxima do ciclo, maior será a potência de atrito dissipada.

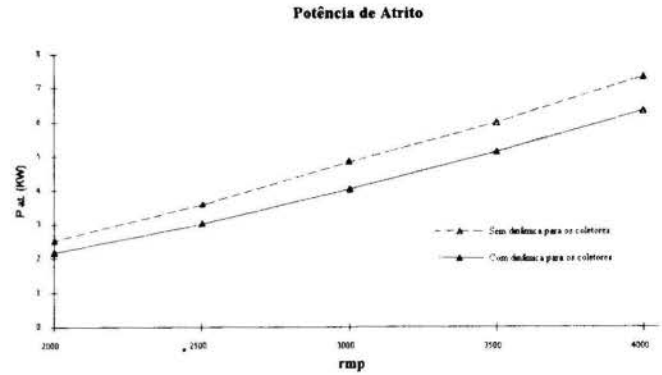


Figura 7 - Curvas de potência de atrito simuladas considerando-se os dois modelos de coletor de admissão e descarga

CONCLUSÕES

Com base nas discussões e resultados apresentados, pode-se inferir que a modelagem dos coletores de admissão e descarga pelo método da ação das ondas aporta uma significativa melhoria no desempenho do programa simulador na predição dos parâmetros de desempenho global do motor.

A simulação das propriedades termodinâmicas espacial e temporal no interior dos coletores mostrou-se uma ferramenta poderosa para compreensão dos fenômenos transientes e seus efeitos sobre o desempenho global do motor. Verificou-se que a sucessão de ondas de pressão e expansão que se repetem até o fechamento da válvula, interferem no valor da pressão no interior do cilindro. Como o modelo de dinâmica do coletor representa melhor o fenômeno físico para as rotações mais baixas, conforme foi constatado experimentalmente, as curvas de pressão no interior do cilindro e consequentemente os resultados da simulação são consideravelmente melhores nestas rotações e, possivelmente, nas cargas parciais, onde a fração de gases residuais é naturalmente maior. No caso do modelo considerando as propriedades nos coletores constantes, as diferenças entre os valores simulados e experimentais não sofrem variações muito significativas com a rotação do motor.

Por fim, a inclusão da dissipação de energia pelo atrito seguramente melhorará significativamente o desempenho do modelo de dinâmica dos coletores.

REFERÊNCIAS

- Alegre, J.A.A.V - - 1993, Simulação dos Processos e Análise Exergética do Motor Diesel. Tese de Doutorado, Depto. de Energia da UNICAMP.
- Benson, R.S.- 1982, The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines - Volume I, Editado por Horlock, J.H e Winterbone, D.E., UMIST.
- Benson, R.S.- 1986, The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines - Volume II, Calderon Press, Oxford.
- Farinha, C.C., Vianna, J.N.S.- 1990, Um Modelo de Quantificação da Potência de Atrito em Motores do Ciclo Otto-Anais do III ENCIT, p. 823-829.
- Oliveira, G.L.- 1995, Simulação de Motores de Ignição por Centelha - Análise Teórica e Experimental dos Processos

Termodinâmicos - Dissertação de Mestrado - Depto. de Engenharia Mecânica- UnB.

Shapiro,A.H. - 1954. The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow. Volume 2. The Ronald Press Company

Sherman,R.H., Bumberg,P.N. - The Influence of Induction and Exhaust Process on Emissions and Fuel Consumption in Spark Ignited Engine. SAE Paper 770880, 1970.

Watson, N., Janota, M.S.- 1982. Turbocarging the Internal Combustion Engine - The Macmillan Press Ltd. p. 581-584.

ABSTRACT

This work presents a comparative study of the performance of a simulation computer program where the inlet and exhaust manifolds are modeled by the control volume method and the by the wave action method. Results obtained by both methods are compared with experimental data. To validate the method of wave action an exhaust manifold was specifically built. The results show that the wave action method improves considerably the performance of the simulation software, although it increases the processing time.



COMBUSTION PERFORMANCE OF SOOT (PARTICULATE MATTER) IN CERAMIC FILTER TRAPS



Alejandro F. Romero
Rogelio Gutiérrez
Rodrigo García Moreno
 Instituto de Ingeniería,
 Universidad Nacional Autónoma de México
 Ciudad Universitaria 04510 D.F.
 México

SUMMARY

A model of soot combustion in a ceramic filter trap is presented as part of a complete retro-fit emission-control system for heavy-duty Diesel engines. The model considers an inverse regenerating flow that "cleans" the catalyzed filters. Results from a numerical simulation show that, with the proposed scheme, problems due to high temperatures and high temperature gradients can be notably diminished. The system is capable of achieving the regeneration of the filters in a reasonable time, according to these numerical results.

INTRODUCTION

Ceramic filter traps will probably be used in the near future as the main components for retro-fit systems to be used in heavy duty diesel engines. The strict legislation adopted in the leading industrialized countries, *i.e.* U.S. and the European Community, will be sooner or later adopted by other countries, specially those with severe air pollution problems in large metropolitan areas. The Mexico City Metropolitan Area (MCMA) is a typical example of this situation. With close to twenty million inhabitants and over three million vehicles of all types, the conditions of its overloaded atmosphere have led the Mexican Government to virtually adopt the U.S. Environmental Protection Agency (EPA) legislation (Anonymous 1993).

The emissions of particulate matter, limited by the EPA to the specific value of 0.067 g/kWh for 1998 and later for urban buses, has led the authors, among other researchers around the globe, to look for alternative or additional solutions to the ones adopted by engine manufacturers. The reason for this is the statement of the National Institute of Occupational Safety and Hazards (NIOSH) and the EPA in the sense that "exposure of human beings to diesel exhaust gases represents a carcinogenic risk" (Anonymous, 1988).

Some problems encountered during the regeneration of ceramic filters are extremely high regeneration temperatures as compared to exhaust gas temperatures ($T \geq 700^\circ\text{C}$), uncontrolled combustion processes and filter melting or cracking due to high local temperatures or temperature gradients (Hardenberg, *et al.*, 1987) (Kojetin, *et al.*, 1993) (MacDonald and Simon, 1988). These problems are avoided with the use of catalyzed filter traps and the use of an inverse regenerating flow.

SYSTEM ELEMENTS AND REGENERATION

The proposed system considers the use of two Degussa® catalyzed ceramic filters to collect particulate matter at the

exhaust of a diesel engine. With the catalytic coat, soot ignition temperatures can be reduced from $T \geq 700^\circ\text{C}$ to $T \approx 450^\circ\text{C}$ (Engler and Müller, 1994). In order to clean the filters, an inverse regenerating air-flow of high temperature and enough oxygen concentration is induced through the filter. The filter element and the directions of filtration and regeneration are shown in figure 1.

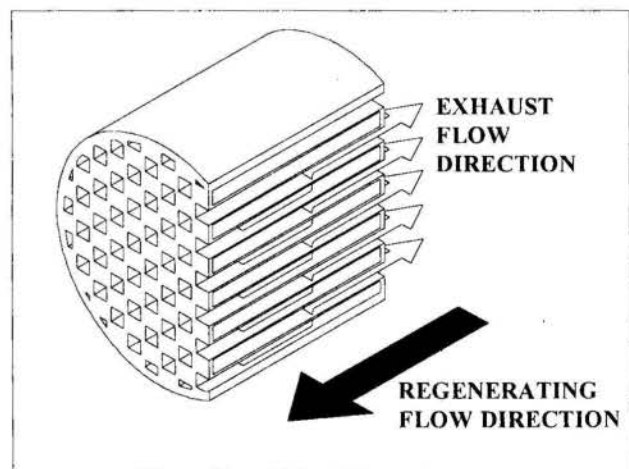


Figure 1. Ceramic filter, exhaust flow and regenerating air flow directions

A thermal energy reservoir (TER) was designed to heat the regenerating air flow. The TER basically consists of three electric resistors working at 24 V DC with an output of 600 W each, attached to an extended heat transfer surface. Energy is supplied to the reservoir while there is no air flow through it; when one of the filters needs regeneration, an air flow is induced through the TER and fed to the filter. At this time, exhaust gases are forced through the other filter, so that the particulate filtering is never interrupted. Due to its characteristics the reservoir provides an air flow with variable temperatures. It is important to assure that the regenerating air-flow has the

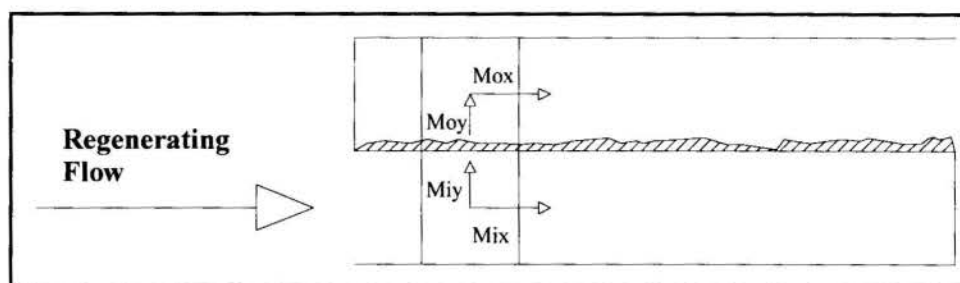


Figure 2. Axial and radial components of the regenerating flow

necessary conditions to make the process self-sustainable after some time. When all the soot within the filter has reached the ignition temperature, the filter regeneration is assumed to continue without the need of further external energy, as long as there is sufficient oxygen concentration in the flow.

The major problems encountered during the regeneration of ceramic traps are related with the involved temperature levels. On one hand, the highest temperature on the ceramic material should stay below 1100°C in order to avoid cracking of the element. On the other hand, the temperature gradients in the material should stay in the range of $\pm 35^\circ\text{C}$ to neglect negative effects on the durability of the filter due to thermal stresses (MacDonald and Simon, 1988).

Both problems are eliminated by the use of the inverse flow, which dissipates the heat released during the combustion of soot, helping temperature levels stay low during the process.

PROCESS MODEL

In order to model the regeneration process of the filter, the whole filter was reduced to a representative section, consisting of an inlet and outlet channel. This section was divided into differential elements, each of them including part of the inlet and outlet channels, filter wall and soot layer. Mass and energy flows are considered to exist between the elements. This simplification is shown in figure 2.

Besides these, the following simplifications were made :

- Pressure drop along the channels is neglected when compared to the pressure drop across the filter wall.
- Accumulated soot is considered to have the same temperature as the filter wall at any moment.
- Soot is equally distributed along the channel.
- Convective heat transfer between the radial flow and the filter wall is considered to be total.
- According to the expected temperature levels, the reaction rate of the soot combustion is assumed to be kinetically controlled (Gilot, 1993).

According to these simplifications, and once the energy and mass balances between the elements were made, the following equations, which describe the process were obtained:

$$0 = \frac{\partial m_{xi}}{\partial x} + \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + \frac{P_i A_0}{R} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{T_i} \right) \quad (1)$$

$$0 = m_{xi} Cp \frac{\partial T_i}{\partial x} + Cp T_i \frac{\partial m_{xi}}{\partial x} + Cp T_i \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + 4lh_i (T_i - T_f) \quad (2)$$

$$0 = \frac{\partial m_{xo}}{\partial x} - \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} + \frac{P_o A_0}{R} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{T_o} \right) \quad (3)$$

$$0 = m_{xo} Cp \frac{\partial T_o}{\partial x} + Cp T_o \frac{\partial m_{xo}}{\partial x} - Cp T_f \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} - 4lh_o (T_f - T_o) + \frac{\partial Q_R}{\partial x} \quad (4)$$

$$0 = \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} - \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + \frac{P_f}{R} 4lep \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{T_f} \right) \quad (5)$$

$$0 = \rho 4leC(1-p) \frac{\partial T_f}{\partial x} + Cp T_f \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} - Cp T_i \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + 4lh_o (T_f - T_o) - 4lh_i (T_i - T_f) \quad (6)$$

The equation describing the combustion process is:

$$R_{O_2} = k \rho O_2 \quad (7)$$

An exact solution to these equations is rather cumbersome, as it is a set of non-linear differential equations. For this reason, the system was solved using a numerical approach, for an approximate solution.

NUMERICAL SIMULATION

The set of equations shown was solved using a finite differences scheme. For this purpose, the simplified section of the filter was divided into smaller elements. Each element is characterized by a specific temperature and specific axial and radial air-flows between them. These can be seen in figure 2, where Mix and Miy stand for the inlet axial and radial flows, while Mox and Moy stand for the outlet axial and radial flows.

Further simplifications to those presented in the analytical model were made. These simplifications are:

- Convective heat transfer is considered to exist between the axial flow and the filter wall in both channels.
- Conduction heat transfer is neglected in the air, as the predominant heat transfer mode is convection.
- Heat released during combustion is considered to be totally transferred to the radial flow at the outlet.
- Ignition of soot in one element starts when the temperature within it, which is considered to be the same at any moment

for the soot layer and the filter wall, reaches a critical value (ignition temperature).

One of the most important things to consider in the simulation of the process is the condition at which the regenerating air flow enters the filter. This condition depends on the cooling performance of the thermal energy reservoir used to heat the regenerating air.

The cooling performance of the reservoir was estimated using a finite element approach. Results showed that the element is capable of providing air flows with an average temperature of 700°C and 800°C during a 120-second time, for volumetric flows of 46m³/h and 22m³/h, respectively. The energy reservoir will provide enough energy for the regeneration process to take place if, with the mentioned flow characteristics, the self-sustainability condition is reached within 120 seconds.

Simulations were made considering different regenerating air-flows according to the expected cooling performance of the TER. In this paper, only two of the simulations are reported. These represent the extreme working conditions of the TER, so that their results are limits to different air-flow conditions. The extreme conditions mentioned are the following: an air flow of 22 m³/h and average inlet air temperature of 800°C (simulation A), and an air flow of 46m³/h and 700°C (simulation B).

RESULTS

The figures shown below represent the expected temperatures and related times involved in the regeneration process, for simulations A and B. Figures 3 and 4 show the temperature profiles of the filter wall (Tf) and the outlet air (Ta), at the left hand side of the filter, according to figure 2, that is, the side where the regenerating air-flow enters the filter.

It can be seen in both figures that the temperature of the filter material stays considerably below the air temperature, showing that the inverse regeneration scheme helps to dissipate the heat released in the combustion of soot particles. The temperatures reached at this point are the maximum expected in the process (as explained ahead), and these maximum temperatures never surpass the limit of 1100°C.

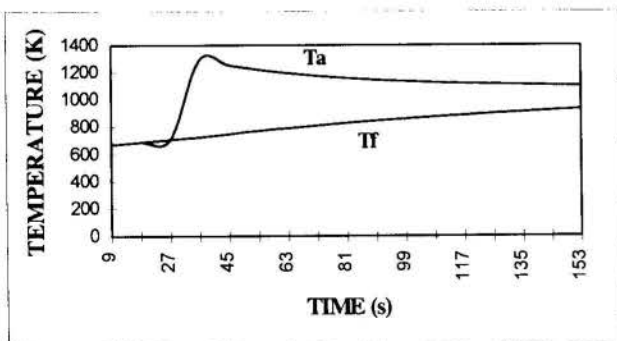


Figure 3. Simulation A

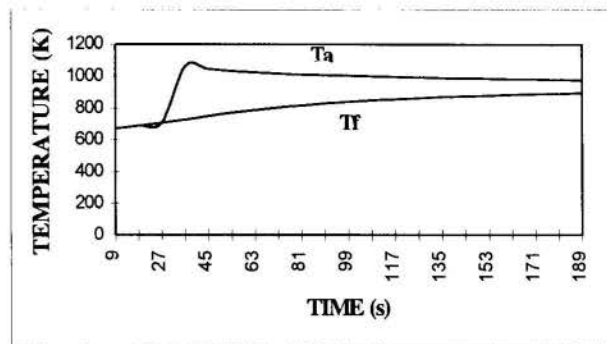


Figure 4. Simulation B

Figures 5 and 6 show the temperatures of the filter wall (Tf) and the outlet air (Ta) at the extreme right hand side of the filter, where the regenerating air-flow leaves the filter. This part of the filter is the last to reach the ignition temperature, so the time for this to happen is the time required for the process to become self-sustainable according to the assumptions made above (65 seconds and 74 seconds approximately after the regenerating air flow is induced, for simulation A and B respectively).

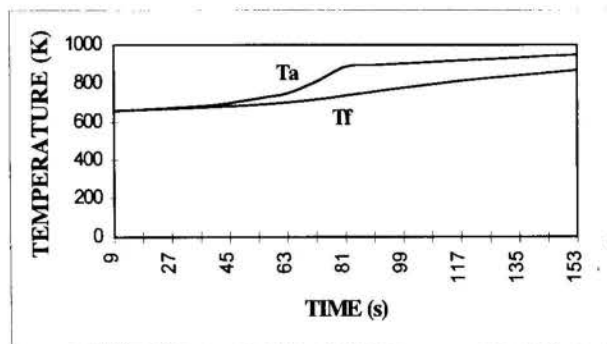


Figure 5. Simulation A

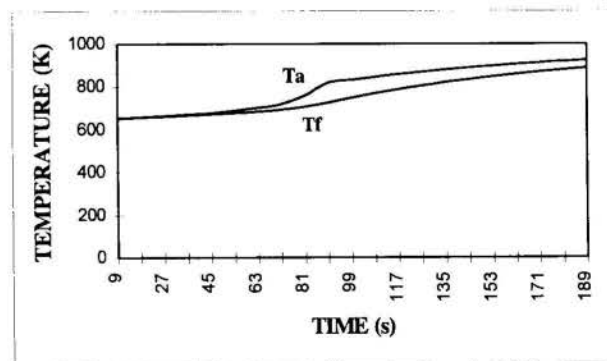


Figure 6. Simulation B

Figures 7 and 8 show the temperature profiles of the outlet air for different positions of the filter. The figures show how the maximum temperatures of the process occur at the air-flow inlet of the filter, and illustrate how the combustion process diffuses progressively through the filter. The time needed for the regeneration process to become self-sustained appears once again in these figures. In this case, what is important is the regenerating time taken from the moment the ignition of soot starts, and not when the air-flow is induced. The times are 38 and 47 seconds for simulations A and B respectively.

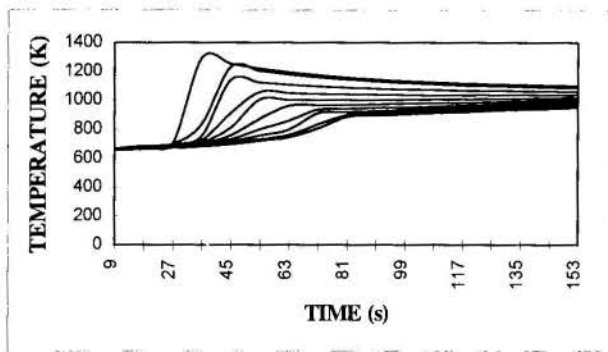


Figure 7. Simulation A

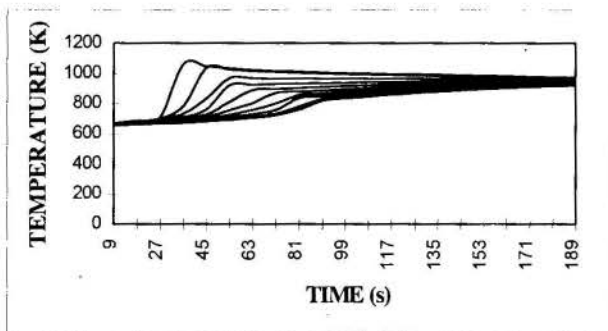


Figure 8. Simulation B

In figures 9 and 10 the temperature gradients appearing in the ceramic material during the process can be seen. These gradients are plotted against time for different positions in the filter. Node 2 represents the side where the air-flow enters the filter, and node 29 represents the side where the air-flow leaves the filter. In both cases, the gradients stay considerably under the $\pm 35^{\circ}\text{C}$ limit, assuring that the durability of the filter will not be affected by thermal stresses.

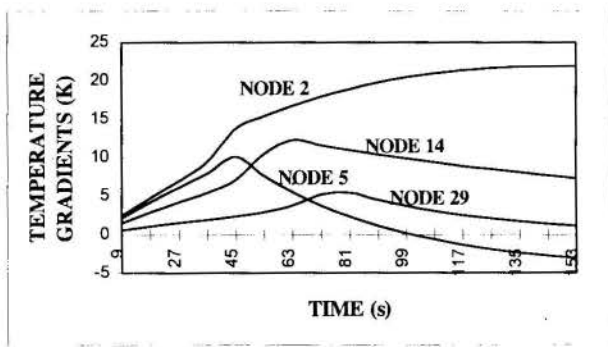


Figure 9. Simulation A

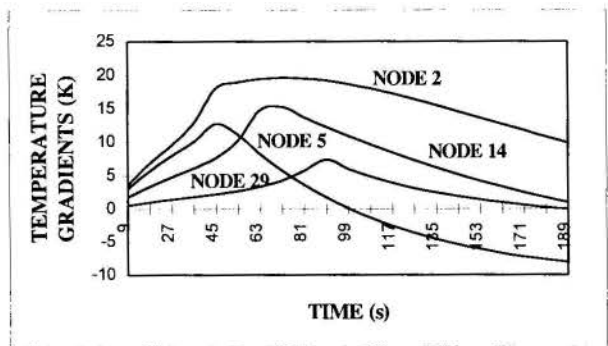


Figure 10. Simulation B

Figures 11 and 12 are plots of the outlet air temperatures along the filter for different moments of the regeneration process. They show schematically how combustion diffuses progressively through the filter.

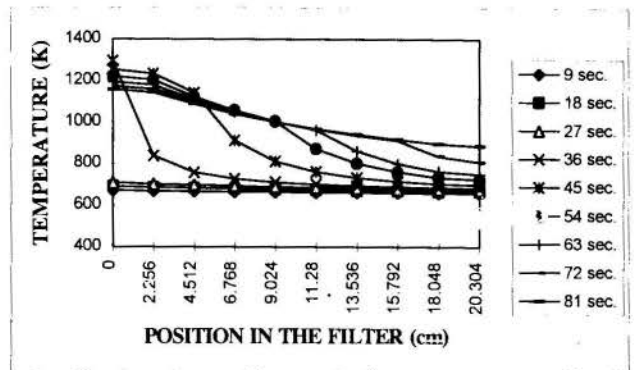


Figure 11. Simulation A

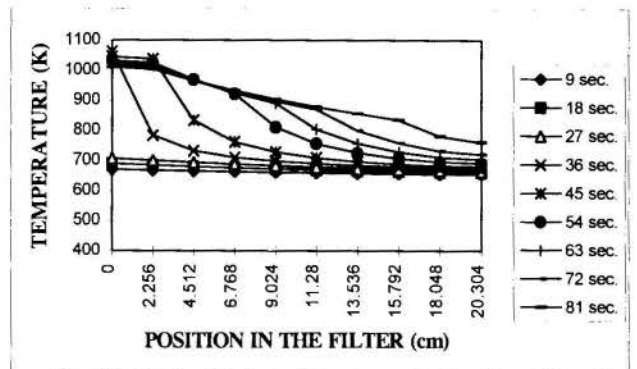


Figure 12. Simulation B

Finally, figures 13 and 14 show the percentage of regeneration achieved in the process with time. This percentage was calculated comparing the amount of soot found inside the filter at a certain moment to the initial load of soot in the filter. Simulation A showed a 47.8% of-regeneration after 153 seconds, when the simulation was stopped. For the same regenerating time, simulation B achieved a regeneration of 45.4%; for 189 seconds, 56.4%. In both cases, the results were approached by exponential equations, in order to estimate the time needed for the process to reach values of 95 and 99% of regeneration. The equations are shown below:

$$A: \%R = -1.432 e^{-0.0066t} + 1 \quad (8)$$

$$B: \%R = -1.446 e^{-0.0064t} + 1 \quad (9)$$

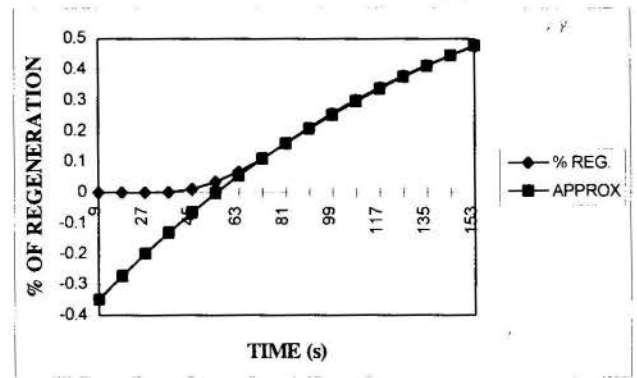


Figure 13. Simulation A

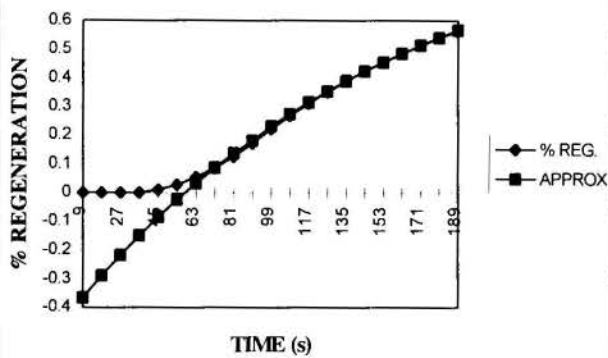


Figure 14. Simulation B

According to these, for simulation A, 508 and 752 seconds are needed for the process to reach 95 and 99% regeneration, respectively. For simulation B, 525 and 777 seconds respectively are needed. In other words, in order to achieve a 95% regeneration the expected limits are 8.47 and 8.75 minutes. For a 99% value, the limits are 12.53 and 12.95 minutes.

In all cases, the time needed for regeneration is far below the time needed to load the filter, which can be assumed to take something between 30 and 90 minutes depending on the conditions of load and speed of the engine. In this way, while one of the filters is being cleaned, the other one filters the exhaust gases with no inconvenience whatsoever, as the time needed for a filter to be loaded to a point where the increase in back pressure is important is far below the expected regenerating time.

CONCLUSIONS

According to the obtained results:

- Energy stored in the thermal energy reservoir is enough to start the regeneration of the filter, and to take the process to a self-sustained regime.
- The time needed for regenerating one of the filters is by far less than the time needed to load it.
- The inverse regeneration air-flow helps dissipate the heat released during the combustion of soot.
- The ceramic material of the filter is not affected by high local temperatures encountered during the process in this scheme.
- The durability of the filter is not diminished by thermal stresses due to high temperature gradients.
- The proposed regenerating system is theoretically feasible and capable of achieving the limit values set by the Mexican Government, the EPA and the European Community.
- Simulation results have to be compared with experimental evidence.

ACKNOWLEDGEMENTS

Authors are deeply indebted to the following organizations for monetary and materials sponsorship that have helped to develop the project :

1. Comité de Proyectos y Estudios para la Recuperación Ambiental (COPERA), Mexico City Government
2. Programa Universitario del Medio Ambiente (PUMA), Universidad Nal. Autónoma de México, UNAM
3. Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), National Council of Science and Technology of the Mexican Government
4. Mercedes-Benz México S.A. de C.V.
5. Nelson Industries Inc., USA

6. Allied Signal Inc., Torrance, CA, USA
7. Degussa, A.G. Frankfurt, Germany
8. Industrias Nelson, S.A. de C.V. Mexico City, Mexico

NOMENCLATURE

- M regenerating air mass flow
 P air pressure
 R air specific constant
 A_0 transversal area of the channel
 T temperature
 t time
 C_p specific heat of air
 h convection heat transfer coefficient
 l channel width
 e channel wall thickness
 p porosity of ceramic material
 ρ ceramic material density
 C specific heat of ceramic material
 x longitudinal direction
 y transversal direction
 Q_R heat released by the combustion reaction of soot
 R_{O_2} oxygen consumption rate during combustion
 k combustion rate constant
 O_2 oxygen concentration in the air

subscripts :

- x longitudinal direction
 y transversal direction
 i inlet channel
 o outlet channel
 f filter wall

REFERENCES

- Anonymous, (1993). Secretaria de Desarrollo Social, NOM-PA-CCAT-007/93, Emission Levels of Diesel Powered Vehicles with GVW Over 3857 kg, published in the "Diario Oficial de la Federación", 23.06.1993 (Official Mexican Government Newspaper)
- Anonymous, (1988) National Institute for Occupational Safety and Health, "Carcinogenic Effects of the Exposure to Diesel Exhaust". Current Intelligence Bulletin 50. Department of Human Health and Services. NIOSH Publication No. 88-116
- Engler, B., and Müller, W., (1994). Degussa, A.G., Anorganische Chemieprodukte Autoabgaskatalysatoren, private communication
- Gilot, P. et. al. (1993). "Determination of Kinetic Data for Soot Oxidation. Modeling of Competition Between Oxygen Diffusion and Reaction During Thermogravimetric Analysis", Combustion and Flame, vol. 95, pp. 87-100
- Hardenberg, H.O., Daudel, H.L. and Ermansdörfer, H.J., (1987). "Particulate Trap Regeneration Induced by Means of Oxidizing Agents Injected into the Exhaust Gas", SAE Paper 870016
- Kojetin, P., Janezich, F., Sura, L., and Tuma, D., (1993). "Production Experience of a Ceramic Wall Flow Electric Regeneration Diesel Particulate Trap", Sae Paper 930129, Sp-943, Detroit, MI.
- MacDonald, J.S. and Simon, G.M., (1988). "Development of a Particulate Trap System for a Heavy-Duty Diesel Engine", SAE Paper 880006



PODER TERMOELÉTRICO EM CIRCUITOS A ELETRODOS DEPOSITADOS

Saulo Güths e Rogério Vilain

Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas de Materiais (LMPT)
Departamento de Engenharia Mecânica - Universidade Federal de Santa Catarina
CxP 476 CEP 88049-000 Florianópolis - SC



RESUMO

Afim de facilitar o processo de fabricação de termopilhas, tem-se adotado a tecnologia de fabricação de circuitos termoelétricos a eletrodos depositados, onde a medição da temperatura é distribuída numa região que depende das propriedades elétricas e dimensionais dos dois metais em contato. O conhecimento dessa região tem grande importância na otimização de instrumentos que utilizam essa técnica de medição da temperatura. Nesse trabalho será apresentado os resultados de um estudo teórico dessa região de transição do poder termoelétrico. Será apresentado uma relação entre a variação do poder termoelétrico em função de grandezas adimensionalizadas.

INTRODUÇÃO

Os fenômenos termoelétricos são largamente utilizados no campo da instrumentação (ex. termopares) e da conversão de energia (resfriamento ou geração termoelétrica). Os desenvolvimentos científicos neste campo estão frequentemente centrados na obtenção de materiais com poder termoelétrico elevados. Dispositivos a termopilha são realizados com o objetivo de aumentar o fraco valor da força eletromotriz (f.e.m.) termoelétrica. Contudo a dificuldade de realizar as junções termoelétricas de maneira simples e barata acabou bloqueando a difusão dessa tecnologia no meio industrial. A tecnologia de fabricação de circuitos bimetalicos via deposição eletrolítica (ou química) facilitou a construção de termopilhas pois eliminou a necessidade de soldagem das junções (Calvet e Prat, 1956, Thery e Pauquet, 1980). A principal aplicação desse tipo de termopilha é a construção de transdutores de fluxo de calor (Andreta et al., 1983, Thery e Marechal, 1980). Nesse dispositivo em particular a sensibilidade de medição é fortemente dependente das propriedades termofísicas dos materiais utilizados e das dimensões de cada célula (Güths, 1994). A otimização dos parâmetros dimensionais requer o conhecimento do ponto exato onde se dá a medição da temperatura em cada junção da termopilha.

Neste trabalho será apresentada uma análise teórica do poder termoelétrico em circuitos a eletrodos depositados, com ênfase na região de interface da junção onde a medição da temperatura é realizada. Será igualmente apresentado um estudo do poder termoelétrico para diferentes pares de materiais em função das espessuras dos pares termoelétricos.

CIRCUITO BIMETÁLICO

Como descrito no parágrafo anterior, a necessidade de simplificar o modo de fabricação de circuitos termoelétricos (eliminando a soldagem) conduziu à utilização de circuitos bimetalicos, realizados por deposição eletrolítica (ou química) de uma camada metálica de grande condutividade (material 2- Fig. 1) sobre um suporte metálico de condutividade inferior e poder termoelétrico diferente (material 1, Fig.1).

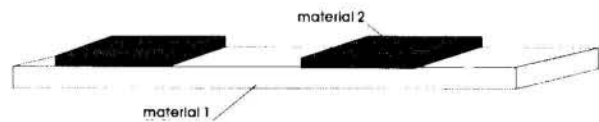


Figura 1 - Circuito termoelétrico bimetalico

Para definir o poder termoelétrico ao longo de um tal circuito, a definição de Hannay (1959) será utilizada: "o poder termoelétrico de um material é a medida da tendência dos portadores livres de se deslocar de regiões quentes para regiões frias. Esse deslocamento resulta na aparição de uma diferença de potencial de Seebeck de amplitude suficiente para anular a corrente elétrica criada pelo deslocamento de cargas no circuito."

Para calcular o poder termoelétrico num ponto qualquer de um circuito não-homogêneo deve-se, então, estabelecer a relação entre a corrente elétrica neste ponto e os gradientes de potencial e de temperatura, e depois deduzir qual relação deve existir entre essas quantidades para anular a corrente elétrica nesse ponto do circuito.

Regiões Metálicas Homogêneas

Nas partes não recobertas do circuito bimetalico em presença de um gradiente térmico, a lei de Ohm local se generaliza sob a forma:

$$j = \sigma E - \sigma \alpha \nabla T \quad (1)$$

onde j = vetor densidade de corrente (A/m), σ = condutividade elétrica (Siemens/m), α = poder termoelétrico (V/K), E = vetor gradiente de potencial elétrico (V/m) e ∇T = vetor gradiente de temperatura (K/m). Para anular a densidade de corrente local, o gradiente de potencial elétrico deve ser proporcional ao gradiente de temperatura. A corrente elétrica será anulada se:

$$\alpha = \frac{E}{\nabla T} \quad (2)$$

o que corresponde à definição habitual do poder termoelétrico.

Regiões Recobertas pelo Depósito Metálico

O mesmo método pode ser utilizado para determinar o poder termoelétrico nas regiões recobertas pelo depósito metálico. Considerando a temperatura constante segundo a direção transversal do circuito, a corrente elétrica circulando segundo a direção axial deve ser nula.

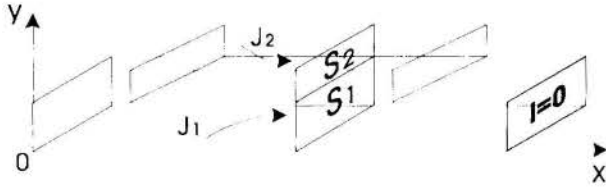


Figura 2 - Definição das superfícies de integração das densidades de corrente

As expressões das correntes I_1 e I_2 atravessando as superfícies transversais são obtidas através das relações de definição:

$$I_1 = \iint_{S_1} j_1 dS_1 \quad e \quad I_2 = \iint_{S_2} j_2 dS_2 \quad (3)$$

onde S_1, S_2 = área da seções transversais 1 e 2 (m^2). Quando as espessuras do depósito e do substrato são constantes e as linhas de corrente plenamente desenvolvidas, as equações precedentes se reduzem à:

$$I_1 = S_1 j_1 \quad e \quad I_2 = S_2 j_2 \quad (4)$$

Por definição, a corrente atravessando a seção transversal da camada bimetalica segundo a direção O-x deve ser nula, ou seja:

$$I = (\sigma_1 S_1 + \sigma_2 S_2) E_x - (\alpha_1 \sigma_1 S_1 + \alpha_2 \sigma_2 S_2) \Delta T_x = 0 \quad (5)$$

Essa expressão pode ser identificada como a lei de Ohm generalizada aplicada aos condutores apresentando uma condutividade elétrica equivalente (σ_{eq}).

$$I = \sigma_{eq} (S_1 + S_2) E_x - \sigma_{eq} \alpha_{eq} (S_1 + S_2) \Delta T_x = 0 \quad (6)$$

Por comparação das equações 5 e 6 obtêm-se que a condutividade linear pode ser expressa por:

$$\sigma_{eq} (S_1 + S_2) = \sigma_1 S_1 + \sigma_2 S_2 \quad (7)$$

ou seja

$$\sigma_{eq} = \frac{\sigma_1 S_1 + \sigma_2 S_2}{S_1 + S_2} \quad (8)$$

o que conduz a um poder termoelétrico equivalente (α_{eq}) dado pela relação:

$$\alpha_{eq} = \frac{\alpha_1 \sigma_1 S_1 + \alpha_2 \sigma_2 S_2}{\sigma_1 S_1 + \sigma_2 S_2} \quad (9)$$

O poder termoelétrico equivalente (α_{eq}) depende então não somente dos poderes termoelétricos dos materiais envolvidos, mas igualmente das condutividades elétricas e das áreas da seções transversais.

EFEITO SEEBECK EM CIRCUITOS BIMETÁLICOS

Um termopar realizado por metalização parcial de um fio ou filme metálico gera uma diferença de potencial, por efeito Seebeck, proporcional à diferença de temperatura entre as extremidades dos eletrodos depositados (junções termoelétricas).

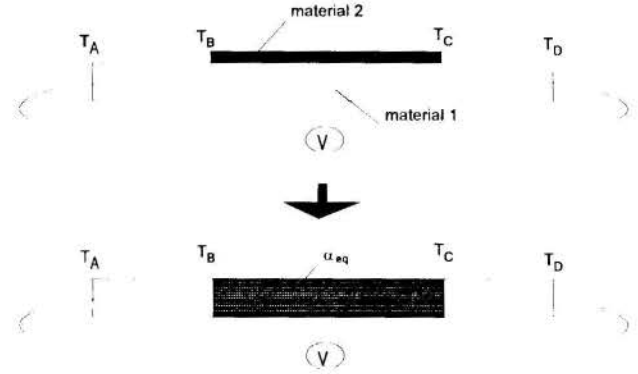


Figura 3 - Termopar a eletrodo depositado: circuito equivalente

A diferença de potencial entre os pontos A e B do circuito (Fig.3) é obtida por integração do gradiente de potencial elétrico entre estes dois pontos. Como:

$$E = \alpha \Delta T \quad \text{ou} \quad \frac{\partial V}{\partial x} = \alpha \frac{\partial T}{\partial x} \quad (10)$$

a integração de A a B conduz à:

$$V_B - V_A = \int_A^B \alpha_1 dT \quad (11)$$

Seguindo a mesma metodologia, a diferença de potencial medida por efeito Seebeck (V) é obtida pela integração do gradiente de potencial sobre o caminho A-D.

$$V = \int_A^B \alpha_1 dT + \int_B^C \alpha_{eq} dT + \int_C^D \alpha_1 dT \quad (12)$$

e considerando que as temperaturas nas extremidades do circuito são iguais ($T_A=T_D$), então:

$$V = (\alpha_1 - \alpha_{eq})(T_B - T_C) \quad (13)$$

Ou seja, a f.e.m. Seebeck é proporcional a diferença de poder termoelétrico entre o substrato e a região com o depósito metálico. A Fig. 4 mostra a diferença de poder termoelétrico de alguns pares de materiais em função da relação de áreas (S_2/S_1) dos mesmos.

Nota-se que o bismuto depositado sobre uma base de Antimônio atinge uma grande diferença de poder termoelétrico, mas requer uma grande espessura de depósito. A causa é a baixa diferença de condutividade elétrica dos dois materiais. Na fabricação de termopilhas com pequenas dimensões essa característica pode ser prejudicial, pois a alta condutância térmica provoca um "curto circuito" térmico entre as junções, diminuindo a sensibilidade do dispositivo. O mesmo pode ser dito para o par ferro/Constantan.

Já os pares cobre/Constantan e ouro/Constantan (sendo o Constantan o substrato), apesar de apresentar uma diferença de poder termoelétrico apenas regular, não requerem um depósito muito espesso. O motivo é o alto contraste de condutividade

elétrica dos dois materiais. O par Chromel/Alumel não apresenta grande interesse prático, pois a deposição desta liga é de difícil realização.

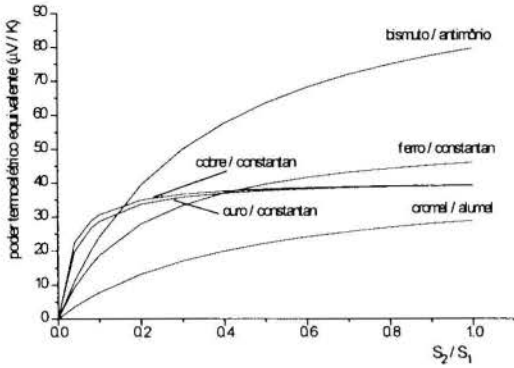


Figura 4 - Diferença do poder termoeletrico em função da relação de áreas (S₂/S₁) (índice 2 = depósito; índice 1 = substrato)

REGIÃO DE INTERFACE

Na otimização de dispositivos que utilizam circuitos a eletrodos depositados (ex. fluxímetros), o conhecimento do ponto exato onde ocorre a medição da temperatura tem uma importância fundamental. Conforme visto na Eq.13 a f.e.m. Seebeck aparece quando existe uma diferença de poder termoeletrico, no caso α₁-α_{eq}. Como α_{eq} é constante ao longo da região depositada, a medição da temperatura ocorre na região de transição em que α_{eq} evolui para α₁. Para caracterizar de uma maneira mais simples a evolução de α_{eq}, considera-se o circuito em questão, conectado a um voltímetro com resistência interna R. Se o termopar produz uma f.e.m. então haverá uma corrente elétrica circulando, e ela atravessará preferencialmente a camada depositada que necessariamente apresenta uma maior condutividade elétrica. A Fig. 5 mostra esquematicamente as linhas de corrente.

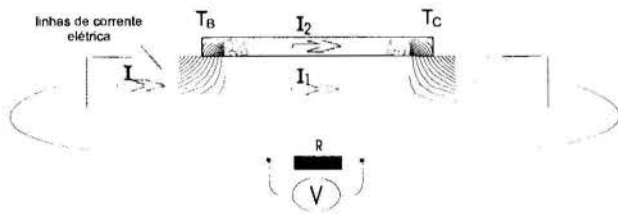


Figura 5 - Linhas de corrente em um circuito bimetalico

Quando uma corrente elétrica I atravessa o circuito, a repartição entre os condutores (indicados por 1 e 2) se efetua segundo as relações:

$$I_1 = I \cdot \frac{\sigma_1 S_1}{\sigma_1 S_1 + \sigma_2 S_2} \quad \text{e} \quad I_2 = I \cdot \frac{\sigma_2 S_2}{\sigma_1 S_1 + \sigma_2 S_2} \quad (14)$$

e substituindo na Eq. 9 obtêm-se

$$\alpha_{eq} = \frac{\alpha_1 I_1 + \alpha_2 I_2}{I} \quad (15)$$

A análise das linhas de corrente pode, dessa forma, determinar a evolução do poder termoeletrico. As linhas de corrente foram determinadas através de um programa de simulação numerica (programa Fluent) empregando uma analogia termica-elétrica, onde:

- condutividade termica = condutividade elétrica
- temperatura = potencial elétrico
- fluxo de calor = corrente elétrica

A região de transição da célula termoeletrica apresentada na Fig. 6 foi discretizada: 120 x 30 células, coordenadas ortogonais, problema bidimensional; e como condições de contorno foram consideradas as superficies superior e inferior isoladas, e as faces direita e esquerda submetidas a temperaturas constantes e diferentes. A Fig.6 mostra esquematicamente as linhas de fluxo (que correspondem as linhas de corrente elétrica) na região de interface depósito-substrato, e também a evolução do poder termoeletrico nessa região para um substrato de constantan com 25 µm de espessura e um depósito de cobre com 5 µm de espessura.

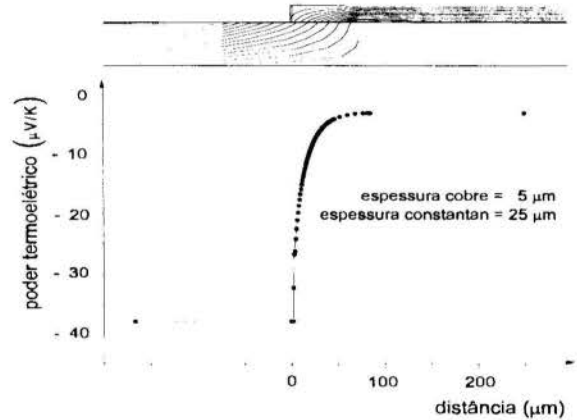


Figura 6 - Linhas de corrente e poder termoeletrico para 25 µm de constantan e 5 µm de cobre

Nota-se que a transição do poder termoeletrico ocorre nos primeiros 50 µm contados a partir do início da junção. A Fig. 7 mostra a distância em que ocorre 98% da variação do poder termoeletrico para o par cobre/constantan em função da relação de espessuras.

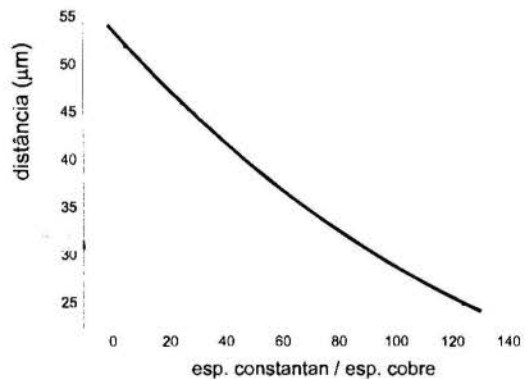


Figura 7 - Distância a partir da junção em que ocorre 98% da variação do poder termoeletrico para o par cobre/constantan em função da relação de espessuras

Os resultados apresentados na Fig.7 indicam que a variação do poder termoelétrico ocorre quase que totalmente em uma região inferior a 60 μm , contados a partir do início da junção. Esse resultado auxilia na determinação das células de medição da temperatura numa discretização de dispositivos que utilizam circuitos termoelétricos a eletrodos depositados.

CONCLUSÃO

A análise das linhas de corrente circulando pelo circuito termoelétrico permitiu a determinação do poder termoelétrico em cada ponto do circuito. Verificou-se que a transição do poder termoelétrico ocorre nos primeiros 50 μm contados a partir do início de uma junção cobre/Constantan. Numa análise de diferentes pares de materiais determinou-se a diferença de poder termoelétrico em função da relação de espessura dos materiais. Os resultados apresentados auxiliam na determinação das células de medição da temperatura numa discretização de dispositivos que utilizam circuitos termoelétricos a eletrodos depositados.

REFERÊNCIAS

Andreta, A., Bartoli, B., Coluzzi, B., Cuomo, V. e De Stefano, S., 1983, "Simple Heat Flux Meter", *Rev. Sci. Instrum.*, Vol.2, pp.374-380.

Calvet, E. e Prat, H., 1956, "Les Effets Thermoélectriques". Microcalorimétrie, Ed. Masson, pp. 13-20.

Güths, S., 1994, "Anémomètre a Effet Peltier et Fluxmètre Thermique: Conception et Réalisation. Application à l'Etude de la Convection Naturelle". Thèse de Doctorat, Université d'Artois, France.

Hannay, N.B., 1959, "Semiconductors". Reinhold, Publishing Corp., New-York.

Thery, P. e Pauquet, J., 1980, "Propriétés Thermoélectriques des Systèmes à Deux Couches Conductrices Superposées". *J. of Physics E. Sci. Instruments*, vol. 13, pp. 323-327.

Thery, P. e Marechal, J.C., 1980, "Etude et Caractérisation d'un Nouveau Fluxmètre", *J. of Physics E. Sci. Instrum.*, Vol.13, pp.177-185.

ABSTRACT

The thermopile confection with a great number of junctions has a inconvenient the needed of welding the junctions. In order to order to overcome this trouble the plated thermopiles technology has been adopted. The temperature measure is distributed in a region that depends of the electrical properties and dimensional characteristics of the metals in contact. Than is important know this region for optimization of devices based in this principle. Will be presented a theoretical analysis of the transition region of thermoelectric power, and a relation between the thermoelectric power and the characteristic dimension.



HEAT FLUX MEASUREMENT APPLIED TO THE STUDY OF THERMAL HEAT TRANSFERS IN A COMPOSITE SOLAR WALL



Zalewski L, Lassue S. and Duthoit B.

* L.A.M.H (Laboratoire de l'Artois de Mécanique et Habitat),
 Equipe Capteurs et instrumentation
 Université d'Artois - IUPIA- Rue de l'université.
 62408 Bethune Cedex, France

Summary

The object of this communication is to show how new heat flux sensors conceived in our laboratory, can be used in the study of heat transfer in a ventilated air gap which is an important part of a composite solar wall. First we present the experimental configuration and some results about the general functioning of the wall. Then, local air velocity and temperature measurements are realised to point the experimental difficulties in the determination of the energy balance on air throughing the wall. Different methods are compared and we show that heat flux measurement allowed us to measure precisely and directly the heat transfers in the wall with a very simple experimental device.

INTRODUCTION

The use of solar energy for the heating of buildings, through storage walls, has been the object of many studies since the works of Trombe (Trombe,1974, Bilgen,1986, Zrikem,1987). The standard Trombe wall suffers large thermal losses during cold and less sunny periods as well as undesirable energy transfers in the summer. With the help of architects, we have designed a solar wall of composite type which includes an insulating panel located at the back of the storage wall which eliminates the previously mentioned drawbacks. Energy is transferred from the outside to the inside by conduction through the massive wall and then by convection, using the phenomenon of thermo-circulation of air between the wall and the insulating partition. This wall was built into a test cell of GENEC at CADARACHE (in south eastern France), and was tested under realistic operating conditions.

We have instrumented and worked with it for more than one year in order to study its operation during the heating period and during the summer. The main originality of this work is the use of heat thermal fluxmeters. These sensors are particularly interesting as their slight thickness (≈ 2 mm) and their metallic nature (of a printed circuit type) do not interfere so much when conducting measurements. Their time constant of 1 second makes them a perfectly adapted instrument for the study of heat transfer under variable operating conditions (Thery,1980 Leclercq,1982).

In this article, we present how, by adjustment of the emissivity of the heat flux sensors we can obtain very precisely informations on the different heat exchanges (conductive, radiative and convective) which have a great effect on the energy performance of this solar component.

EXPERIMENTAL SET-UP

The experiment was performed in a rural environment in southeastern France at Cadarache (Latitude: 43°39' 18" N; Longitude: 5° 46' 21" E; Altitude: 268 m).

The test cell consists of a single room. The underfloor space and the attic are subjected to natural ventilation. The dimensions of the cell are shown in Figures 1 et 2. The south façade consists of a TROMBE wall of composite type.

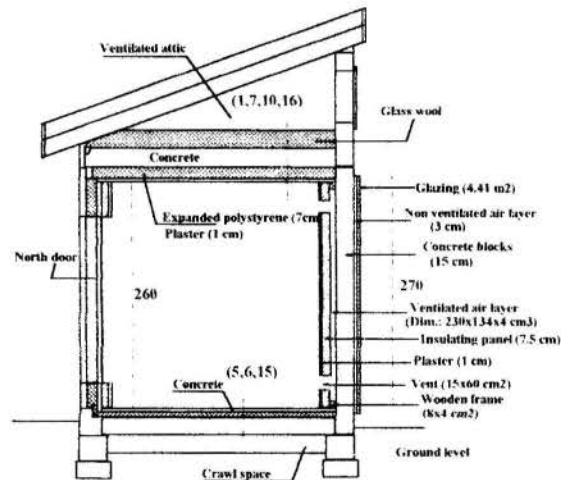


Figure 1 - Vertical cross section of the test cell.

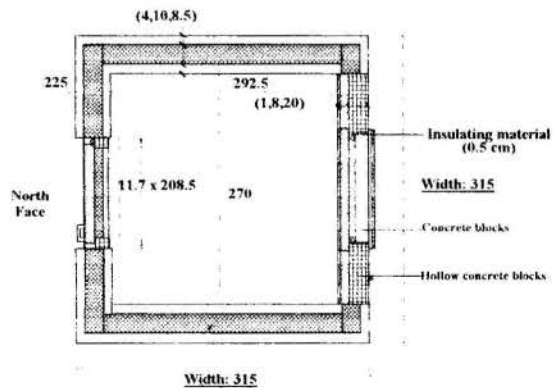


Figure 2 - Horizontal cross section of the test cell

The storage wall is made up of solid concrete blocks. An insulating panel was placed around the sides of the storage wall to reduce lateral heat losses. The insulating wall limiting the ventilated air layer is placed on a wooden frame and can be moved

in order to allow access to the instrumentation. This wooden frame also limits the heat transfer between the air and the concrete blocks.

This paragraph details the instrumentation set up as well as the location of some of the sensors (Figures 3 and 4).

Many sensors have been used:

- 8 heat fluxmeters of tangential gradient type (dimensions: 15x15 cm²), of average sensitivity 0.100mV.m²/W including an integrated type T thermocouple.

- 9 K thermocouples ,
- 2 hot wire anemometers ,
- 3 air temperature probes.
- 1 dry resultant temperature probe (black globe).
- 3 pyranometers measuring the solar vertical global flux, the solar horizontal global flux and the horizontal diffuse flux respectively,
- 1 outside temperature probe.
- 1 anemometer measuring the wind speed at 10 meters above ground level.

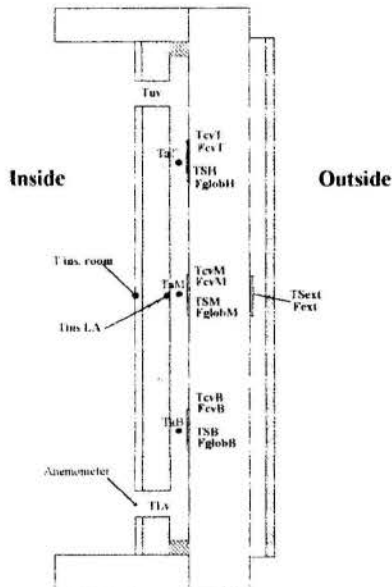


Figure 3 - Vertical cross section of the composite wall

Inside the ventilated air layer, an aluminium film (low emissivity in infrared) placed on some heat fluxmeters allows the convective heat flux (FevT, FevM, FevB) exchanged between the wall and the air circulating in the air layer to be evaluated. The heat fluxmeters, covered by black film, allow to measure the global flux exchanged, in other words : the radiative flux exchanged between the wall and the insulating panel facing the sensor + the convective flux cited earlier. The integrated thermocouples of these heat fluxmeters will determine an average wall temperature.

EXPERIMENTAL RESULTS

Winter period The first year measurements revealed several phenomena and led us to certain conclusions. After the study of the exchanges inside the exterior air layer, the space between the outside face of the wall and the transparent cover was set at 3 cm in order to maximize the solar supplies and to reduce thermal losses. In order to limit night losses, the glazing was replaced by a transparent polycarbonate sheet, which has a lower solar transmission ($\tau \approx 0.60$) but also a lower heat loss coefficient.

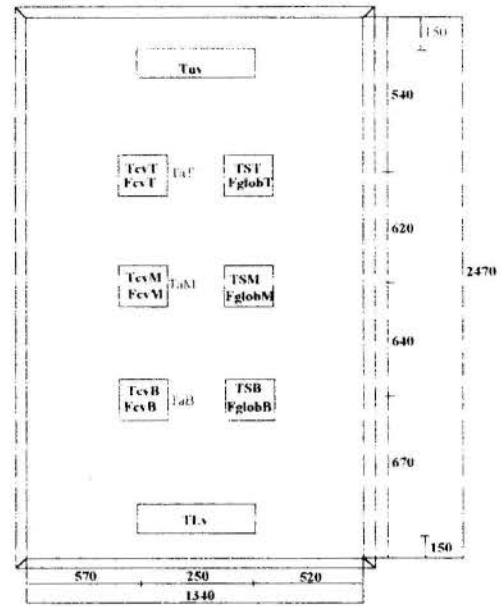


Figure 4 - View of the internal side of the wall

An inverse thermosiphon phenomenon was observed during days with less or no sun in the winter. Indeed, when the wall becomes colder than the room, a circulation of air, from the upper vent to the lower vent, takes place and cools the room. To avoid this phenomenon, two systems were tested :

- The first consists in putting a flexible plastic film on the lower vent (see figure below). The position of this film varies according to the direction of the flow. In a case where the wall heats the air, a slight depression due to natural convection displaces the film from the vent. On the other hand, the plastic film is pressed against the vent which prevents any circulation in the air layer.

- The second consists of a system which controls a motorized shutter with the help of a heat fluxmeter via an electronic command box.

The heat fluxmeter placed on the inside of the storage wall gives the necessary information to the command box. When the flux is positive, the shutter is open and when negative, closed. In the summer position, the shutter closes when the flux is positive and opens when the flux is negative. This operation can sometimes lead to cooling.

Figures 5 and 6 indicate the temperature and flowrate levels recorded during two winter days.

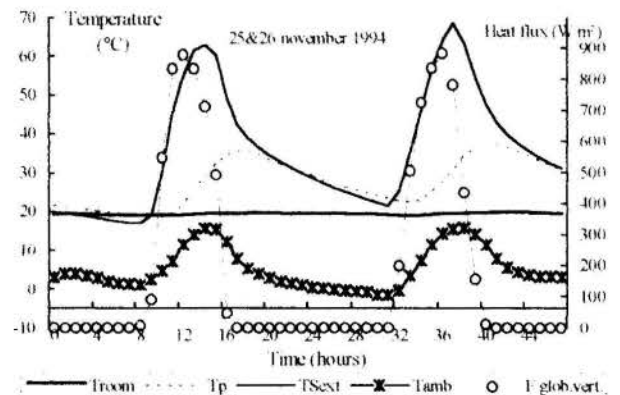


Figure 5 - Winter measurements

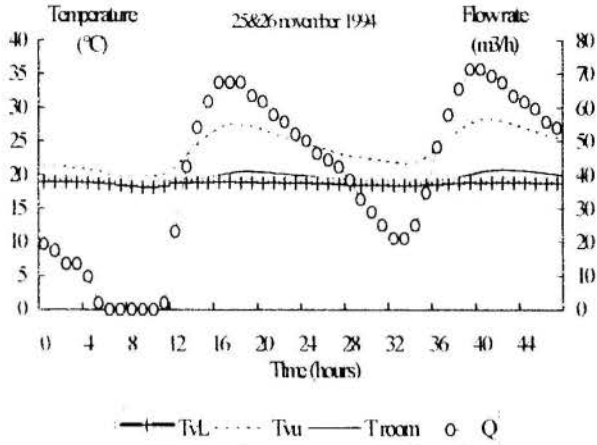


Figure 6 - Operation of the ventilated layer (Winter measurements)

Figures 5 and 6 show the proper operation of the wall. One must note the temperature levels reached by the storage mass (68°C on November 26 on the outside part, 38 °C on the inside part) and the temperature of air outlet (T_{uv}) reaches 30 °C. The air flow rate reaches 70 m³/h in the beginning of the evening. It should also be pointed out that on November 25, following a bad day, the wall being completely discharged, the inverse thermosiphon is avoided (from 6H to 10H) thanks to the motorized shutter.

Summer period Figure 7 indicates first that the solar incident flux is less in the summer on a vertical plane surface oriented south (900 W/m² in winter, 500 W/m² in the summer), due to the position of the sun. Moreover, the insulating panel plays its role of barrier against undesirable inputs during the summer period (the temperature of the insulating panel on the inside facing is equivalent to the room temperature).

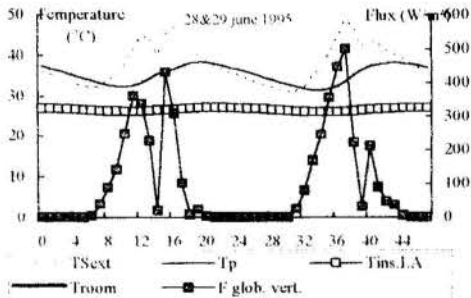


Figure 7 - Summer

ENERGY BALANCE ON AIR.

One of the essential objective of this work is to improve the performances of the wall in energy recuperation for solar heating of buildings. So we have to know precisely how the solar gains are transmitted to the rooms in particular by thermocirculation in the ventilated air layer. First we present here the classical experimental problems and then we show it is possible to acquire a better knowledge of the operation of the air layer from the thermal flux measurements. We performed the convective, radiative flux exchanges and thermal balance calculations on the air crossing the ventilated layer. The results presented below concerned the case in which the wall is working in energy transmission to the room, that

is the vents are opened. The air circulate naturally through the wall. We have steady ambient conditions in the room.

Usually, in this configuration, the estimation of the energy balance on air is based on temperatures and air flow measurement.

For each air vent, temperature and velocity profiles have been realised (figures 8 to 11). In the case of the temperatures we can observe that for the lower air vent the temperature is almost a constant (17 to 19 °C) with an average value which is the air temperature in the room. On the other hand the air temperature on the upper vent is not homogeneous, (from 20°C to 30°C). Then in this case it is very difficult to choose a good localisation for a characteristic air temperature measurement.

In a classical approach of the air energy balance we have to measure the air flow through the gap, then we realise some velocity profiles in the section area of the inlet and outlet of the air layer (70 cm x 16 cm). So we can observe very important variations in the upper one (figure 11)

This results show us the numerous problems to estimate precisely the heat gains by the solar wall for the building.

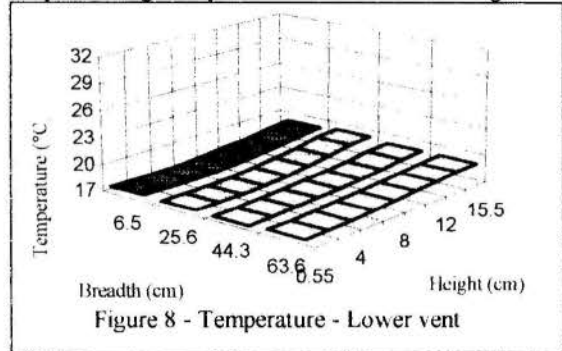


Figure 8 - Temperature - Lower vent

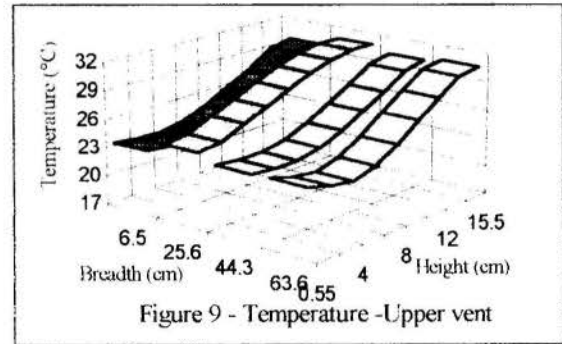
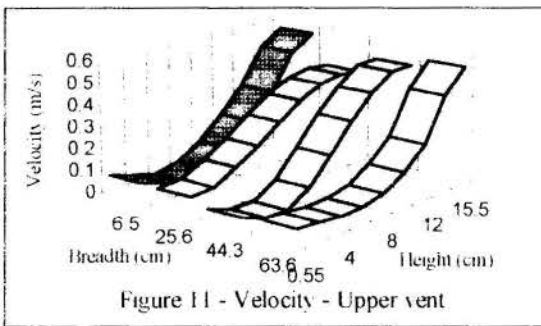
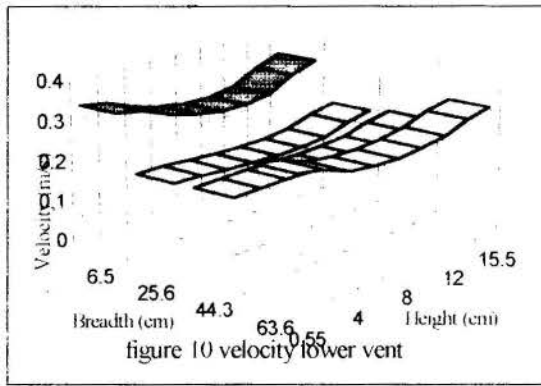


Figure 9 - Temperature -Upper vent

One other approach in the study of the type of component is to use adapted correlation from which it is possible to calculate the value of a convective exchange coefficient h_c. We are now talking about thermal exchanges by natural convection between the air and the walls of an open rectangular cavity with vents on the top and bottom parts. In this case we do not need air velocity but only temperature measurements. From bibliographical research we can collect some different correlations. This thermal transfer problem by natural convection in a vertical air channel is classical. It has been the subject of much research. The different boundary conditions (isothermal plates, constant flux) lead us to choose the correlations suited to our case. The natural convection operating conditions in a vertical heated channel go through three different transfer modes according to the RAYLEIGH number:

$$Ra = \frac{\beta g \Delta T L^3}{\nu a} \tag{1}$$

- 10⁷ < Ra Laminar flow.
- 10⁷ < Ra < 10⁹ Transition operating condition.
- 10⁹ < Ra Turbulent operating condition.



The correlations given below are correlations established in the case of a vertical and isothermal plate. In order to study these different correlations, we used the measurements of several days recorded at Cadarache. The measurement step and thus the calculation step is 5 minutes. The GRASHOF number ($Gr = Ra/Pr$) is higher than 10^8 during the studied period. The relations proposed by different authors for a number of GRASHOF between 10^8 and 10^{12} are :

(Churchill, 1975):

$$Nu = \left[0.825 + 0.387 (RaH^{0.17}) (1 + 0.67 Pr^{-0.56})^{0.3} \right]^2 \quad (2)$$

$$(Jaluria, 1980) : Nu = 0.13 Ra^{1.3} \quad (3)$$

$$(Fischenden, Saunders 1990) : Nu = 0.107 Gr^{1.3} \quad (4)$$

(Alambdari, Hammond 1983)

$$Nu = [(0.55 Gr^{1.3})^6 + (0.095 Gr^{1.3})^6]^{1/6} \quad (5)$$

(Alambdari, Hammond 1983)

$$hc = \left[\left(1.5 \left(\frac{\Delta T}{L} \right)^{1.1} \right)^n + \left(1.23 (\Delta T)^{1.1} \right)^n \right]^{1/n} \quad \text{with} \quad \Delta T = (T_p - T_{fluid}) \quad (6)$$

In fact we can see from figure 12 that there is important variations (~25%) in the hc values according the different authors. The figure 7 present the obtained results with calculated coefficients on a two days period. We can see that it is difficult to make a good choice. Every experimental situation is special and remember that temperature definition are not evident.

STUDY OF THE THERMAL EXCHANGES IN THE VENTILATED AIR LAYER

Study of convective heat exchange.

These different correlations will be compared to the results obtained with heat fluxmeter measurements performed on the internal face of the storage wall. Evaluation of the experimental

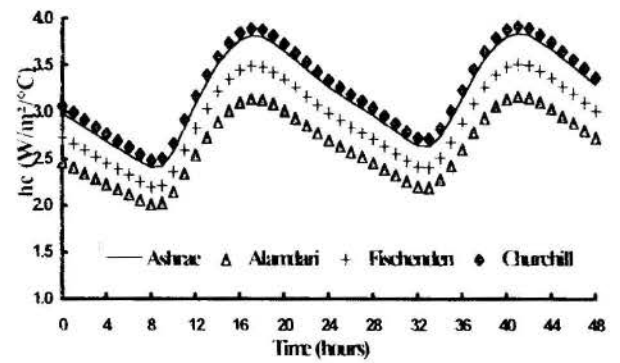


Figure 12 Convective exchange coefficients.

convective exchange coefficient is possible by modifying the infra-red emissivity of the heat fluxmeters. A heat fluxmeter covered by a polished aluminium film of very low infra-red emissivity will only be sensitive to the heat transfer by convection

We then have:

$$\text{Flux convective measured} = hc_{exp} (T_p - T_{fluid}) \quad (7)$$

in which Flux convective measured is the average flux measured by the "reflective" heat fluxmeters. T_p is the average temperature of the partition, and T_{fluid} is the average temperature of the air $[(T_{uv} + T_{lv})/2]$

On the other hand, in the case where the flux sensor is covered with a film having an emissivity close to that of a concrete partition ($\epsilon \approx 1$), the measured flux is then the sum of the thermal exchanges by convection and by radiation between the wall and its environment. It is important to note that the aluminium film locally disrupts the exchanges by modifying the value of the surface temperature. The radiative component of the flux can be obtained by making the difference between the flux using the two types of film without neglecting to make a slight correction in surface temperature for the calculation of the convective component (Lassue, 1989 and Zalewski, 1992).

Comparison of the different calculated flux and the experimental flux. Only the flux corresponding to the CHURCHILL, FISCHENDEN and ALAMBDARI correlations will be presented in Figure n°13

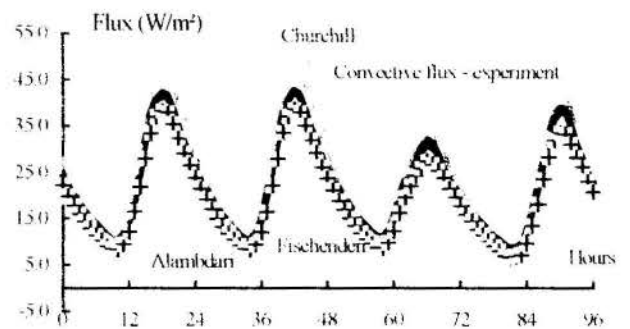


Figure 13: Convective heat flux.

The correlations closest to the experimental flux are the correlations given for a vertical plane plate with constant temperature. The hypothesis of non-interaction of the 2 plates is verified. The Fischenden correlation seems to be the best suited to evaluate the flux exchanged in the air layer. The convective exchanges between the insulating panel and the air can be evaluated in the same way. The sum of the convective exchanges

will lead us to the evaluation of the energy exchanged in the air layer.

Energy results inside the air layer: A precise knowledge of the energy balance of the air crossing the ventilated layer is a key point in determining the efficiency of the solar wall we designed, for the thermal energy is transmitted to the room via the ventilated air layer. The main difficulty comes from the assessment of the air flow rate in the air layer. Three methods are compared in order to use in the best possible way, the instrumentation set up, and especially to validate one approach when compared to another.

The results presented below were obtained over several winter days (from the 8th to the 11th April 1995). The acquisition step is 5 minutes. The circulation in the air layer was unhindered, the room was not heated other than by the heat inputs of the wall.

Results determined from calculated convective flux: Use of heat fluxmeter sensors showed that the Fishenden correlation allowed us to instantly and accurately calculate the quantity of energy transmitted to the air by the wall. This correlation will also be applied to the calculation of convective flux (low) exchanged between the air and the insulating panel. The energy transmitted to the air is obtained by the following calculation.

$$dEn = [Flux_{wall} \cdot Flux_{ins_panel}] \cdot Sech \cdot dt \quad (8)$$

in which Sech is the exchange surface which corresponds to the product of the width of the air layer by the distance between the vents.

Energy balance on air: This method is tricky as it requires a knowledge of the flowrate in the air layer and of the temperatures (TLv et Tuv) at the inlet and the outlet vents in the insulating panel respectively.

Recordings of air speed profiles and of air temperatures performed on the vents show that in our experimental configuration, local measurements are not recommended. Mappings at the upper vent level allowed us to determine the location which would give the average temperature (Tuv) from a local measurement. By using an arithmetical method (Log-Linear) we were able to determine the average speed (Vave) defined from the local speed measurements at the lower vent level. At the same time, another anemometer is placed in the center of the lower vent (Vcentral). This measured speed (Vcentral) is used as a reference to establish a relation between the central speed and the average speed.

$$Vave = COB \times v_{central} \quad (9)$$

in which COB is a simple coefficient with a numerical value depending not only on the size of the vents but also on the flowrate. In spite of this, for a precise vent size, the determination of the value of the coefficient (COB) is very easy to reproduce according to the number of tests and does not vary much when the flowrate is low (less than 10%).

In this case the energy balance of the air crossing the ventilated layer will be written:

$$En = \rho C_p S_{vent} V_{ave} (Tuv - Tlv) \quad (10)$$

Head loss considerations: The flow in the air layer is performed naturally by thermosiphon. The flowrate is directly linked to:

- The air temperature difference existing between the top vent, and the bottom vent.
- The sum of the head loss due to the passage through the vents and the friction in the ventilated layer.

The global heat loss, due to friction and to the singular heat

$$\text{losses, is equal to } \Delta H_{global} = \zeta_{global} \times \frac{\gamma_M V_{LA}^2}{2g} \quad (11)$$

in which ζ_{global} the sum of the head loss coefficients,

V_{LA} is the speed in the air layer

γ_M is the specific average weight of the air.

By assimilating the air to a perfect gas, by setting the hypothesis of a permanent and unidimensional flow following the vertical (z) and by neglecting the viscosity effects, one can write that the head loss between the entry (lower vent) and the exit of the channel (upper vent) is equivalent to:

$$\Delta H_{global} = \int_{TLV}^{TUV} \gamma dz \quad (12)$$

Supposing that the temperature varies in a linear way, from the two previous relations we can deduce the air speed in the ventilated layer.

$$V_{LA} = Cd \times \sqrt{gH(T_{uv} - T_{lv}) / [(T_{uv} + T_{lv})]} \text{ in m/s} \quad (13)$$

in which $C_d = \sqrt{\frac{2}{\zeta_{global}}}$ is a discharge coefficient

With the sum of the head loss coefficients thus determined, it is then possible to calculate the air flowrate in the air layer.

$$Q = Cd S_{LA} \sqrt{gH \frac{T_{uv} - T_{lv}}{T_{uv} + T_{lv}}} \times 3600 \text{ (m}^3/\text{h)} \quad (14)$$

The point of this method is to be able to deduce the air flowrate only from the measurements of the air temperature at the vent level at the top and at the bottom of the insulated panel. We must nevertheless be careful as several approximations are necessary to finally obtain the following energy results:

$$En \approx \rho C_p Q (Tuv - TLV) \quad (15)$$

Comparison of the various different results: The comparison of these three assessments of the thermal energy to the room is shown in Figure 14 for a 4 days period.

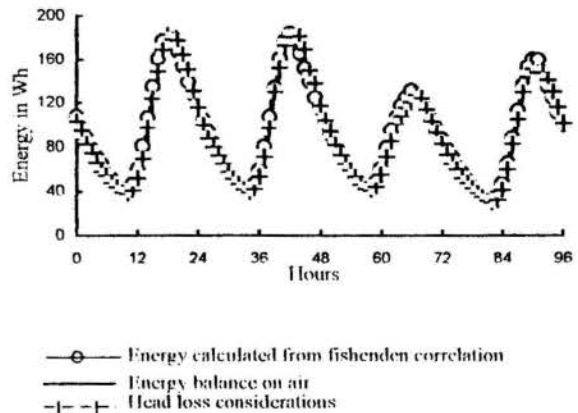


Figure 14: Comparaison between the 3 methods.

The good agreement between these curves allows us to validate each of the approaches during a determined experimental period. From this result, the precision of the correlations used for the calculation of the convective exchanges can be verified as well as the evaluation of the flowrate inside the air layer, both being required to model the system.

CONCLUSION - DISCUSSION:

The experimental study of the composite TROMBE wall during a whole year enabled us to obtain better understanding regarding the working of this composite wall. The winter period contributed to show the importance of the "outside part". Some changes were made, such as replacing the glazing by an alveolar polycarbonate, which limits the night losses.

During less sunny days, when the wall is discharged, an inverse air thermal-circulation was observed. To prevent this phenomenon, two systems were tested at the lower vent level:

- a flexible plastic film as well as a motorized shutter controlled by a heat fluxmeter. Each system has its advantages and its drawbacks. The plastic film is not costly, easy to set up but it creates an additional head loss. The automatic shutter creates less perturbation on the air flow, but is more expensive and more complex to set up and control. It could be used for summer cooling.

The heat fluxmeters, key tools of our instrumentation, allowed us to estimate the thermal characteristics of the storage wall, to quantify the convective and radiative exchanges inside the air layer and to evaluate the energy transferred to the test room. Also, all this acquired data guided us in the choice of correlations and thermal characteristics necessary for computer modelling. A thermal simulation programme allowing us to know the thermal and energy performances of various solar wall designs, is undergoing development and validation. It will give the designers precise information about the thermal performances of the wall over the year for different sites.

Definition of terms:

C_p : Mass heat at constant pressure (J/kg °K).

E_n : Energy supplied by the air layer (KJ).

$F_{glob,vert}$: Solar irradiation on a vertical plane surface (W/m²).

F_{cvT} : Convective heat flux measured by the heat fluxmeter placed at the top of the air layer (W/m²).

F_{cvM} : Convective heat flux measured in the middle of the air layer (W/m²).

F_{cvB} : Convective flux measured at the bottom of the air layer (W/m²).

$F_{cv} = (F_{cvH} + F_{cvM} + F_{cvB}) / 3$ (W/m²).

F_{globT} : Global flux (convective + radiative) measured by the heat fluxmeter placed at the top of the air layer (W/m²).

F_{globM} : Global flux (convective + radiative) measured by the heat fluxmeter placed in the middle of the air layer (W/m²).

F_{globB} : Global flux (convective + radiative) measured by the heat fluxmeter placed at the bottom of the air layer (W/m²). $Flux_{tot} = (F_{globT} + F_{globM} + F_{globB}) / 3$ (W/m²).

F_{ext} : Heat flux measured on the outside face of the wall (W/m²).

g : Acceleration (m/s²).

H : Height between vents (m).

$Sech$: Exchange surface (m²).

S_{LA} : Air layer surface (m²).

S_{Vent} : Vents surface (m²).

T_{amb} : Outdoor temperature.

T_{room} : Temperature of the room.

T_{cvT} : Surface temperature of the wall measured at the top of the air layer (°C).

T_{cvM} : Surface temperature of the wall measured in the middle of the air layer (°C).

T_{cvB} : Surface temperature of the wall measured at the bottom of the air layer (°C).

T_{ST} : Surface temperature of the wall measured at the top of the air layer (°C).

T_{SM} : Surface temperature of the wall measured in the middle of the air layer (°C).

T_{SB} : Surface temperature of the wall measured at the bottom of the air layer (°C).

$T_p = (T_{SH} + T_{SM} + T_{SB}) / 3$ (°C).

T_{aT} : Air temperature measured near F_{cvT} (°C).

T_{aM} : Air temperature measured near F_{cvM} (°C).

T_{aB} : Air temperature measured near F_{cvB} (°C).

T_{Sext} : Surface temperature of the wall on the outside face (°C).

$T_{ins LA}$: Surface temperature of the insulating panel (°C).

$T_{ins room}$: Surface temperature of the insulator room side (°C).

T_{fluid} : Average temperature of the fluid (°C).

T_{Lv} : Air temperature at the lower vent (°C).

T_{uv} : Air temperature at the upper vent (°C).

$\Delta T = (T_{uv} - T_{Lv})$ (°C).

Pr : Number of Prandtl.

V_{LA} : Air speed in the ventilated layer (m/s).

V_{avc} : Average value of the air at the lower vent level (m/s).

Q : Air flow rate (m³/h).

ν : Kinematic viscosity (m²/s).

ρ : Mass volume of the fluid (kg/m³).

λ : Thermal conductivity (W/m °C).

β : Dilatation coefficient at constant pressure (K⁻¹).

REFERENCES:

Trombe, F., 1974. "Maisons solaires", 3 C777, Techniques de l'Ingénieur, France

Bilgen, E., 1986, "Composite wall storage-collector systems for passive utilization of solar energy in cold climates" Ecole Polytechnique, University of Montreal, P.O. Box 6079 St. A Montreal, P.Q. C

Zrikem Z., and Bilgen E., 1987. "Theoretical study of a composite TROMBE-MICHEL wall solar collector system", Solar Energy Vol. 39, No. 5, pp 409-419

Thery P., Koubeadjio R.A. and Leclercq D., 1980, "Mesure simultanée de flux et température", Journées industrielles de la Sté Physique, TOULOUSE

Leclercq D. and Thery P., 1983, "Apparatus for simultaneous temperature and heat flow measurements under transient conditions" Rev. Sc. Instr., n°54, 374

Churchill and Chu H., 1975, "Correlating equations for laminar and turbulent free convection from a vertical plate." Int. J. of Heat Mass Transfert Vol. 18, pp. 1323-1329.

Jaluria Y., 1980, "Natural Convection, Heat and Mass Transfer" HMT, Pergamon Press, p262

Fischenden M. and Saunders O.A., 1950, "Heat Transfer", Oxford University Press, N. Y

PASSYS Phase-I, final report, Model Validation and Development Subgroup, JOULE programme, Commission of the European Communities, DG XII, 1990.

Alamdari F. and Hammond G., 1983, "Improved data correlations for buoyancy-driven convection in rooms" Bldg Serv. Res. Technol. 4, 106-12.

Lassue S., 1989 "Analyse des échanges radiatifs et convectifs à la surface d'une paroi opaque. Application à la commande optimale du système habitat" Thèse de doctorat, Lille, France

Zalewski L., 1992, "Application des mesures fluxométriques à la mesure locale de coefficient d'échange par convection. Cas de la plaque plane verticale." DEA, Lille, France

Lefebvre J., 1986, "Mesure des débits et des vitesses des fluides". Ed. Masson.

Idel'cik, "Coefficients de pertes de charge singulières et de perte de charge par frottement". Ed. EYROLLES



EXPERIMENTAL INVESTIGATIONS IN ROUND BUBBLE PLUMES

by Jader R. Barbosa Jr. and *L. J. S. Bradbury
 Mechanical Engineering Program (COPPE/UF RJ),
 C.P. 68503, 21945970 Rio de Janeiro, Brazil.
 *Department of Engineering,
 University of Plymouth, England, UK



SUMMARY

In the past, many analytical predictions and numerical simulations of the bubble plume problem have been developed so as to accurately predict the main properties of the flow. The present work shows how an electroresistivity probe system can be devised to measure mean and instantaneous properties of the flow with the purpose of confirming the hypotheses made by the existing theories. The experimental technique requires a carefully developed statistical data processing in order to achieve reliable results. Graphs of gas fraction, bubble rise velocity and bubble size are presented for different experimental conditions.

INTRODUCTION

The complexity of multiphase flows together with its application in many fields of fluids engineering has given rise to considerable efforts directed to a good understanding of the phenomenon. This search for a better understanding has resulted in a substantial improvement in the early advanced physical and mathematical treatments of the problem. Also the development of specific instrumentation and experimental techniques for validation of the main hypotheses has dramatically increased in importance and in number.

Applications of gas-liquid bubble plumes are widely encountered in nature and technology. Oil well sub-sea blowouts (Milgram, 1983), (Beall and Horler, 1991), pneumatic breakwaters, ice formation prevention in lakes, aeration in water purification and steel gas-stirred melt vessels (Castillejos and Brimacombe, 1987) are only a few of a host of possible examples.

The purpose of this work is to carry out an experimental program in order to confirm the hypotheses about the nature of the physics of the problem that are made in the existing bubble plume theories. The paper shows how a double channel electroresistivity probe system can be devised to accurately measure mean and instantaneous properties of the flow. The results are compared with those given by the theories.

The flow field is schematically illustrated in figure 1.

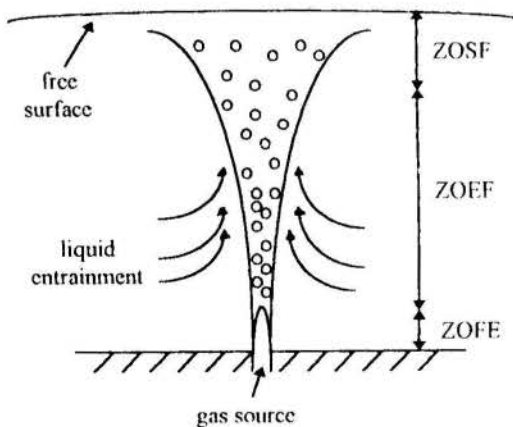


Figure 1 - The flow field.

When gas is discharged from a nozzle, the continuous gas stream is broken into discrete bubbles due to the Kelvin-Helmholtz instability process. The rising plume entrains water, generating an upward motion that results in a large recirculation zone in the single phase region. The flow is axisymmetric and can be hypothetically divided into three distinct regions: the Zone of Flow Establishment (ZOFE), the Zone of Established Flow (ZOEF) and the Zone of Surface Flow (ZOSF). The length of each zone is determined by a balance between the existing forces in the flow, i.e., inertia and surface tension balance the buoyancy force in the ZOFE and ZOSF, respectively. Buoyancy is the driving force in the ZOEF, which is, generally, the most extensive region of the plume.

The development of the bubble plume theory is based on the analysis of thermal buoyant plumes. This analogy was firstly suggested by Sir Geoffrey Taylor, who subsequently turned it into a solid theory. In 1968, Kobus presented a simplified theory together with some measurements of properties of the liquid phase. This work was followed by a more comprehensive theory by Ditmars and Cedervall (1974). These authors, considered an integral model analogous to that proposed by Morton, Taylor and Turner (1956) for thermal plumes. Both last models adopted the Taylor entrainment hypothesis with a constant entrainment coefficient. Hussain and Siegel (1976) proposed an integral model that considered a *top-hat* velocity distribution, instead of a gaussian one. Milgram (1983) further improved the previous theories, using a considerable amount of experimental data to advance functional relationships for the entrainment and momentum amplification coefficients. These relationships, allied to an integral model, form the theory to which the experimental data set obtained in the present work is going to be compared. In fact, the integral theories have been extended to a number of situations so that various effects such as the formation of hydrates, the formation of surface currents and of recirculating cells, the variation of the entrainment coefficient and of the momentum amplification factor, the deflection of the plume by the action of a cross current, can be accounted for. For more details on these aspects of the integral methods, the reader is referred to Barbosa Jr., Bradbury and Silva Freire (1996), to Santos and Silva Freire (1994) and to Santos and Silva Freire (1993). Here, the results will basically be compared with the theory of Milgram (1983).

Electroresistivity sensors has been extensively used for the characterisation of gas-liquid flow properties (Serizawa et al.,

1975), (Lewis and Davidson, 1983). A double channel electroresistivity probe is capable of measuring all the properties of the gas phase (Tacke et al., 1985), (Castillejos and Brimacombe, 1987) and, when combined with other techniques, i.e. laser Doppler anemometry (Sheng and Irons, 1992), (Zhou and Brimacombe, 1994), the flow field, including the single phase region, can be entirely mapped.

EXPERIMENTAL WORK

Experimental Method. The flow properties are measured using the Electroresistivity Sensor Method developed by Bradbury in collaboration with Barbosa Jr. (see Silva Freire, 1995). The working principle of this technique is the difference in electrical conductivity between the phases. The development of a reliable detection system provides a good recognition of a local moving interface in the flow. The electric signal associated to the moving interface carries the information on the flow properties.

As indicated by Herringe et al. (1974), this technique is the most suitable when the liquid phase is the electrically conductive. The main adversities of the method are its destructive and intrusive characteristics; the presence of a sensor affects the plume structure. Another limitation of the method is its feature of measuring only properties of the dispersed phase.

Data Processing and Analysis. Data interpretation is the most difficult task in the signal analysis procedure. It is nearly impossible to discern a small bubble, whose centre is travelled across by the sensor tip, from a large bubble whose external surface is only slid over. In addition, one should take into account the destructiveness of the measuring process.

Bubble deformation, deflection and deceleration due to surface tension in the vicinity of the sensor tip are also factors that prevents the exact knowledge of the time interval that a bubble takes to cross the sensor.

Such phenomena are minimised when small, and less intrusive, sensors are used. Still, a statistical treatment is necessary, since a complete comprehension and control of the sensor/flow interactions are beyond present day knowledge. In this paper, during the data acquisition process, filtering techniques were used to avoid bad or spurious signals.

Experimental Apparatus. The apparatus is schematically shown in figure 2. It comprises a water tank, an air injection system, a 2D traversing mechanism and a data acquisition and analysis system.

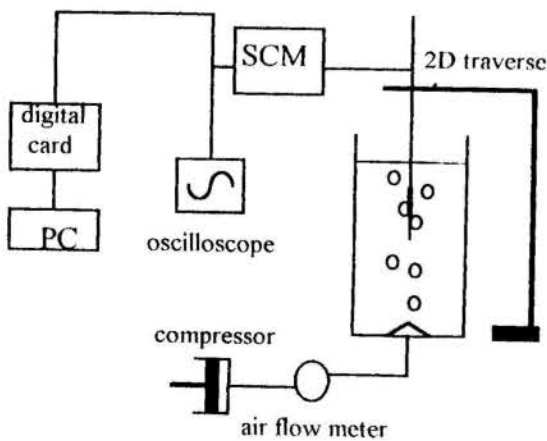


Figure 2 - The experimental apparatus.

The glass water tank has dimensions 300x300x400 mm. The water is filtered and slightly salted. The air injection system is composed of a mass flow meter and different injection nozzles. The air is also filtered and is injected through a nozzle located on the centre of the bottom of the tank.

The data acquisition and analysis system consists of a microcomputer with an interface data acquisition board, an oscilloscope, a signal conditioner module and an electroresistivity probe. The electroresistivity probe is shown on figure 3.

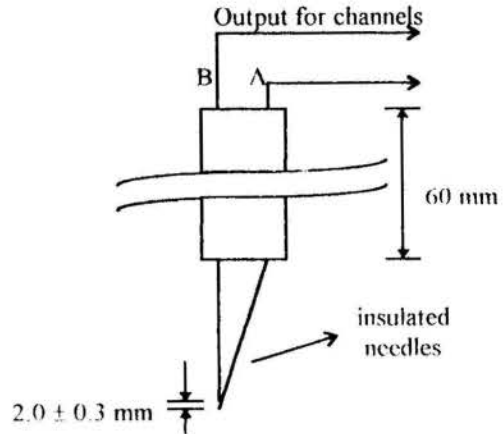


Figure 3 - The electroresistivity probe.

Two 0.2 mm diameter stainless steel needles were electrically insulated, with exception of their tips, and soldered to instrument wires. The needles were vertically placed in a parallel array. The upstream spacing between the electrodes was 2.0 ± 0.3 mm.

The signal conditioner module electronic diagram is illustrated in figure 4. Its most important component is a water level detector integrated circuit, whose main characteristic is the fast response in time in indicating phase changes. This was a crucial aspect when developing the electronic device to work in a turbulent bubble plume.

The data acquisition system is conceived in such way that the circuit output is digital. Avoiding analog/digital conversions, trigger settings etc., a faster data processing is achieved.

Since the circuit output is digital, the bubble data acquisition logic is based on binary arithmetics. The values 1 and 0 are attributed to air and water, respectively. Thus, for a certain instant at a certain point in the plume, the possibilities of phase combinations that can reach the probe tips (A and B) can be stated as the pairs: [air, air]; [air, water]; [water, air]; [water, water] — or [1, 1]; [1, 0]; [0, 1]; [0, 0].

In the end of an observation period, there will be two binary arrays, one for each needle, containing information about the phases that stroke the sensor in the previous instant.

Measuring Procedure. The probe is placed perpendicularly to the tank bottom. The water depth is kept constant and equal to 0.32 m. Measurements of bubble plume properties are made for several nozzle types and gas flow rate conditions with the aid of a traversing mechanism. Two types of nozzle are used, a single orifice (4 mm dia.) and a "shower type" nozzle (13 orifices, 1 mm dia. each). The glass flow rates are 3 litres/min ($0.00005 \text{ m}^3/\text{s}$) and 1.8 litres/min ($0.00003 \text{ m}^3/\text{s}$).

The reading frequency of both probe channels is set to 4 kHz, that is, the data acquisition system receives a new information about the phase that meets the sensor tips at each 0.25 ms. Each sample containing 10,000 sensor readings is called a sample

block. About 50 sample blocks per reading point of the plume are necessary to achieve a reliable statistic sample.

property, only one channel is necessary to measure the local gas fraction. Usually, the upstream channel (A) is chosen.

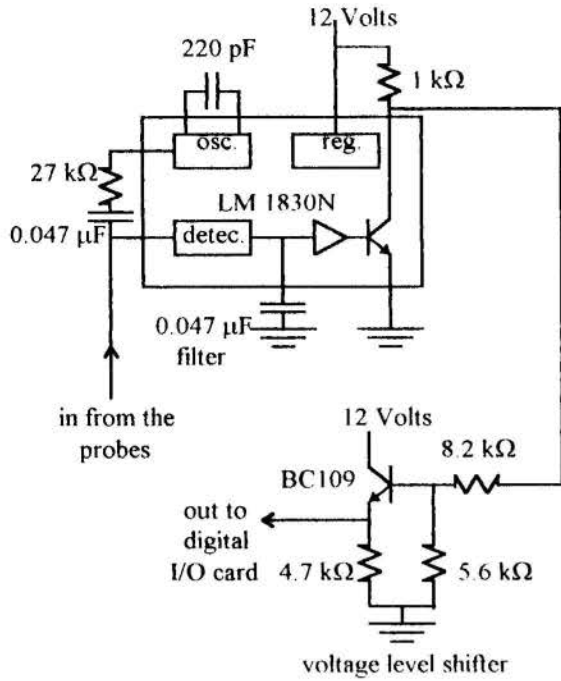


Figure 4 - The signal conditioner module.

Measurement of Bubble Plume Properties. The output signal of the probe channels at a given point of the plume is illustrated in figure 5. The time delay between the arrival of a bubble at each needle can be observed.

b) Measurement of Bubble Rise Velocity and Size. Bubble velocity and size were measured using two different approaches: cross-correlation and two-state signal methods.

Cross-correlation of the electrodes output signal generates a function that exhibits a maximum at a time delay corresponding to the most probable transport time of the bubbles between the electrodes. This method has severe limitations since it ignores the particular events occurring at the probe tips. The technique allows the measurement of only the most probable bubble velocity, providing no direct information on the probability distribution of the velocities. Thus, when deriving information about bubble size, it must be assumed that all bubbles travel at the most probable velocity. The two-state signal method involves the measurement of time delays between consecutive pairs of similar signals and thus yields a time delay spectrum. The problems arising during the measuring of bubble velocity by the latter method are those due to probe wettability and bubble trajectory (Castillejos and Brimacombe, 1987).

In this work, the criterion for bubble selection proposed by Lewis and Davidson (1983) was associated to the two-state signal method in order to accurately measure bubble velocity and size, thus avoiding the occurrence of the problems mentioned above. The criterion is based on two statements: (1) if a bubble hits the sensor obliquely, t_2 and $(t_3 - t_1)$, see figure 5, will be different and the bubble is rejected; (2) if the bubble velocity varies as it crosses the sensor, t_1 and $(t_3 - t_2)$ will be different and the bubble is rejected. Tolerance of $\pm 15\%$ is applied to both statements.

Thus, according to the two-state signal method, the rise velocity of an accepted bubble will be the arithmetic mean between:

$$\frac{es}{t_1} \text{ and } \frac{es}{t_3 - t_2} \quad (1)$$

where es is the electrode spacing.

The mean diameter of an accepted bubble will be the arithmetic mean between:

$$es \frac{t_2}{t_1}, es \frac{t_2}{t_3 - t_2}, es \frac{t_3 - t_1}{t_1} \text{ and } es \frac{t_3 - t_1}{t_3 - t_2} \quad (2)$$

Figures 6 and 7 show the bubble rise velocity and bubble mean diameter spectra, obtained with the two-state signal method, and the associated normal distributions at a given point of the plume.

RESULTS

Gas Fraction Measurement. Figure 8 shows gas fraction radial distributions at different heights. Most integral theories assume that the density defect radial profiles have a gaussian shape. The theoretical distribution is:

$$C(r, x) = C_o(x) e^{(-\beta r^2 / \delta^2(x))} \quad (3)$$

where C_o is the centreline gas fraction, β is an arbitrary constant and δ is the plume width; the radius at which the gas fraction falls to the half of the centreline value.

Also according to the thermal plumes analogy, the gas fraction profiles should exhibit similarity. This assumption is verified in figure 9, where the parameters are referred to C_o and

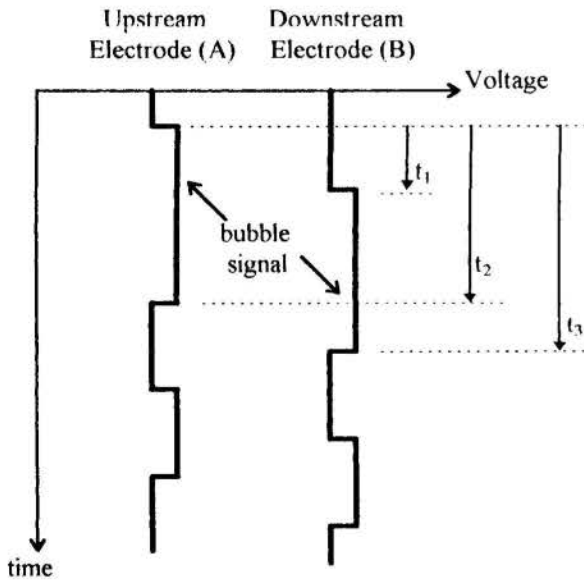


Figure 5 - The bubble output signal.

a) Measurement of Gas Fraction. The measurement of local gas fraction is easier than other properties measurement because its output signal requires no processing. Following Toral (1981), for a sufficient long sampling period, the gas fraction at a given point of the plume tends to be the fraction of the sampling period in which the gas phase meet the sensor. Being a time-averaged

δ , respectively.

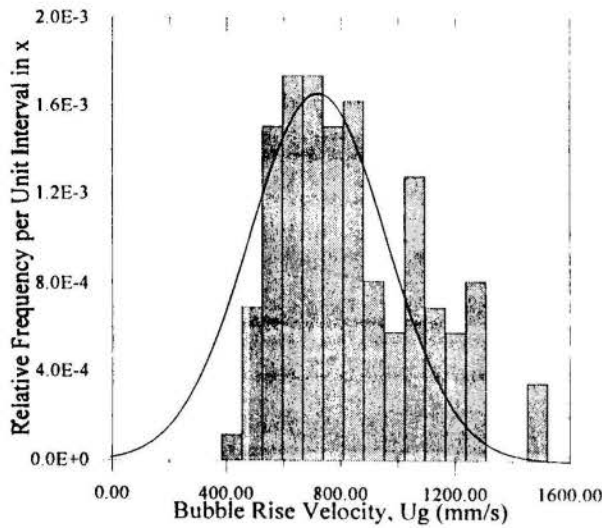


Figure 6 - Bubble velocity spectrum.

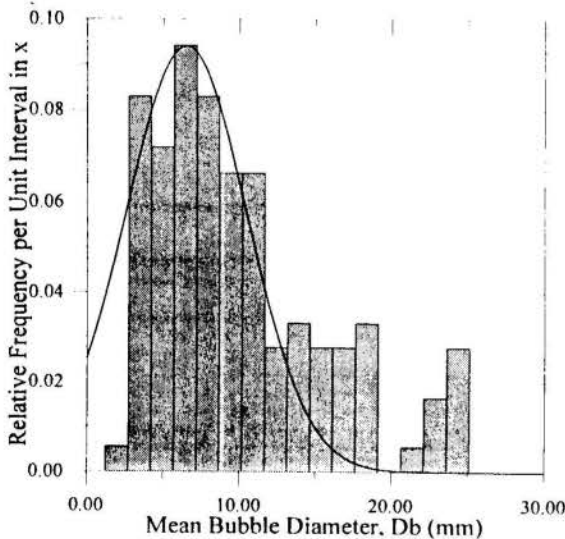


Figure 7 - Bubble mean diameter spectrum.

Centreline gas fraction distributions for different injection conditions are plotted and compared with the theory in figure 10. It is shown that, except for the region close to the nozzle — the region where the plume preserves its jet characteristics —, the values of the axial gas fraction for different injection conditions are nearly the same. Thus, the assumption made by all integral theories that the flow in the ZOEf region is independent of its initial conditions in the ZOF is valid.

A typical bubble plume radius distribution is shown in figure 11.

Bubble Rise Velocity. Likewise the gas fraction, and yet in accordance with the thermal buoyant plumes analogy, the liquid phase velocity radial profiles can be expressed in a gaussian form:

$$U_1(r, x) = U_{1o}(x) e^{(-\beta \lambda r^2 / \delta^2(x))}, \quad (4)$$

where λ is the ratio of the two-phase region radius to the induced single phase jet radius. Generally, the integral models assume that λ is constant, being 0.8 a typical value. Unfortunately, the value of λ cannot be checked by the present work. This would require measuring the liquid phase properties, which is impracticable through the use of electroresistivity probes.

The theories also suppose that the gas phase velocity equals the liquid phase velocity plus an approximately constant slip velocity:

$$U_g(r, x) = U_l(r, x) + u_b. \quad (5)$$

In bubbly flows, the slip velocity, u_b , is supposed to be the terminal velocity of a single bubble in a stagnant liquid.

In Figure 12, it is shown that the bubble rise velocity radial distribution has a gaussian form, thus presenting similarity. Figure 13 shows the centreline bubble velocity for two different injection nozzle conditions and the same air flow rate. The agreement with the theory is good.

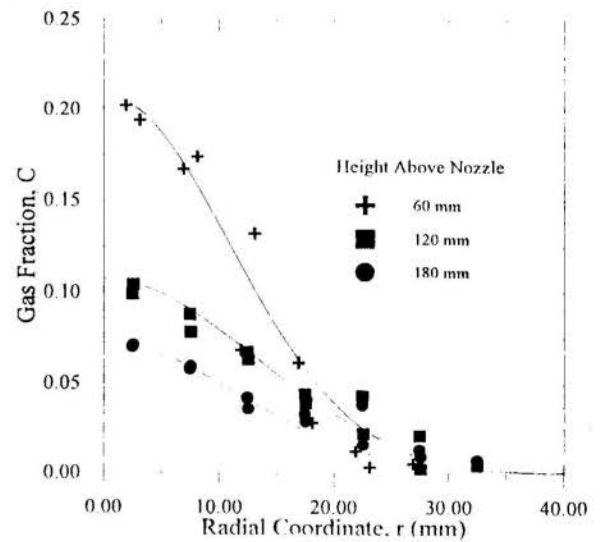


Figure 8 - Radial gas fraction profiles.

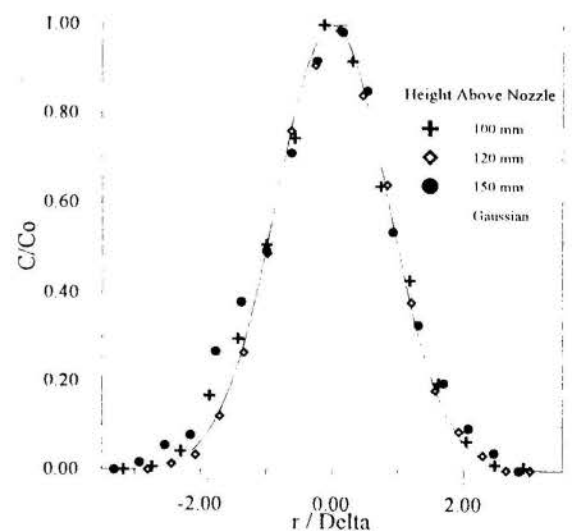


Figure 9 - Similarity profiles of gas fraction.

To estimate the bubble slip velocity, some experiments were carried out. The air flow rate was decreased to a minimum value

so that only a single bubble was released at a time. Thus, violently reducing the flow entrainment and avoiding interactions between the bubbles, it was possible to simulate a single bubble in a stagnant liquid.

As can be observed in figure 14, the bubble slip velocity is approximately constant. A typical value, used by Milgram (1983) and Ditmars and Cederwall (1974), is 0.35 m/s. In this paper, the arithmetic mean of the measured slip velocities is 0.365 m/s. The calculated error is 4%; that is here considered to be satisfactory.

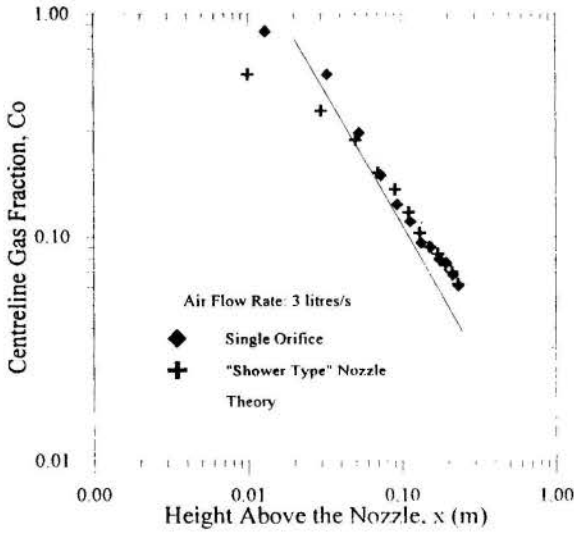


Figure 10 - Centreline gas fraction.

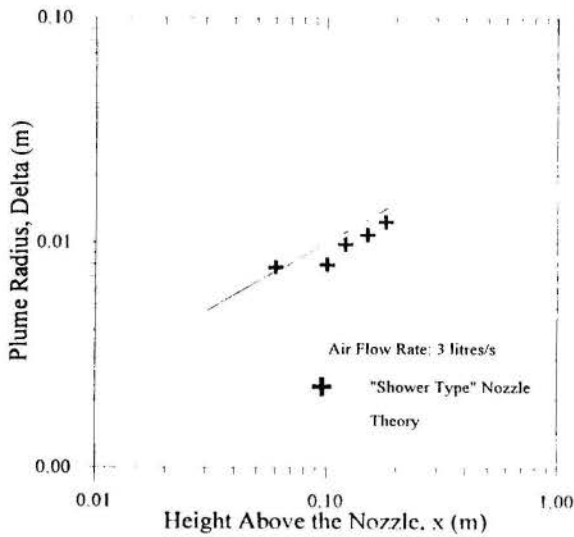


Figure 11 - Plume radius.

Bubble Size Measurement. Likewise the bubble velocity, the bubble size measurement needs a statistical background. As stated by Castillejos and Brimacombe (1987), the probe has equal probability of piercing the bubbles at any point on their projected frontal area and the measured chord length may vary from zero to the largest vertical dimension of the bubble. Besides that, one can also assume that the discrete bubbles are spheres of various sizes randomly distributed over the plume. Obviously, this hypothesis becomes invalid at the vicinity of the nozzle.

Several methods were developed in order to calculate the mean diameter of a pierced bubble. In this work, it is simply assumed that the mean bubble diameter at a given point of the

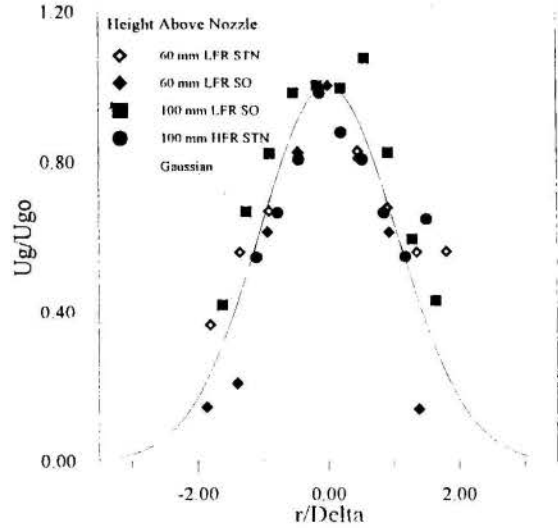


Figure 12 - Similarity bubble velocity profile. LFR, lower flow rate; HFR, higher flow rate; SO, single orifice; STN, "shower type" nozzle.

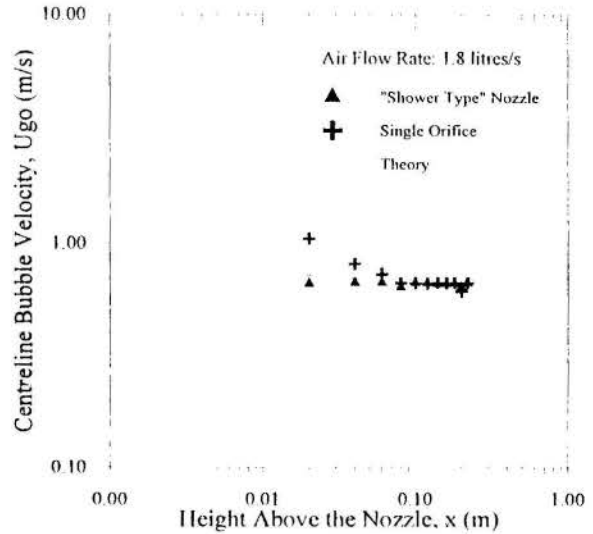


Figure 13 - Centreline bubble velocity.

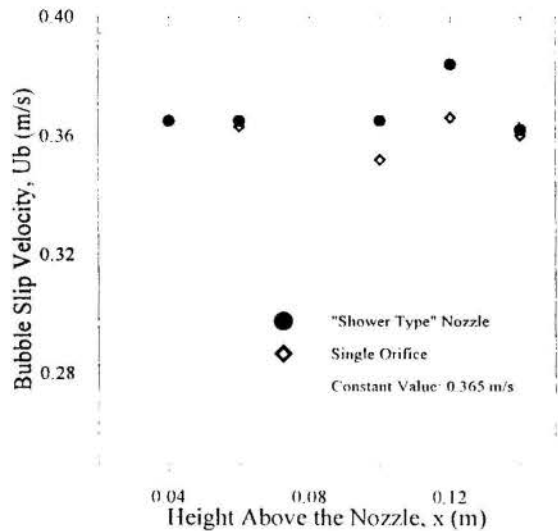


Figure 14 - Bubble slip velocity.

plume is the most probable value of the probability density function associated with the bubble pierced length histogram at that point.

In figure 15, the variation of the calculated mean bubble diameter, D_b , along the centreline is plotted for different air flow rates and injection nozzles. Though the scatter, it is observed that from a determined region on, the bubble size becomes independent of the flow conditions; the bubbles reach a nearly constant size just spreading radially along the plume axis.

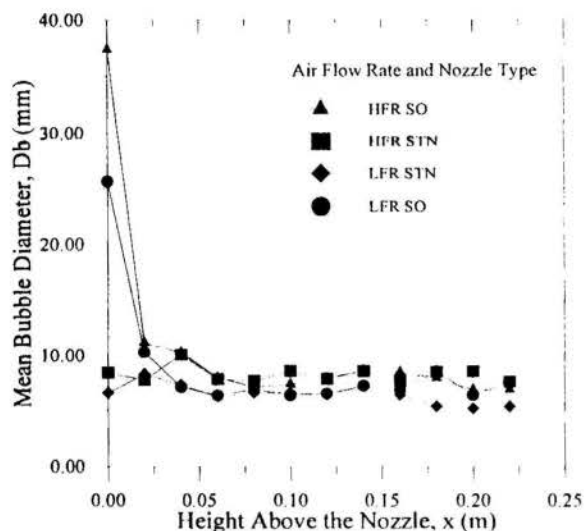


Figure 15 - Centreline bubble mean diameter distribution.

CONCLUDING REMARKS

An experimental program was developed in order to measure the gas phase properties of a round bubble plume. The electroresistivity sensor technique was the employed experimental method. Due to the random nature of the measuring process, a statistical data processing, as well as filtering techniques and bubble selection criteria (Lewis and Davidson, 1983), were developed with the purpose of eliminating reading errors and achieving reliable values.

Hypotheses and results obtained by the integral bubble plume theories were compared to the present work experimental results for several experimental conditions.

Gas fraction, bubble rise velocity and average bubble size graphs were shown. As a result, the physical hypotheses seemed plausible, specially in the region far from the injection nozzle and the free surface.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors thank Professor Atila P. Silva Freire for some useful discussions in the course of the work. The work has been financially supported by PETROBRAS through grant COPPETEC ET-120111. One of the authors, LJSB benefited from a visiting scholar fellowship from the British Council through a LINK project. Further financial support was given by the CNPq and the Rectorship of the Federal University of Rio de Janeiro. The first author JRBJ thanks CAPES for the award of a scholarship.

REFERENCES

- Barbosa Jr., J. R., Bradbury, L. J. S. and Silva Freire, A. P. S., 1996, "On the Numerical Calculation of Bubble Plumes, Including an Experimental Investigation of Its Mean Properties", 1996 SPE/IADC Drilling Conference, Rio de Janeiro (to be presented).
- Beall, J. E. and Horler Sr., C. L., 1991, "Case History: A Shallow Gas Blowout Offshore Korea - Another Data Point in Industry's Learning Curve", 1991 SPE/IADC Drilling Conference, Amsterdam.
- Castillejos, A. H. and Brimacombe, J. K., 1987, "Measurement of Physical Characteristics of Bubbles in Gas-Liquid Plumes", *Metall. Trans. B*, Vol. 18B, pp. 649-671.
- Ditmars, J. D. and Cederwall, K., 1974, "Analysis of Air-Bubble Plumes", *Proc. Coastal Engng Conf.*, Chap. 128, pp. 2209-2226.
- Herringe, R. A. and Davis, M. R., 1974, *J. Phys. E*, Vol 7, pp. 807-812.
- Hussain, N. A. and Siegel, R., 1976, "Liquid Jet Pumped by Rising Gas Bubbles", *J. of Fluids Eng.*, March 1976, pp. 49-57.
- Kobus, H. E., 1968, "Analysis of the Flow Induced by Air-Bubble Systems", *Proc. Coastal Engng Conf. London*, Vol 2, Chap. 65, pp. 1016-1031.
- Lewis, D. A. and Davidson, J. F., 1983, "Bubble Sizes Produced by Shear and Turbulence in a Bubble Column", *Chem. Engng. Sci.*, Vol. 38, pp 161, 167.
- Milgram, J. H., 1983, "Mean Flow in Round Bubble Plumes", *J. Fluid Mech.*, Vol 133, pp. 345-376.
- Morton, B. R., Taylor, G. I., and Turner, J. S., 1956, "Turbulent Gravitational Convection from Maintained and Instantaneous Sources", *Proc R. Soc. Lond. A* 234, pp. 1-23.
- Serizawa, A., Kataoka, I. and Michiyoshi, I., 1975, *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 2, pp. 221-33.
- Sheng, Y. Y. and Irons, G. A., 1992, "Measurements of the Internal Structure of Gas-Liquid Plumes", *Metall. Trans. B*, 1992, Vol 23B, pp. 779-788.
- Silva Freire, A. P., 1995, CENPES Internal Report No ET-120111/6, PETROBRAS, Rio de Janeiro, Brazil.
- Santos, L. C. C. and Silva Freire, 1993, "On Round Bubble Plumes Subject to Cross Flow", *Proc. 12th COBEM*, 1009-1013, Brasilia, Brazil.
- Santos, L. C. C. and Silva Freire, 1994, "The Effects of Hydrate Formation on the Mean Properties of Bubble Plumes, including the Prediction of Surface Waves", *Proc. 5th ENCIT*, Sao Paulo, Brazil.
- Toral, H., 1981, "A Study of the Hot-Wire Anemometer for Measuring Void Fraction in Two-Phase Flow", *J. Phys. E Sci. Instrum.*, Vol. 14, pp. 822-827.
- Zhou, M. and Brimacombe, J. K., 1994, "Critical Fluid-Flow Phenomenon in a Gas-Stirred Ladle", *Metall. Trans. B*, Vol. 25B, pp. 681-692.



LOCAL MEASUREMENT OF THE VOID FRACTION DISTRIBUTION IN TWO-PHASE FLOW USING A RESISTIVITY PROBE TECHNIQUE



Luiz F. M. Moura
 DETF-FEM-UNICAMP
 13083 - Campinas - SP - Brasil

Christophe Marvillet
 GFD-STI-CEA Grenoble
 38054 - Grenoble - France

SUMMARY

This paper presents the local void fraction measurements in a bubble column using the electrical resistivity probe technique. The bubble column consists of a 80 mm ID Plexiglas pipe where the air is introduced at the bottom of the column through a perforated plate. The local void fraction distribution is measured by the displacement of the resistivity probe in the radial direction. Herein the signal conditioning is discussed and the influence of the threshold level is analyzed. From the conditioned signal it is possible to obtain the void fraction, the bubble frequency and the bubble residence time distribution. The comparison between the area averaged void fraction calculated from the local measurements and the volumetric void fraction validates the resistivity probe technique both for bubbly and churn flow.

INTRODUCTION

Two-phase flows consisting of simultaneous flow of liquid-vapor or liquid-gas are encountered quite frequently in power generation systems, heat exchangers, chemical reactors, oil industry, and other industrial processes. In these two-phase flows, several flow regimes are encountered where the gas phase may occur in various patterns from small bubbles to large slugs or as a continuous phase with or without liquid films or droplets. The bubble size and their distributions in these regimes vary with the liquid and gas superficial velocities, flow geometry and local conditions. A detailed knowledge of the flow regimes and local flow characteristics is very important in developing predictive tools. In addition, theoretical modeling of two-phase flow studies is often based on very specific local hydraulic conditions. An experimental verification of such analytical descriptions thus requires a very fine and detailed determination of the relevant local parameters.

In the study of two-phase flow there has been a strong need for instruments able to measure the detailed distribution of various local parameters such as the distribution of the two phases, the bubble size distribution and the bubble frequency.

One of the requirements of a suitable measuring method would be the absence of obstructions in the flow channel. At least three methods meet this requirement: laser-Doppler anemometry, ultrasonic pulse transmission and particle image velocimetry. However, these methods are only applicable where the dispersed phase is sufficiently dilute, i.e., for low void fractions.

In view of the intention to measure local variables in gas-liquid flows with void fraction possibly ranging from zero to unity it is inevitable to use a probe technique. In a recent review work, Cartellier and Achard (1991) have shown that the most powerful probe techniques are electrical resistivity probe, optical probe and hot film anemometry. Among these techniques, the advantage of electrical resistivity probe is that both the sensor and the detecting electronic circuit are easy to be realized. In this work, such a probe was used for the measurement of the void fraction distribution of an air-water flow in a bubble column.

Since the fundamental works of Serizawa et al (1975) and Herringe and Davis (1976), continuous progress has been made with respect to the application of electrical resistivity probe technique to studying local two-phase flow parameters (Van der Welle, 1985; Kataoka et al, 1986; Teyssedou and Tapacu, 1988;

Barnea and Shemer, 1989; Kocamustafaogullari and Wang, 1991; Liu and Bankoff, 1993; Leung et al, 1995).

THE ELECTRICAL RESISTIVITY PROBE TECHNIQUE

Measuring Principle. In principle the electrical resistivity probe method consists of a instantaneous measurement of the local electrical resistivity in the two-phase flow by means of a sensor electrode. A typical resistivity probe is depicted in fig. 1.

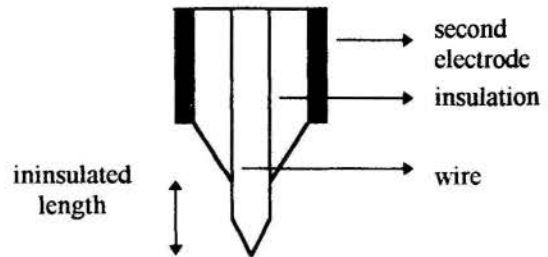


Figure 1 - Typical resistivity probe.

Basically the sensor works as an identifier of a phase surrounding the probe tip. Since the circuit is opened or closed depending on whether the sensor is in contact with gas or liquid, the probe behaves in principle like a switch, yielding a two-stage signal. Such a signal shows a nearly immediate response to water contact with the probe, but a delayed response to bubble contact, due to the required dewetting time of the probe tip. Indeed, the sensor does not penetrate the interface without deforming it. Moreover, the instantaneous resistivity depends on the fraction of the sensitive tip area wetted by one phase, and therefore, long sensitive length induces smooth signal transitions. Minimization of this delay, i.e., approximation of a square wave shape, is desirable for signal conditioning, and may be obtained by proper design of the probe tip. However, to obtain a true square wave type signals, a proper threshold voltage has to be used as a triggering criterion. The value of threshold voltage can be obtained by processing the data for void fraction and by comparing it with other reference measuring method.

Signal conditioning. The most common method of signal conditioning is based on a single threshold level whose intersections with the raw signal determine the starts and the ends of rectangular waves, producing thus a succession of gas residence times. This approach has the inherent disadvantage that signals which do not reach the threshold level will be undetected. Hence the threshold level must be set as close to the liquid signal level as possible, in order to minimize the influence of the dewetting time and to take account of small bubbles.

No agreement exists in the literature, neither for the recommended threshold level, nor for the resulting performance. Nevertheless, the threshold level usually ranges from 10% to 50% of the static high level signal.

The problem is further enhanced in practice by shifts in the liquid signal level. This problem can be avoided by comparing the samples with a self-adjusting threshold level. First the data were divided in many data blocks (typically 32000 samples). Before a data block entered a phase discrimination routine, the maximum M and the minimum N values of signal were determined in advance. The threshold level T is given by:

$$T = (M - N) \cdot S + N \quad (1)$$

where S ranges from zero to one.

The main advantage of this phase discrimination method is that every data block has a flexible threshold level, even for the same value of S . This is of practical importance if the liquid signal level drifts.

Signal processing. As the conditioned signal for bubbly flow consists of a train of square waves, the signal has to be processed such that the gas phase residence time distribution, the number of bubbles passing through the probe location and the void fraction information can be obtained.

The local void fraction is defined as the time average of the phase indicator function X by:

$$\alpha = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T X(x, t) dt \quad (2)$$

in which X as a function of position x and time t equals one for the gas phase and zero for the liquid phase.

As the conditioned signal is given in discrete binary form, equation (2) can be written as:

$$\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X(i) \quad (3)$$

in which N is the total number of samples and $X(i)$ the binary signal.

The residence time for a bubble follows from the block length of the square wave signal, i.e., from the number of continuous samples n in the gas phase, and from the sampling frequency f :

$$T_b = \frac{n}{f} \quad (4)$$

EXPERIMENTAL RESULTS

Description of the experimental facility. A schematic diagram of the air-water bubble column is illustrated in figure 2. The test section is made of a 1600 mm long with 80 mm i.d. Plexiglas tube. The local measurement station is located at $L/D=15$.

The air to the test section is supplied from the building central air system. It is injected into the mixing chamber placed at the column bottom. The air flowrate was controlled

and measured with a mass flow controller BROOKS-5851-E. The bubble generator consists of a perforated plate with 45 holes of 2 mm diameter equally separated.

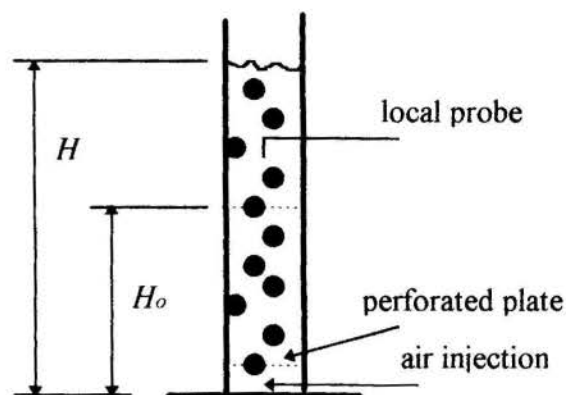


Figure 2 - Schematic of the experimental facility.

In this work the experimental results were obtained for six different values of the gas flowrate, from 0.36 to 4.52 m³/h (gas superficial velocity between 0.02 and 0.25 m/s), both expressed in standard conditions (0°C and 101 KPa).

A Vernier, with graduations to an accuracy of 1 mm, was attached axially at the outside of the test section to allow the measurement of the water height in the column. From the initial water height H_0 measured before the air injection and the air-water mixture height H , the volume average void fraction can be obtained by:

$$\alpha = \frac{H - H_0}{H} \quad (5)$$

The electrical resistivity probe. The local measurement station consists of a probe displacement mechanism, the electrical resistivity probe and the driven voltage-sensitive circuit. The probe was inserted in the test section through a probe support tube (3.0 x 2.0 mm) fixed to the displacement mechanism. A Vernier, with graduations to an accuracy of 0.05 mm, was used to traverse the probe in the radial direction. A high resolution mechanism was necessary to evaluate probe positions in flow stream accurately and to ensure reproducible results.

The design of the electrical resistivity probe is shown in figure 3. In this probe, one electrode is the exposed tip of an otherwise isolated wire and the return electrode is the supporting tube. The inner electrode is a 150 μ m diameter stainless steel wire, accurately cut under a microscope at the tip. The conical tip of the sensor was made as short as possible (35 μ m) to minimize the effect of bubble deformation. The stainless steel wire was inserted into a 0.2 mm i.d. thin plastic sleeve. This plastic tube containing the sensor was then inserted into a 0.6 mm i.d. x 0.9 mm o.d. stainless steel tube. Epoxy insulation was applied to the entire sensor and allowed to run back whilst drying, to expose only a small tip area. The exposed length was roughly two times that of the wire diameter.

The sensor was driven by a voltage-sensitive circuit consisting of a 1.5 volt battery and a 2.2 M Ω potentiometer connected in series with the probe to the ground. The potentiometer was adjusted to give an optimum output voltage for measurements. If the sensor tip is in the liquid phase, the circuit will be closed and the voltage output will be lower. When a gas bubble hits the sensor tip, the circuit continuity will be broken and the output will read a high voltage. The

voltage drop across the probe during closed circuit (liquid signal) approximated 0.5~0.6 volts. This low voltage effectively reduced electrochemical phenomena at the sensor.

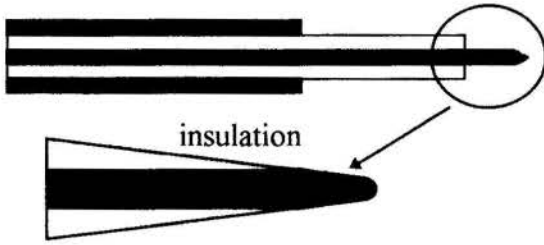


Figure 3 - Design of the electrical resistivity probe.

For each preset experimental condition the probe signals were digitized by a data acquisition system utilizing a personal computer and a Keithley-MetraByte DAS-1401 high-speed analogue-digital I/O expansion board.

A typical resistivity probe response in two-phase bubbly flow (2 kHz sample rate) is shown in figure 4. As mentioned above, it can be observed that the signal shows a nearly immediate response to water contact with the probe, but a delayed response to bubble contact, due to the required dewetting time of the probe tip.

Owing to the large volume of data generated, the sampling rate of the data acquisition was set at 4 kHz, and the total sampling time was 80 s. It was found that this combination provided a sufficiently number of bubbles for the statistical analysis of the flow. On average, 500 to 2500 bubbles were detected in each acquisition of raw data.

It is to be noted that the sampling rate may seem to be very low when compared with some investigations carried out on vertical bubbly two-phase flows. However, it is important to note that in a bubble column the velocities are very low, and thus it becomes essential to have a total sampling time as long as possible to get enough bubbles. This simultaneously leads to a low sampling rate due to the overall limitations of the data acquisition system.

In principle, the resistivity probe is able to detect only bubbles greater than 250 μm because the exposed length of the sensor tip. Then, for a typical bubble relative velocity of 20 cm/s, even with such low sampling rate, a bubble passing the

sensor tip will produce at least five samples at high level voltage.

Influence of threshold level. As mentioned above, a proper threshold level has to be applied to the raw signal in order to obtain a true square wave type signal. When the threshold level S , defined as a percentage of the voltage gap between the static levels, evolves from 0% to 100%, so does the local void fraction. Hence, for a given experiment, it is always possible to find an optimum threshold in order to retrieve the void fraction determined from another technique.

Some preliminary experiments for three different flow conditions were done to investigate the influence of the threshold level on the void fraction determination. A typical value of the void fraction sensitivity to the choice of the threshold, obtained from these preliminary experimental results, is given by:

$$\frac{\Delta\alpha}{\Delta S} \approx -0.02 \quad (6)$$

where both void fraction and threshold level are expressed in %.

For example, if the threshold level is increased from 20% to 30%, the void fraction will typically decrease by 0.2%. This value of sensitivity may be compared to the better sensitivity results for different probe techniques reported in the work of Cartellier and Achard (1991).

A comparison between the 'ideal' void fraction obtained from a detailed observation of the raw data, and the void fraction obtained for $S=0.2$, is presented in table 1.

Table 1 - Error due to the threshold level.

RUN #	Void fraction Ideal	Void fraction $S = 0.2$	Error (%)
4	6.93	7.00	+ 1.0
5	4.93	4.90	+ 0.6
6	3.40	3.30	- 2.9

Residence time distribution. The bubble residence time histogram at the pipe center ($r/R=0.0$) and near to the pipe wall ($r/R=0.875$), for the same gas superficial velocity ($J_g=0.10$ m/s) are shown in figure 5.

RESISTIVITY PROBE - RUN # 4

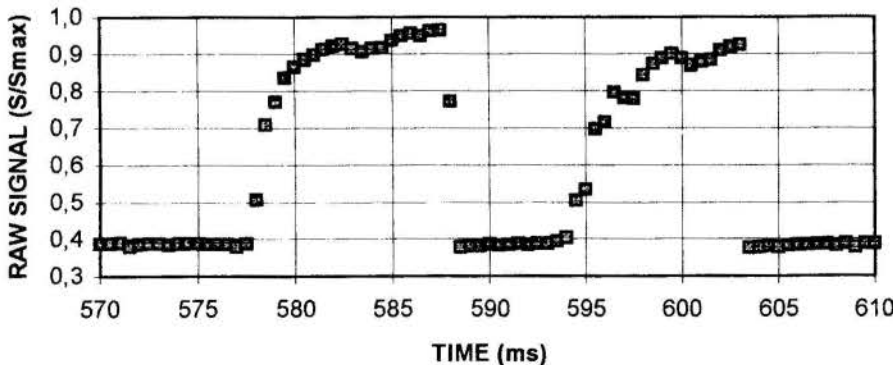


Figure 4 - A typical resistivity probe response in bubbly flow (2 kHz sample rate).

The number of bubbles passing the probe tip is greater at the pipe center than near the pipe wall. Nevertheless, the bubble residence time distribution at these two positions are quite similar, showing a large number of bubble with a residence time of less than 5 ms. For a typical bubble relative velocity of 20 cm/s, it corresponds to a bubble diameter of 1 mm.

It should be noted the relatively lower number of bubbles with a residence time less than 0.5 ms. As it was mentioned above, the resistivity probe is able to detect only bubbles greater than 250 μm due to the exposed length of the sensor tip. Then, only a few number of very small bubbles (<0.1 mm) were detected by the probe.

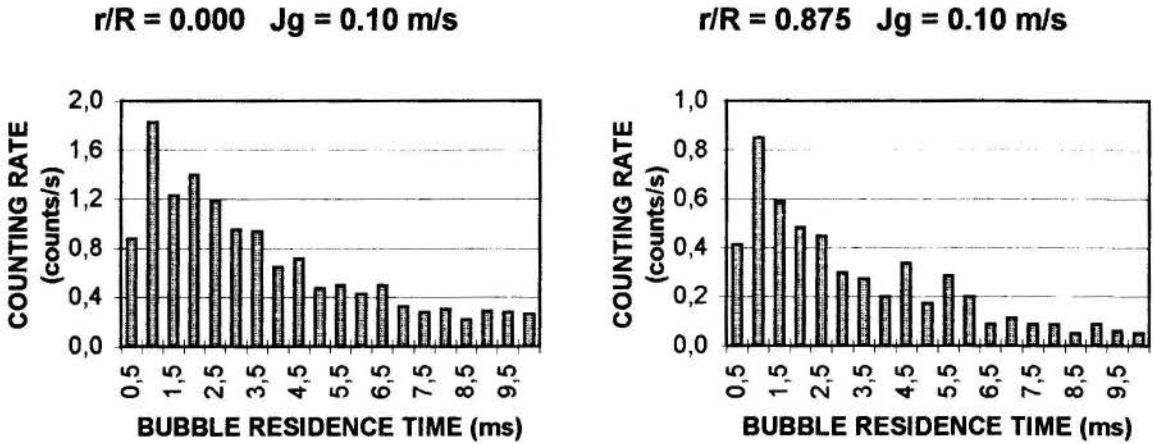


Figure 5 - The bubble residence time histogram for two radial positions.

Bubble frequency. The bubble frequency radial profiles, for different gas superficial velocities, are shown in figure 6. As it was expected, the number of bubbles passing by the same radial position increases as the gas superficial velocity increases. Moreover, the bubble frequency decreases from the center to the pipe wall.

At a sampling time of 80 s, there are some fluctuations in the bubble frequency profiles.

These fluctuations are more important for the higher gas superficial velocity, where a churn (intermittent) flow pattern was observed.

RESISTIVITY PROBE

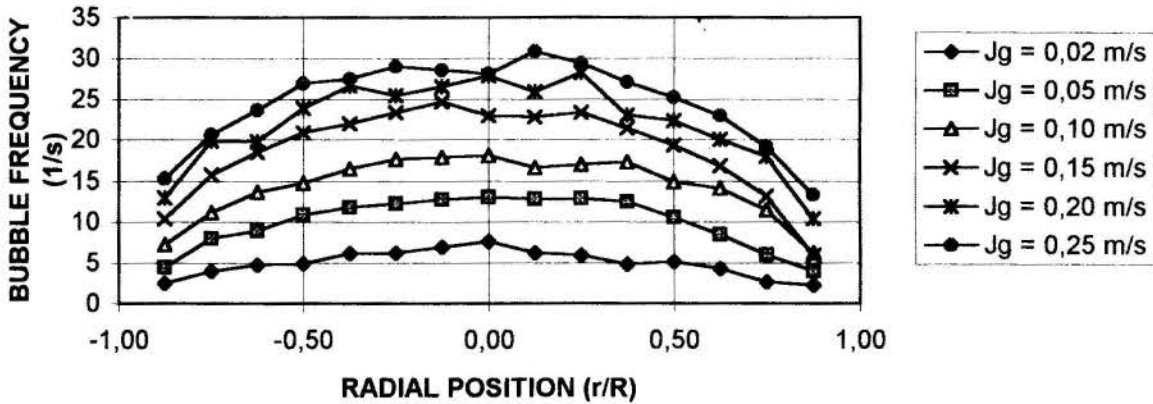


Figure 6 - The radial profile of bubble frequency.

Void fraction distribution. The void fraction radial profiles, for different gas superficial velocities, are shown in figure 7. For all experimental conditions, the void fraction profiles are close to a parabolic shape. It should be noted that the profile shape of the bubble frequency is similar to void fraction profiles. Moreover, the bubble frequency distributions are directly proportional to the void fraction.

$$\alpha = \alpha_{\max} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^n \right] \tag{7}$$

In the following an attempt is made to find a distribution function for the void fraction profiles. Since these profiles are close to a parabolic shape, the distribution function may be given by:

The best fit for the void fraction distribution function parameters are summarized in table 2. As it was expected, the values of *n* are very close to 2.

Table 2 - Void fraction distribution function parameters.

J_g (m/s)	0.02	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
α_{max}	0.08	0.16	0.24	0.30	0.34	0.38
n	2.0	2.0	2.2	2.4	2.5	2.5

Average void fraction. The void fraction is assumed to be evenly distributed in the axial direction. The pipe area is divided into concentric rings according to the radial position of the local measurements. The area average void fraction is obtained by multiplying the local void fraction by the area ratio and summing them together.

Figure 8 shows the comparison of the area average void fraction obtained by the probe method and by the column height measurements. The volume average void fraction was obtained from equation (5). Most of data were with a 20% error range compared to the column height measurement. This disagreement is probably due to the effect of bubble coalescence in the bottom of the bubble column. In fact, a higher void fraction zone is expected just upstream of the perforated plate, resulting in an overprediction of the volume average void fraction.

In analyzing the averaged data, the drift flux presentation is an appropriate method. The correlation equation is given by Zuber and Findlay (1965):

$$\frac{\langle J_g \rangle}{\langle \alpha \rangle} = C_0 \langle J \rangle + V_{gj} \quad (8)$$

where J_g , J , C_0 and V_{gj} are the superficial gas velocity, total volumetric flux, distribution parameter, and drift velocity, respectively. The angle parenthesis denotes an area average value of the parameter enclosed.

In the bubble column the liquid superficial velocity is zero, and the total volumetric flux is equal to the gas superficial velocity. In figure 10, the area average gas velocity is plotted against the gas superficial velocity. The slope gives the value of the distribution parameter and the y -interception gives the drift velocity.

The best fit of the experimental data gives the value of the distribution parameter equal to 2.75. This value is higher than the recommended value of 1.2 for developed bubbly flow in a round pipe. Nevertheless, in a similar work with no liquid flow carried out by Shieh et al (1990) the distribution parameter was found to be 2.26, for the same range of gas superficial velocity.

RESISTIVITY PROBE

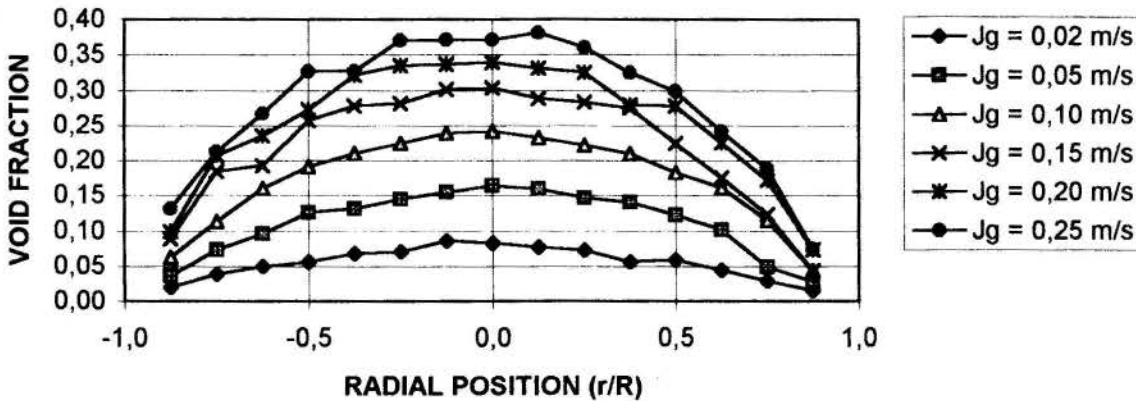


Figure 7 - The radial profile of void fraction.

RESISTIVITY PROBE

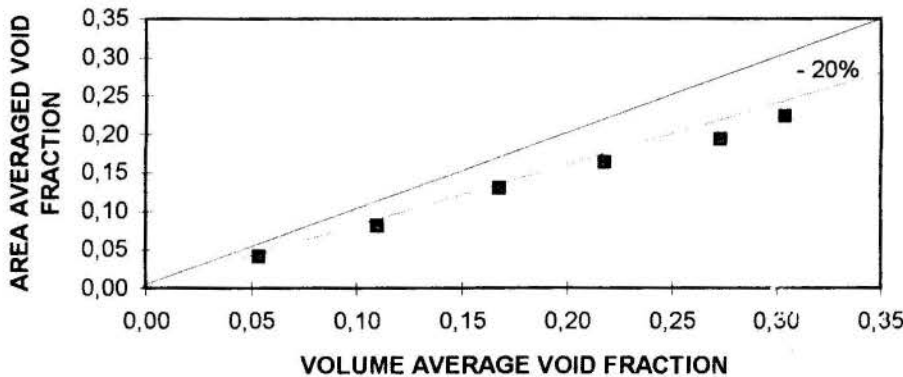


Figure 8- Comparison between area average and volume average void fraction.

RESISTIVITY PROBE

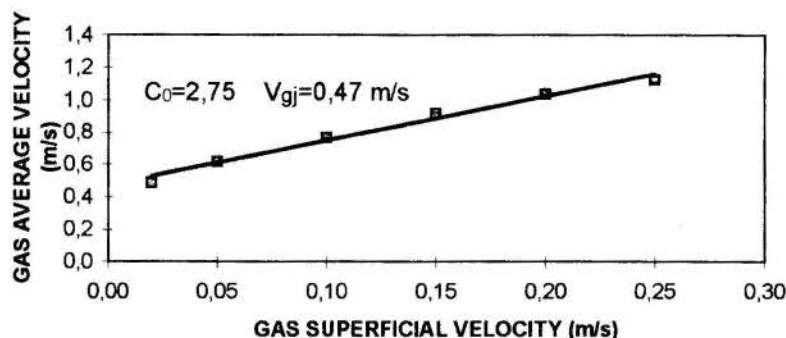


Figure 9 - The drift flux plot.

In the drift-flux model proposed by Kataoka et al (1987) for upward gas flow in stagnant liquid, the distribution parameter is given by:

$$C_0 = \frac{3.8}{2.8 < \alpha > + 1} \quad 0.1 \leq \alpha < 0.385 \quad (9)$$

For a typical area average void fraction value of 0.15, this equation gives a parameter distribution value of 2.68.

The drift velocity is found to be 0.47 m/s from this plot, which is in agreement with the drift-flux model for cap-bubble flow inside a large pipe diameter proposed by Kataoka and Ishii (1987):

$$V_{gj} = 0.54 \sqrt{gD \left(\frac{\Delta \rho}{\rho_l} \right)} \quad (10)$$

For the air-water flow inside a 80 mm diameter pipe, this model gives a drift velocity of about 0.48 m/s.

CONCLUSIONS

The electrical resistivity probe technique for measuring local parameters in a dispersed bubbly flow has been described. The local void fraction and bubble frequency profiles and the residence time distribution were obtained for different gas superficial velocities in a air-water bubble column.

The radial void fraction profiles show a parabolic distribution for all tested flow conditions. The local profiles of the bubble frequency follow the void fraction profile behavior very closely.

The one-dimensional analysis of the averaging flow quantities is presented by the drift-flux model. We find that the distribution parameter is equal to 2.75 which is consistent with the void fraction profiles. The drift velocity is found to be 0.47 m/s, which is in agreement with the drift-flux model for large pipe diameter.

ACKNOWLEDGMENTS

This research was carried out at the Groupement pour la Recherche sur les Echangeurs Thermiques, from CEA-Grenoble. The first author was sponsored by the Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo.

REFERENCES

- Barnea, D. and Shemer, L. 'Void fraction measurements in vertical slug flow: Applications to slug characteristics and transition' *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 15, No. 4, pp. 495-504, 1989.
- Cartellier, A. and Achard, J. L. 'Local phase detection probes in fluid-fluid two-phase flows' *Rev. Sci. Instrum.*, Vol. 62, No. 2, pp. 279-303, February 1991.
- Herringe, R. A. and Davis, M. R. "Structural development of gas-liquid mixture flows" *J. Fluid Mech.*, Vol. 73, No. 1, pp. 97-123, 1976.
- Kataoka, I. et al "Local formulation and measurements of interfacial area concentration in two-phase flow" *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 12, No. 4, pp. 505-529, 1986.
- Kataoka, Y. et al 'Drift-flux parameters for upward gas flow in stagnant liquid' *J. of Nuclear Sci. and Techn.*, Vol. 24, pp. 580-586, 1987.
- Kataoka, I. and Ishii, M. 'Drift-flux model for large diameter pipe and a new correlation for pool void fraction' *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, Vol. 30, pp. 1927-1939, 1987.
- Kocamustafaogullari, G. and Wang, Z. "An experimental study on local interfacial parameters in horizontal bubbly two-phase flow" *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 17, No. 5, pp. 553-572, 1991.
- Leung, W. H. et al. 'Axial development of interfacial area and void concentration profiles measured by bubble-sensor probe method' *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, No. 3, pp. 445-453, 1995.
- Liu, T. J. and Bankoff, S. G. 'Structure of air-water bubbly flow in a vertical pipe - II. Void fraction, bubble velocity and bubble size distribution' *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, No. 4, pp. 1061-1072, 1993.
- Serizawa, A, Kataoka, I. and Michiyoshi, I. "Turbulence structure of air-water bubbly flow- I. Measuring techniques" *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 2, pp. 221-233, 1975.
- Shieh, S. et al 'The effect of hot-leg riser length on the carryover phenomena in a two-phase natural circulation loop' *Nuclear Eng. Design*, Vol. 121, pp. 83-92, 1990.
- Teysseidou, A. and Tapacu, A. "Impedance probe to measure local void fraction profiles" *Rev. Sci. Instrum.*, Vol. 59, No. 4, pp. 631-638, April 1988.
- Van der Welle, R. 'Void fraction, bubble velocity and bubble size in two-phase flow' *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 11, No. 3, pp. 317-345, 1985.
- Zuber, N. and Findlay, J.A. 'Average volumetric concentration in two-phase flow systems' *J. Heat Transfer*, Vol. 87, pp. 453-468, 1965.



DETECÇÃO DA EBULIÇÃO SUBRESFRIADA ATRAVÉS DA ANÁLISE ESPECTRAL DOS SINAIS DE TRANSDUTORES DE PRESSÃO

Alfredo José Alvim de Castro
Dieter Stegemann



Diretoria de Reatores-Divisão Termohidráulica
IPEN - CNEN /SP -Caixa Postal 11049
05422-970 -São Paulo - SP - Brasil

RESUMO

O presente trabalho apresenta uma técnica experimental para detecção da ebulição subresfriada através da análise das flutuações dos sinais de transdutores de pressão. Este trabalho foi realizado no Institut fuer Kerntechnik und zertoerungsfreie Pruefverfahren von Hannover -IKPH/Alemanha em um pequeno circuito termohidráulico com uma seção de testes composta por uma barra aquecida em um canal anular. Para a detecção da ebulição subresfriada são utilizados sensores de pressão piezoresistivos e técnicas de análise espectral e de correlações de sinais. Nos experimentos foram feitos estudos dos parâmetros de influência na ebulição subresfriada e os seus efeitos.

INTRODUÇÃO

A otimização e o desenvolvimento do projeto de trocadores de calor tem como objetivos tentar, sempre que possível, minimizar falhas, reduzir custos e gastos com material e aumentar eficiência através de altas densidades de calor. Devido a sua grande utilização em plantas de processo, o desenvolvimento de trocadores de calor mais eficientes é de grande significado para a indústria moderna permitindo economia de capital e energia.

A ebulição subresfriada consiste no regime de troca de calor de maior interesse para o projeto térmico de equipamentos de troca de calor, por permitir que altos fluxos de calor sejam atingidos de maneira estável para moderados superaquecimentos da superfície. Diversos fatores afetam o processo de ebulição subresfriada podendo ser mencionados: a pressão do sistema, a velocidade de escoamento do fluido, o grau de subresfriamento, o fluxo de calor, o acabamento da superfície de aquecimento e as características de molhamento do fluido em relação ao material da superfície. Na ebulição subresfriada, devido ao alto fluxo de calor, as bolhas de vapor são geradas nos núcleos de ativação da superfície aquecida. Estas bolhas crescem, destacam-se e condensam no líquido subresfriado. A condensação ocorre num tempo muito curto (ms) na forma de implosão das bolhas de vapor provocando pulsos de pressão e aumento da turbulência na camada limite. Este aumento da turbulência promove uma transferência de calor mais efetiva diminuindo a diferença de temperatura entre a parede e o líquido subresfriado, melhorando o coeficiente de troca de calor.

Devido à implosão das bolhas de vapor o fenômeno da ebulição subresfriada é acompanhado por pulsos de pressão, ruídos acústicos e algumas vezes por vibrações, os quais podem ser detectados através de sensores dinâmicos e técnicas de análise espectral e de correlações de sinais.

MONTAGEM EXPERIMENTAL

Um esquema do circuito experimental do IKPH é mostrado na Fig. 1. O circuito é formado por uma parte de alimentação do

refrigerante (A) constituída por uma bomba, dois trocadores de calor refrigerados a ar, pressurizador, degaseificador, válvulas de regulagem, dois desvios de fluxo, um ventilador e uma parte (B) composta pela seção de testes e sua alimentação elétrica.

A seção de testes (Fig.2) é formada por uma câmara de entrada e uma câmara de saída de alumínio, um canal de 680 mm de comprimento e 20 mm de diâmetro composto por várias peças de policarbonato para fixação dos detectores e visualização da ebulição e um aquecedor de aço inoxidável com 11.5 mm de diâmetro e 680 mm comprimento ativo, aquecido indiretamente através de um transformador regulável de corrente contínua (20 kVA). A seção de testes é acoplada ao circuito através de duas manguueiras flexíveis para que as vibrações procedentes do circuito sejam em parte amortecidas e não afetem o estudo da ebulição subresfriada.

Para se poder obter reprodutibilidade dos resultados e se evitar problemas de corrosão química e depósito de materiais na seção de testes utiliza-se água desmineralizada como fluido refrigerante.

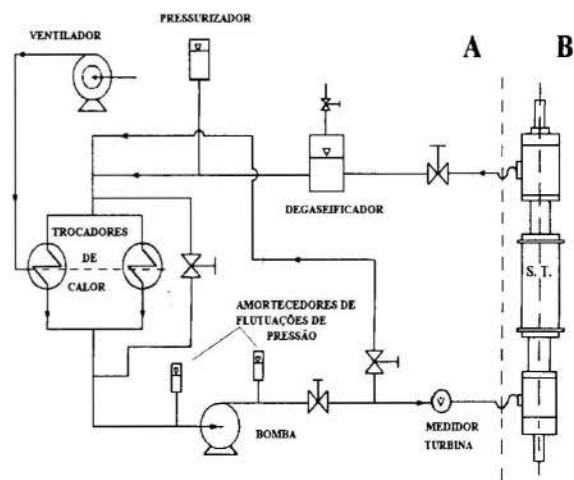


Fig.1: Circuito Experimental do IKPH.

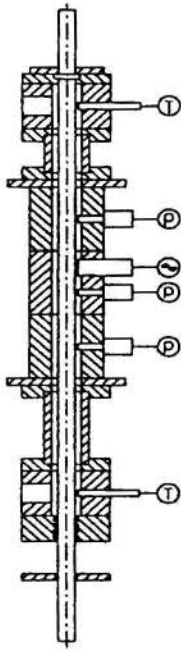


Fig. 2: Seção de testes anular.

OBTENÇÃO E REDUÇÃO DOS DADOS

Para o conhecimento dos parâmetros de operação do circuito e o seu controle durante os experimentos efetuam-se medidas da temperatura na entrada e saída da seção de testes, medidas da queda de tensão e corrente na barra aquecida e medidas de vazão de refrigerante.

A detecção da ocorrência da ebulição subresfriada é feita através da medida das flutuações de pressão em alguns pontos do canal refrigerante. Para uma melhor análise dos efeitos produzidos pela ebulição, são realizadas outras medidas dinâmicas como deslocamentos da barra aquecida e acelerações da seção de testes.

A Fig. 3 apresenta um desenho esquemático dos sinais medidos. As flutuações de pressão são obtidas através de quatro minitransdutores do tipo Kulite XTM-190-50. Dois destes detectores (D2X, D2Y) estão instalados no meio da seção de testes defasados de 90° nas direções X e Y. Os outros dois detectores (D1X, D3X) estão instalados na direção X deslocados 100 mm axialmente em relação ao meio da seção de testes. Os deslocamentos da barra aquecida são medidos no meio da seção de testes por meio de dois detectores indutivos (W2X, W2Y) do tipo Reutlinger WSG-69 defasados de 90° nas direções X e Y. Para análise das vibrações da seção de testes é utilizado um acelerômetro tri-axial (B2X, Y, Z) do tipo Kulite TGY 600-100 também posicionado no meio do canal.

Para análise da ebulição subresfriada nos campos de frequência e tempo, os sinais dos detectores foram condicionados por filtros passa alta e passa baixa para a região de frequência de interesse (3 a 480 Hz), amplificados para um máximo de 1.5 V e gravados.

A redução dos dados gravados em fitas analógicas foi feita através de uma sequência de programas existentes no computador HP21MX do IKPH. A transformação dos dados analógicos em digitais foi obtida através de conversores ADC com uma taxa de amostragem de 1200 Hz. Os dados digitalizados foram então classificados por detector e

armazenados em blocos de 1024 pontos na memória do computador. Para a transformação dos dados para o campo de frequência foram utilizadas janelas do tipo "Hanning" e o algoritmo FOURI, o qual trabalha com as FFT ("Fast Fourier Transformation") desenvolvidas por Cooley e Tukey (1965). A análise dos dados no campo de frequência foi realizada através do cálculo das funções estatísticas como Autoespectro (ASLD), Correlação Cruzada (KSLD) e Coerência com o programa PRAPH.

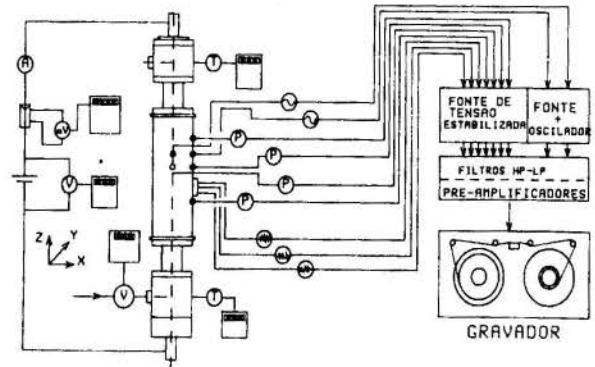


Fig. 3: Diagrama de obtenção dos dados.

A função ASLD representa a intensidade de um sinal temporal $x_1(t)$ no campo de frequência, enquanto que a KSLD representa a intensidade de dois sinais $x_1(t)$ e $x_2(t)$. A ASLD e a KSLD são calculadas através da transformação complexa de Fourier dos sinais $x_1(t)$ e $x_2(t)$, X , e do conjugado desta transformação, X^* , mostrado nas Eq. (1), Eq. (2), Eq. (3) e Eq. (4).

$$X_1(j\omega, t) = \int_0^t X_1(t) \cdot e^{-j\omega t} dt \quad (1)$$

$$X_1^*(j\omega, t) = \int_0^t X_1(t) \cdot e^{j\omega t} dt \quad (2)$$

$$ASLD_1(j\omega) = \frac{X_1(j\omega, t) \cdot X_1^*(j\omega, t)}{t} \quad (3)$$

$$KSLD_{1,2}(j\omega) = \frac{X_1(j\omega, t) \cdot X_2^*(j\omega, t)}{t} \quad (4)$$

A função coerência é utilizada como uma medida normalizada da similaridade entre dois sinais, Eq. (5). Se dois sinais contêm a mesma informação para uma determinada frequência, a coerência para esta frequência tem valor máximo e igual a 1. Se dois sinais são totalmente independentes em uma determinada frequência, o valor da coerência para esta frequência é mínimo e igual a 0.

$$C_{1,2}^2(j\omega) = \frac{|KSLD_{1,2}(j\omega)|^2}{ASLD_1(j\omega) \cdot ASLD_2(j\omega)} \quad (5)$$

Para se obter uma boa estatística dos dados foram realizadas gravações de 3 minutos dos detectores para cada condição de medida. Devido a necessária limitação do tempo

de análise por motivos técnicos(tempo de computador,etc...), é utilizado um erro estatístico para o cálculo das funções de Fourier dado pela Eq. (6),

$$\epsilon = \frac{1}{\sqrt{t_m \cdot \Delta f}} \quad (6)$$

onde t_m e Δf representam respectivamente o tempo de medida e a resolução da frequência no campo de análise.

Nos experimentos realizados permitiu-se um erro estatístico de 12.5%, o qual para uma resolução de 1 Hz resultou num tempo de 64 s de gravação dos sinais.

RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Como já citado na introdução, a ebulição subresfriada é caracterizada pela implosão das bolhas de vapor na corrente de líquido subresfriado originando pulsos de pressão e aumento de turbulência na superfície de troca de calor. Assim sendo, a ebulição subresfriada pode ser detectada através da ocorrência dos pulsos de pressão. A frequência e a amplitude destes pulsos são funções do grau de subresfriamento, da velocidade média no canal, da pressão, do fluxo de calor e do acabamento superficial da parede aquecida.

Para uma melhor compreensão deste fenômeno realizou-se uma série de medidas experimentais para a $P=1.2$ bar, variando o fluxo de calor, velocidade média no canal e o grau de subresfriamento. A Fig.4 apresenta um conjunto de autoespectros e sinais temporais do detetor de pressão D2X para as condições de fluxo de calor 55 W/cm^2 , rugosidade da superfície $4\mu\text{m}$ e velocidade média no canal de 1.5m/s como função do grau de subresfriamento.

Para todos os detectores foi realizada uma medida de referência inicial ($\Delta T= 77.5 \text{ K}$) sem aquecimento, de forma a serem identificados sinais provenientes do circuito e que tenham influência na seção de testes. Do autoespectro de D2X pode ser observado a influência da rotação da bomba e de uma ressonância do fluido através de picos bem definidos à 48 Hz e 140 Hz respectivamente. As amplitudes máximas alcançadas foram de 2 mbar. Com o início do processo de transferência de calor através da superfície da barra e com a queda do grau de subresfriamento para $\Delta T= 43 \text{ K}$, nota-se que o autoespectro de pressão apresenta um aumento do nível de ruídos (1×10^{-11} para $1 \times 10^{-7} \text{ dB}$) na região de sinais de alta frequência entre 200 a 500 Hz. Isto é explicado através do início do processo de ebulição subresfriada. O movimento de liberação das bolhas da parede aquecida e a subsequente condensação das mesmas no fluido subresfriado, provoca um aumento do nível de ruído dos detectores de pressão.

Uma diminuição do grau do subresfriamento para $\Delta T=32 \text{ K}$, provoca o alcance de um limite entre o campo de ebulição subresfriada sem pulsos periódicos para o campo de ebulição subresfriada com pulsos característicos. Isto pode ser visto através do primeiro pico totalmente desenvolvido referente aos pulsos de condensação no autoespectro de D2X. A este limite também está associada a parada de crescimento do nível médio de ruído dos detectores de pressão. Este fenômeno pode também ser observado nos sinais temporais de D2X, pelo aparecimento de sinais periódicos de alta frequência(pulsos de condensação) acoplados a sinais de baixa frequência. Para este grau de subresfriamento, o autoespectro de pressão apresenta um pico da frequência fundamental dos pulsos (116 Hz) e outro pico da frequência múltipla(232 Hz). O pico de 232 Hz é um múltiplo da frequência fundamental, o

qual se refere a forma não harmônica dos pulsos. Um fato importante a se observar, é que quando o limite para a iniciação dos pulsos característicos é atingido, tanto a barra aquecida como a seção de testes passam a ser excitadas pelos pulsos de condensação, o que pode ser verificado nos altos valores de coerência para as frequências dos pulsos mostrados nos gráficos da Fig.5.

As maiores amplitudes dos sinais dos detectores de pressão ocorre para o grau de subresfriamento $\Delta T= 26 \text{ K}$. Este fato se deve a sobreposição da frequência fundamental dos pulsos com a frequência natural de 1º modo da barra, gerando uma ressonância.

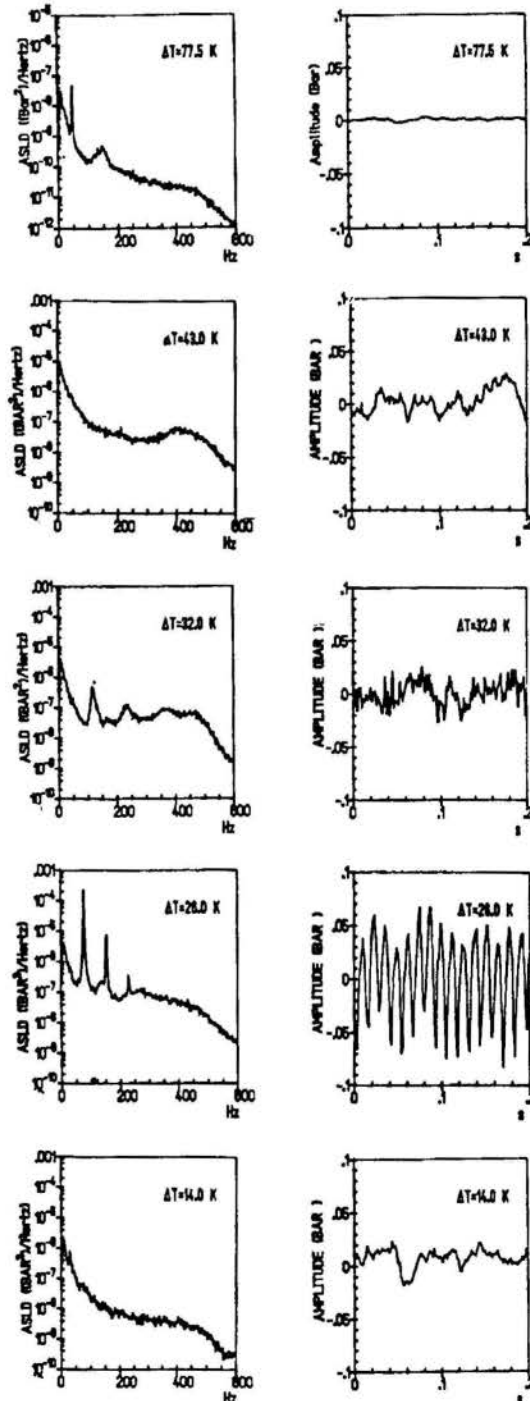


Fig.4:Autoespectros e amplitudes de D2X.

A Fig.6 apresenta de forma mais detalhada os autoespectros e as amplitudes dos sinais dos detetores na direção X, para o caso de ressonância. Desta figura pode ser observado que a excitação à vibrações produzida pela frequência fundamental dos pulsos de pressão (78 Hz) e o seu 2º e 3º harmônicos, produzem deslocamentos relativos de 0.05 mm para o aquecedor, pulsos de pressão da ordem de 0.15 bar e acelerações da seção de testes da ordem de 0.04 g.

Com a diminuição do grau de subresfriamento para $\Delta T=14$ K, o autoespectro de D2X mostra ainda uma frequência dos pulsos de condensação (31.25 Hz) com uma intensidade bem pequena. Os sinais temporais perdem a forma periódica e as amplitudes assumem valores da mesma ordem do começo dos experimentos. Isto se deve à coalescência das bolhas de vapor significando o término da ebulição subresfriada e início da ebulição em massa.

A Fig.7 representa a variação da frequência dos pulsos de condensação com o grau de subresfriamento para as condições de fluxo de calor 55 W/cm^2 , velocidade 1.5 m/s e rugosidade $4 \mu\text{m}$. Nesta figura também pode ser observado, para todas as medidas com aquecimento, a existência de uma banda de frequência próximo a 10 Hz com um nível de ruído relativamente alto comparativamente ao resto do espectro. Este fato se deve aos movimentos de baixa frequência da vareta aquecida em função das deformações térmicas.

Na Fig.8 pode ser observado a variação da amplitude e dos autoespectros de D2X em função do fluxo de calor para velocidade 1.75 m/s , grau de subresfriamento 32 K e rugosidade $8 \mu\text{m}$.

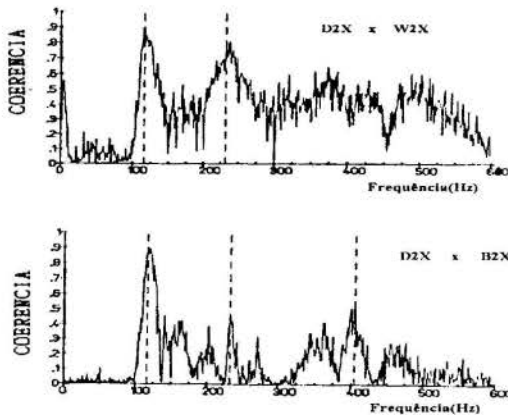


Fig.5:Coerência entre os detectores para $\Delta T= 32 \text{ K}$.

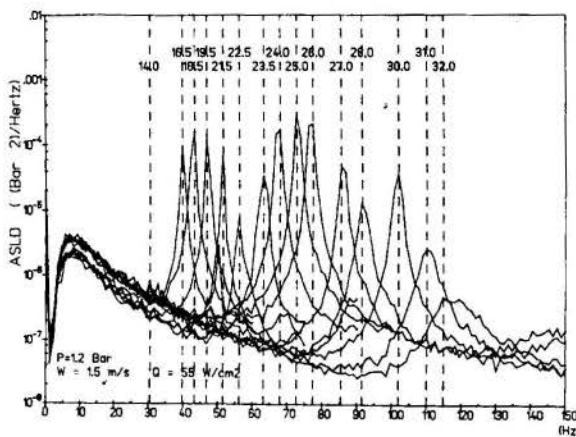


Fig.7:Autoespectros de D2X como função do grau do subresfriamento.

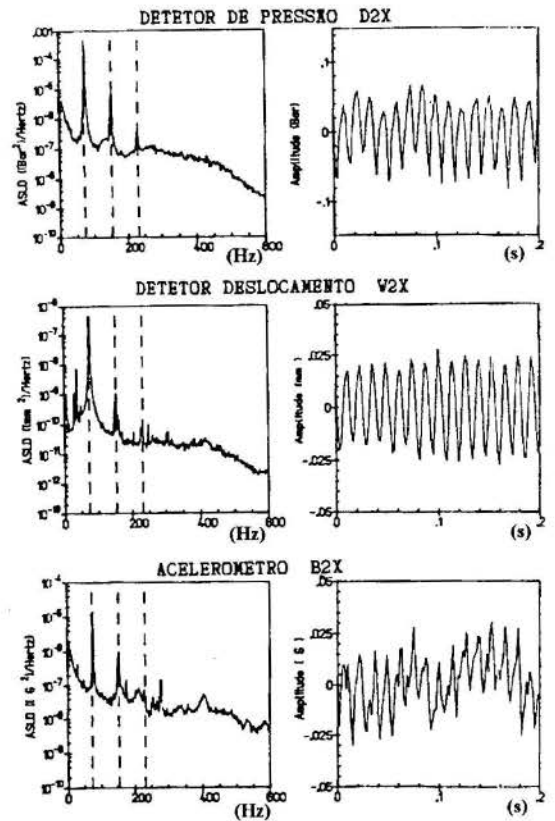


Fig.6:Autoespectros e amplitudes para o caso de ressonância $\Delta T=26 \text{ K}$.

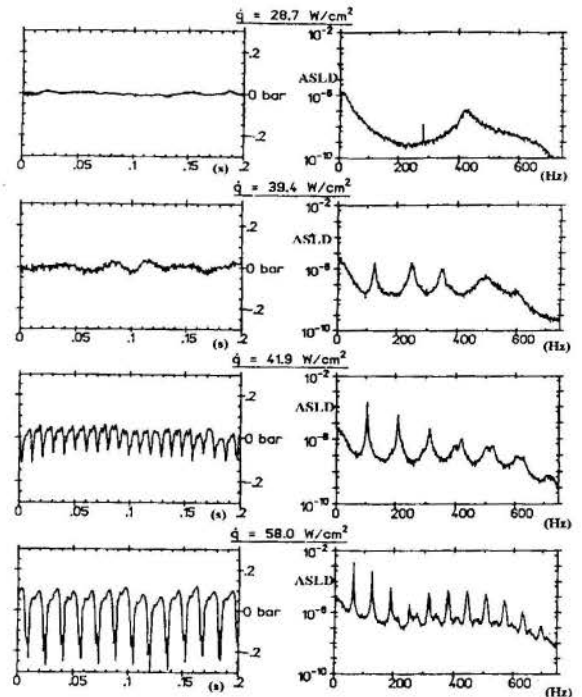


Fig.8:Variação dos pulsos de pressão com o fluxo de calor.

Ao lado da dependência dos pulsos de condensação em relação a parâmetros termohidráulicos, é também de interesse o conhecimento da distribuição dos pulsos na direção axial e longitudinal do aquecedor. Na Fig. 9 são mostrados os autospectros e amplitudes dos sinais de D2X, D1X e D2Y para a velocidade de 1.5 m/s, fluxo de calor de 55 W/cm² e $\Delta T=26$ K, caso de ressonância.

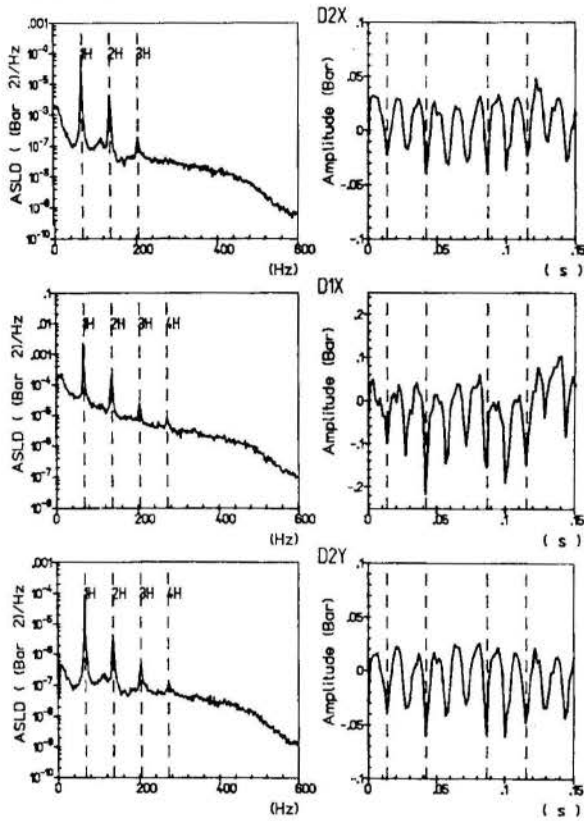


Fig.9: Sincronização dos pulsos de pressão na ressonância.

Interessante a se observar na Fig.9, é a perfeita sincronização em relação aos sinais temporais para os pulsos de pressão, tanto na direção Y como na direção X. Apesar da distância axial de 100mm entre D2X e D1X e da diferença de temperatura do fluido de 1.6 K entre os dois pontos de medida, a qual implicaria num deslocamento de 10 Hz (Fig.7) para a frequência dos pulsos de condensação, existe uma perfeita sincronização geral dos pulsos detectados no canal.

A Fig.10 mostra um outro caso de sincronização dos pulsos de pressão próxima a região final da ebulição subresfriada ($f=43$ Hz), $\Delta T=18.5$ K, $V=1.5$ m/s e fluxo de calor 55 W/cm².

A sincronização dos pulsos, como também as modificações das frequências dos pulsos e suas amplitudes, podem ser explicadas da seguinte maneira: Pesquisas realizadas por Griffith & Wallis (1960), Bergles & Rohsenow (1964) e Bucher (1979) mostram que para fluxo de calor e velocidade constante, as dimensões das bolhas de vapor aumentam com a queda do grau de subresfriamento. Ao mesmo tempo, a dinâmica do processo de condensação e a altura dos pulsos diminui. Estes dois efeitos concorrentes atuam conjuntamente no fenômeno de sincronização das bolhas de vapor. Com a queda do grau de subresfriamento, o número de bolhas que são produzidas e a amplitude dos pulsos de condensação crescem levemente. A partir de um determinado grau de subresfriamento, estes pulsos se tornam tão grandes, que através da propagação das ondas de pressão, as bolhas de vapor que estão sendo formadas nas vizinhanças são descoladas da

parede. Decisivo para este efeito é a queda de pressão local que atua contra o crescimento das bolhas de vapor, através dos pulsos negativos de condensação. Com isto, há o aumento da pressão interna nas bolhas o que leva à repentinas implosões das mesmas. A partir de uma determinada temperatura do fluido, alcance de um adequado tempo de crescimento e de condensação para as bolhas de vapor, é desenvolvida a reação em cadeia. Com a queda do grau de subresfriamento, a velocidade de condensação das bolhas é diminuída, a amplitude dos pulsos de pressão se torna pequena e a onda de pressão não é mais suficiente para o deslocamento das bolhas de vapor. A reação em cadeia é extinguida.

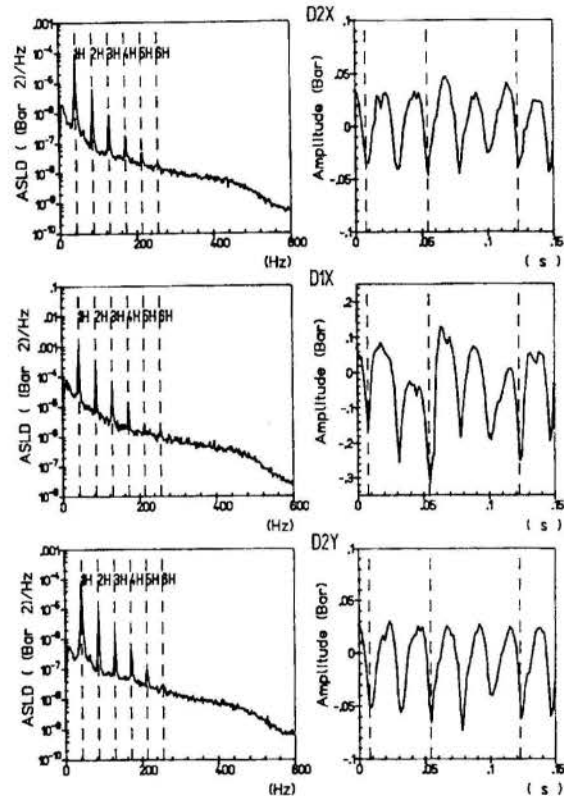


Fig.10 : Sincronização dos pulsos de pressão para $\Delta T=18.5$ K.

CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como propósito principal o desenvolvimento de uma técnica de medida que permitisse a detecção da ocorrência de ebulição subresfriada em equipamentos de troca de calor por meio de transdutores de pressão. As medidas realizadas permitiram mostrar a dependência da frequência e da amplitude dos pulsos de pressão em relação ao grau de subresfriamento, fluxo de calor, velocidade do fluido refrigerante no canal e o seu relacionamento com as vibrações da superfície aquecida.

Do que foi apresentado, pode ser concluído que existe um campo limitado da ebulição subresfriada onde existem pulsos característicos de pressão bem determinados, os quais melhoram o processo de transferência de calor mas também podem excitar as superfícies aquecedoras à vibrações, principalmente no caso de sobreposição da frequência fundamental dos pulsos de pressão às frequências naturais de 1^o e 2^o modo da superfície de aquecimento.

Decisivo para esta excitação à vibrações é uma força periódica produzida pela distribuição não simétrica dos pulsos de pressão radialmente. Esta distribuição não simétrica na

seção anular é gerada pelo maior número de instrumentações na direção X no interior do canal. Este tipo de escoamento, com diferentes turbulências nas paredes da superfície do aquecimento, é de se esperar em escoamentos complexos em feixe de barras/tubos com diferentes tipos de canais e distribuição de velocidade; como no caso de trocadores de calor, geradores de vapor, reatores nucleares, evaporadores, etc ...

Em função dos resultados observados sugere-se a operação de equipamentos de troca de calor em condições de ebulição subresfriada com a monitoração dos pulsos de condensação por meio de transdutores de pressão. Desta forma, conhecidas as frequências naturais do equipamento e seus componentes, pode-se obter altas taxas de transferência de calor e evitar-se condições de ressonância que possam vir ocasionar falhas mecânicas.

REFERÊNCIAS

Alvim, A., Martens, V. e Stegemann, D., 1991, "Análise de vibrações em barras excitadas por ebulição subresfriada", VIII ENFIR- Atibaia, SP.

Bergles, A.E., Rohsenow, W.M., 1964, " The determination of forced-convection surface boiling heat transfer ", Trans.ASME, series C, 86.

Bucher, B., 1979, " Beitrag zum Siedebeginn beim Unterkuehlten Sieden mit Zwangskonvektion ", Promotionsarbeit -Hannover Universitaet-Hannover.

Cooley, J.W., and Tukey, J.W., 1965, "An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series ", Mathematics of Computation, Vol.19, p.297.

Griffith, P., Wallis, J.D., 1960, " The role of surface conditions in nucleate boiling", Chem.Engng.Ptogr.Simp. series, N.30.

Martens, V., 1987, " Untersuchung der Schwingungsanregung von Waermetauscherrohren durch mantelseitiges Unterkuehltes Sieden", Promotionsarbeit - Hannover Universitaet- Hannover.

ABSTRACT

The present work consist in the experimental analysis of the phenomom of subcooled boiling with piezoresistive pressure minitransducers. The experiment was perfomed in a small thermal-hydraulic loop at IKPH-Hannover University, using a test section of a heated rod in a annular channel. It was investigated the influence of several parameters in the subcooled boiling and in the rod vibration.



UTILIZAÇÃO DE TERMOPARES PARA MEDIÇÃO DE VELOCIDADE E TEMPERATURA EM ESCOAMENTOS TURBULENTOS



Aurimar M. Reis
Jurandir I. Yanagihara
Jeronimo S. Travelho
Departamento de Engenharia Mecânica
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
05508-900 - São Paulo - SP - Brasil

RESUMO

Uma nova técnica de medida foi elaborada, a qual consiste na utilização de termopares como sensores para medida de velocidade instantânea e de flutuações de temperatura em escoamentos turbulentos. Essa técnica se baseia na utilização de três termopares introduzidos no escoamento, onde dois deles, separados por uma pequena distância ao longo do escoamento, fazem as medidas simultaneamente. Ao comparar as equações diferenciais obtidas para dois termopares chega-se a equações algébricas bastante simples para a velocidade e para a temperatura, as quais podem ser resolvidas em cada instante de tempo. Uma simulação da técnica é apresentada.

INTRODUÇÃO

Este trabalho consiste na descrição de uma nova técnica de medição de flutuações de temperatura e de velocidade em escoamentos turbulentos de baixa frequência. Essa técnica procura fazer, principalmente, as correções necessárias em medidas feitas por termopares em escoamento de gases de combustão. Como uma extensão, a técnica permite também obter as flutuações de velocidade do escoamento. Na seção de resultados uma simulação da técnica é feita utilizando alguns dados teóricos.

É conhecido que o principal problema em medidas feitas por termopares se encontra na transferência de calor entre o gás e o termopar. As medidas de temperatura obtidas por termopares, além de serem atenuadas, sofrem um atraso de resposta devido aos efeitos da inércia térmica do sensor, que está relacionada a essa transferência de calor. Para corrigir isto, geralmente é determinada a constante de tempo do termopar que está diretamente ligada ao coeficiente de transferência de calor. A constante de tempo representa praticamente o tempo de atraso de resposta do sensor e está relacionada portanto com a mudança de fase e atenuação nas medidas realizadas.

Com o intuito de superar este problema, um método baseado em dados de 3 termopares foi elaborado por Reis (1994). Este método consiste basicamente em obter a temperatura do primeiro termopar em função do segundo, a uma certa distância do primeiro, e comparar com a temperatura do terceiro termopar. Este último é posteriormente colocado na mesma posição e com o dobro do diâmetro do primeiro. Comparando as duas equações diferenciais obtidas - para o primeiro e terceiro termopares - chega-se então a uma equação algébrica simples para a temperatura do gás cujos coeficientes são função somente dos dados medidos e das propriedades constantes do escoamento e do termopar.

O termopar, atualmente, constitui apenas mais uma das muitas técnicas de medidas de temperatura existentes. Os grandes avanços ocorridos nas últimas décadas em eletrônica, em tecnologia material e em computadores permitiram o surgimento de várias técnicas modernas de medidas em campos de escoamento. Essas técnicas mais avançadas e mais sofisticadas proporcionaram uma análise mais detalhada dos campos medidos, bem como uma grande contribuição em áreas complexas de Mecânica dos Fluidos Experimental. Chamadas de diagnósticos ópticos ou técnicas laser, esses processos de medidas, discutidos por Lederman e Sacks (1984) e por Peterson (1979), vieram complementar as técnicas de sondas existentes.

Apesar das vantagens oferecidas pelas novas técnicas de medidas elas apresentaram alguns inconvenientes como algumas dificuldades no uso e, principalmente, exigências de equipamentos sofisticados que eleva bastante os seus custos. Além disso elas não são adequadas para utilização em ambientes industriais severos. Devido a esses inconvenientes a preferência pelas sondas antigas, como termopares, continua sendo maior porque são técnicas de medidas de custo muito mais baixo.

Para medidas de temperatura o termopar é ainda o instrumento mais utilizado por apresentar além do baixo custo, respostas rápidas de variações de temperatura no escoamento. É um instrumento bem simples, de fácil manuseio e instalação, cobre um amplo intervalo de temperaturas e, diferente de muitos outros transdutores de temperatura, o termopar não está sujeito a problemas de auto-aquecimento.

O termopar continua sendo usado extensivamente como um diagnóstico de combustão em chamas gasosas turbulentas (Yoshida, 1988 e Yoshida et al., 1989) e em chamas de spray turbulentas (Queiroz e Yao, 1990 e Son et al., 1989). É frequentemente usado para calibrar e documentar a exatidão de técnicas laser como observado por Son et al. (1989). No trabalho de Chandran et al. (1985) os sinais de termopares compensados comparam bem com medidas feitas pela técnica de espalhamento molecular Rayleigh.

O método de compensação a ser apresentado a seguir é um método que leva em consideração principalmente a transferência de calor por convecção entre o termopar e o escoamento. Caso outros fenômenos (radiação, por exemplo) sejam significativos, as correções podem ser acrescentadas após a realização da compensação. É um método que se baseou em várias relações para a transferência de calor, relacionadas por Reis (1994), antes de se obter uma fórmula para a constante de tempo. A constante de tempo, portanto, foi considerada como função do tempo, ao contrário do que é geralmente utilizado por muitos autores: uma constante de tempo média. Daí a importância do presente método.

Além de sua utilização comum em medidas de temperatura o termopar também pode ser utilizado para medidas de velocidade como é feito no trabalho de Motevalli et al. (1992). No trabalho deles uma técnica é descrita, a qual se baseia na utilização de dois termopares para medidas de velocidade e temperatura em escoamentos turbulentos de baixa velocidade. Nessa técnica, referida como CCV ("Cross-Correlation Velocimetry"), os registros de temperatura dos dois termopares são correlacionados para determinar a velocidade média do escoamento. A técnica CCV se baseia no conceito de "vórtice congelado" no qual as estruturas

vorticais retêm suas formas e características em um curto período de espaço e de tempo em escoamentos de baixa turbulência.

Outras utilizações de sondas em medidas de velocidade estão nos trabalhos de Cox (1977) onde é proposta uma técnica de correlação cruzada para medidas dos perfis de temperatura e velocidade média simultâneas usando uma única sonda. Bradbury e Castro (1971) e Gaster e Bradbury (1976) empregam uma técnica de "pulsed-wire" para medidas de velocidade em escoamentos altamente turbulentos. No entanto, essa técnica perturba muito o escoamento localmente. Mesch et al. (1971) também usaram o conceito de correlação cruzada entre dois sensores em escoamentos bifásicos.

Neste trabalho, o mesmo procedimento utilizado para fazer a compensação das medidas de temperatura foi feito para obter as flutuações de velocidade. As duas equações diferenciais correspondentes a dois termopares no escoamento são comparadas. A velocidade está embutida na constante de tempo. Ao comparar as duas equações, partindo da hipótese de que as temperaturas e as velocidades são correspondentemente iguais nos dois termopares, chega-se também a uma equação bastante simples para a velocidade, similar àquela obtida para a temperatura. Portanto, a velocidade pode ser obtida em cada instante de tempo.

O MÉTODO DE COMPENSAÇÃO

Medidas de Temperatura. Um termopar, ou qualquer mecanismo de imersão, indica apenas sua própria temperatura. Em geral não será igual à temperatura do gás a menos que precauções especiais sejam tomadas. Basicamente há quatro fenômenos bem definidos que ocorrem entre o termopar e o gás envolvente: (1) transferência de calor da sonda ou para a sonda por radiação, (2) transferência de calor por condução através dos fios do termopar, (3) conversão de energia cinética em energia térmica na camada limite em torno do termopar, e (4) transferência de calor da camada limite para a junção por convecção. Em certas situações na área de combustão os três primeiros fatores são bem menos significativos do que os do último. Portanto, nesses casos, é comum em medidas feitas por termopares considerar apenas a transferência de calor por convecção.

Derivações das equações individuais para as transferências de calor por radiação, por condução e por convecção são geralmente feitas separadamente quando os efeitos do meio são pequenos de modo que a presença de um não influencia os valores dos outros efeitos. Em muitos trabalhos envolvendo aplicações de termopares em combustão é admitido que os efeitos de radiação para a vizinhança, condução para as bordas e efeitos catalíticos (reações catalíticas em sondas não revestidas), são pequenos comparados com os efeitos de convecção. Segundo Son et al. (1989), se radiação ou condução para as bordas é significativa, pode ser possível aplicar correções aproximadas após a realização da compensação para a inércia térmica.

Com as hipóteses acima mostra-se pela conservação da energia aplicada à junção (sensor) do termopar que,

$$MC_p \frac{dT(t)}{dt} = hA(T_g(t) - T(t)), \quad (1)$$

onde $T_g(t)$ e $T(t)$ são as temperaturas do gás e da junção do termopar no instante de tempo t . C_p , M e A são o calor específico, a massa e a área superficial do termopar, respectivamente, e h é o coeficiente de transferência de calor. Reorganizando obtém-se:

$$\tau \frac{dT(t)}{dt} = T_g(t) - T(t), \quad (2)$$

sendo τ , a constante de tempo, dada pela relação abaixo:

$$\tau = \frac{MC_p}{hA}, \quad (3)$$

A constante de tempo é praticamente uma medida do tempo de resposta do sensor às mudanças do meio. Geralmente são utilizados alguns procedimentos para avaliar o tempo de resposta do sensor do termopar antes da utilização em medidas transientes de temperatura. Esses procedimentos consistem em seções de testes onde o sensor é submerso em um banho de temperatura conhecida. A temperatura do banho é variada e então observada a resposta resultante. Os modos mais simples de variações da temperatura são: a) mudança linear, b) mudança em degrau (brusca) e c) mudança periódica na temperatura ambiente.

A constante de tempo ou a taxa de resposta do sensor de temperatura obviamente depende das propriedades físicas do sensor e das propriedades físicas e dinâmicas do ambiente. Essas propriedades dependem da temperatura e assim o tempo de resposta do sensor varia também com a mudança na temperatura. Além disso, o coeficiente de troca de calor depende fortemente do número de Reynolds, consequentemente a resposta do sensor varia também com a velocidade no ambiente de medição. Daí a grande dificuldade para se determinar a constante de tempo.

O sinal de voltagem medido pelo termopar deve ser primeiramente transformado em sinal de temperatura antes que a compensação seja realizada. Isto porque as equações acima estão em termos de temperatura e a relação entre voltagem (fem) e temperatura para o termopar não é linear. Na compensação digital, a relação fem-temperatura é simplesmente avaliada em termos da curva polinomial dada para cada termopar. Na compensação eletrônica, a mesma operação é realizada usando um linearizador eletrônico antes da compensação. No entanto, a linearização digital é usualmente mais exata que a linearização eletrônica, conforme Son et al. (1989).

Após o processo de transformação do sinal em temperatura a etapa seguinte consiste na compensação propriamente dita. O problema principal na compensação se encontra na determinação da constante de tempo τ . Usualmente uma constante de tempo média é usada em compensação digital, como também é feito em compensação elétrica. Poucos estudos utilizam mais de uma constante de tempo média ou uma constante de tempo instantânea envolvendo medidas simultâneas de temperatura e de velocidade como no trabalho de Yoshida (1988).

Neste trabalho é admitido uma constante de tempo como função do tempo, avaliada em termos das diversas correlações de números de Nusselt Nu_D existentes para um escoamento sobre uma esfera (Reis, 1994), uma vez que o formato da junção de medida do termopar pode ser considerado como esférico. Essas correlações de Nu_D apresentam uma forma semelhante à relação dada abaixo pela Eq. (4). Para a grande maioria dos gases o número de Prandtl pode ser admitido como aproximadamente constante e igual a 0,7. Com isto, uma forma bem razoável para Nu_D em um escoamento sobre uma esfera de diâmetro D é admitida:

$$Nu_D = 2,0 + c_1 Re_D^m \quad (4)$$

onde c_1 e m são constantes; c_1 é uma constante envolvendo o número de Prandtl.

O coeficiente de transferência de calor é dado por $h = Nu_D k/D$, sendo k a condutividade térmica do gás. O número de Reynolds é dado por $Re_D = \rho v D / \mu$, onde ρ e μ são a densidade e a viscosidade do gás, respectivamente, e v a velocidade. Considerando as propriedades do gás (ρ , k e μ) e do termopar (ρ_T , C_p ; $\rho_T =$ densidade do material do termopar) constantes, o inverso da Eq. (3) para a constante de tempo pode ser colocado na seguinte forma:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{c_2}{D^2} + \frac{c_3 v^m}{D^{2+m}} \quad (5)$$

onde $c_2 = 42k/\rho_T C_p$ e $c_3 = (6kc/\rho_T C_p)(\rho/\mu)^m$. Admitindo pequenas variações de k , ρ , μ , ρ_T e C_p com a temperatura, c_2 e c_3 podem ser consideradas como constantes. A Equação (2), com τ dado pela Equação (5), torna-se:

$$\frac{\dot{T}}{T - T} = \frac{c_2}{D^2} + \frac{c_3 v^m}{D^{2+m}} \quad (6)$$

onde o ponto sobre T indica derivada com respeito ao tempo.

Aplicando a Eq. (6) para dois termopares de diâmetros pequenos diferentes e separados por uma pequena distância ao longo do escoamento, pode-se admitir as seguintes considerações para efeito de cálculo: devido a distância entre os termopares o fluido leva um determinado tempo para ir do primeiro ao segundo termopar à jusante. Considerando que o fluido se propaga convectivamente com a velocidade média do escoamento entre os dois termopares, esse tempo é simplesmente a pequena distância dividida pela velocidade média. Multiplicando isso com a frequência de variação da velocidade, ou da temperatura do gás, obtém-se a diferença de fase resultante. Mas com os termopares separados por uma distância bastante pequena essa diferença de fase torna-se muito pequena, e assim pode-se admitir que a velocidade na posição do primeiro termopar é aproximadamente igual a velocidade no segundo termopar ($v_1 = v_2$) e também a temperatura ($T_{k1} \approx T_{k2}$).

Combinando então as duas equações chega-se à seguinte equação algébrica simples para a temperatura do gás:

$$AT_1^2 + BT_2 + C = 0, \quad (7)$$

sendo os coeficientes A , B e C dados por

$$A = \frac{c_2}{D_2^2} \left(\frac{D_2}{D_1} \right)^{2+m} - \frac{c_2}{D_1^2},$$

$$B = \dot{T}_1 - \left(\frac{D_2}{D_1} \right)^{2+m} \dot{T}_2 - A(T_1 + T_2),$$

$$C = \left(\frac{D_2}{D_1} \right)^{2+m} \dot{T}_2 T_1 - \dot{T}_1 T_2 + AT_1 T_2.$$

A temperatura do gás é simplesmente obtida resolvendo a Equação (7). Nota-se nos coeficientes da Eq. (7) a independência da velocidade, naturalmente, e da constante c_3 .

O uso de dois termopares foi a primeira tentativa para se resolver o problema proposto, porém surgiram algumas dificuldades. A principal foi devido ao mal condicionamento da Equação (7), ou seja, qualquer erro mínimo no cálculo dos coeficientes A , B e C implicava num grande erro na solução T_g . Os coeficientes da Equação (7) envolvem derivadas das temperaturas dos termopares 1 e 2. O esquema utilizado para as derivadas de T_1 e T_2 foi o esquema de diferença central, um dos que ocasiona menos erros. No entanto, mesmo pequenos erros nas derivadas, e conseqüentemente nos coeficientes A , B e C , provoca grandes desvios na solução de T_g . Além disso a diferença de fase originada pela distância entre os termopares, a qual não foi considerada nas hipóteses anteriores, contribuiu muito para o surgimento de grandes erros na solução. Porém, se a diferença de fase fosse considerada, uma equação bem mais complexa seria obtida no lugar da Equação (7). Uma solução seria diminuir a distância entre os dois termopares mas isto pode não

ser muito conveniente.

Alguns autores utilizam dois termopares bem próximos para as medidas e com uma constante de tempo média. No entanto nesse procedimento deve-se verificar até que ponto uma medida feita por um termopar não influencia na medida feita pelo outro quando os dois estão muito próximos. Por outro lado se os termopares forem colocados muito distantes um do outro surgirá uma grande diferença de fase e conseqüentemente grandes erros ocorrerão na solução final.

O procedimento então a ser adotado consistirá na utilização de três termopares, descrito como a seguir:

- Primeiramente dois termopares serão usados como anteriormente mas, desta vez, o segundo termopar possuirá um diâmetro igual ao do primeiro. As medidas então "realizadas", em um certo intervalo de tempo, terão como objetivo apenas calcular as constantes a e b da Eq. (8), mostrada abaixo.
- A seguir o primeiro termopar (à montante do segundo) será substituído por um terceiro com o dobro do diâmetro e novas medidas de temperatura "serão realizadas" (de preferência em um mesmo intervalo de tempo do item anterior).
- Com as constantes a e b determinadas, e com as novas medidas do segundo termopar, a temperatura do primeiro será obtida como função da temperatura do segundo usando a Equação (8).
- A Equação (7) será calculada usando essa temperatura do primeiro, obtida do segundo, e a temperatura do terceiro (com o índice 2 nos coeficientes substituído por 3). Com isto elimina-se a diferença de fase que havia anteriormente, uma vez que o primeiro e terceiro termopares ocuparão a mesma posição no escoamento.
- As derivadas das temperaturas dos termopares T_1 e T_3 serão obtidas através do esquema de diferença central e assim os coeficientes A , B e C serão calculados e a temperatura do gás obtida.

Para obtenção da temperatura do primeiro termopar como função da temperatura do segundo será admitida a seguinte hipótese. Como os termopares 1 e 2 estão relativamente próximos é possível admitir um comportamento linear da mudança de temperatura entre os dois termopares. Desse modo, uma relação para a temperatura do primeiro termopar como função da do segundo é admitida para suas flutuações:

$$T_1' = aT_2' + b\dot{T}_2 \quad (8)$$

onde as constantes a e b são determinadas no intervalo de tempo considerado. Utilizando a técnica de mínimos quadrados chega-se às seguintes equações:

$$a \sum_i T_{2i}'^2 + b \sum_i T_{2i}' \dot{T}_{2i} - \sum_i T_{1i}' T_{2i}' \quad (9)$$

$$a \sum_i T_{2i}' \dot{T}_{2i} + b \sum_i \dot{T}_{2i}^2 - \sum_i T_{1i}' \dot{T}_{2i}$$

deste modo as constantes a e b são determinadas. As flutuações T_1 e T_2 nas equações acima são referentes às primeiras medidas (veja primeiro item do procedimento descrito acima). Para obter a temperatura do primeiro termopar deve-se somar a temperatura média, a qual é praticamente a mesma temperatura média do segundo termopar.

Medidas de Velocidade. O mesmo procedimento utilizado anteriormente para a temperatura pode ser utilizado para obter a equação da velocidade. Do mesmo modo, aplicando a Equação (6)

para dois termopares de diâmetros diferentes e admitindo que a velocidade na posição do primeiro termopar é aproximadamente igual a velocidade no segundo termopar ($v_1 \approx v_2$) e também a temperatura ($T_{g1} \approx T_{g2}$), chega-se a:

$$\alpha u^2 + \beta u + \gamma = 0, \quad (10)$$

sendo os coeficientes α , β e γ dados por

$$\alpha = (T_1 - T_2) \frac{c_3^2}{(D_1 D_2)^2 \pi},$$

$$\beta = (T_1 - T_2) \left(\frac{c_2 c_3}{D_1^2 D_2^2 \pi} + \frac{c_2 c_3}{D_1^2 \pi D_2^2} \right) + \frac{\dot{T}_1 c_3}{D_2^2 \pi} - \frac{\dot{T}_2 c_3}{D_1^2 \pi},$$

$$\gamma = (T_1 - T_2) \left(\frac{c_2}{D_1 D_2} \right)^2 + \frac{\dot{T}_1 c_2}{D_2^2} - \frac{\dot{T}_2 c_2}{D_1^2}.$$

A velocidade do gás é então obtida resolvendo a Equação (10) e calculando $v = u^{1/m}$. Os coeficientes acima, assim como os coeficientes da equação (7), são funções somente dos dados de temperatura dos termopares em cada instante e das constantes envolvidas.

RESULTADOS

Uma simulação do método anteriormente descrito foi feita admitindo a temperatura e a velocidade do gás conhecidas e variando de forma senoidal com o tempo. Com a velocidade a constante de tempo foi calculada utilizando uma relação para o número de Nusselt diferente daquela utilizada pelo método. Com isto a equação diferencial do termopar foi resolvida, usando o método de Range-Kutta, e a temperatura do termopar foi obtida. Desse modo foram determinadas as temperaturas para os três termopares considerados e estas soluções foram usadas como dados de entrada para o método.

Com as temperaturas dos termopares 1 e 2 as constantes a e b da Eq. (8) foram determinadas através do sistema de Equações (9) e, assim, a temperatura do primeiro foi calculada como função da temperatura do segundo conforme a Eq. (8). As derivadas das temperaturas foram determinadas pelo esquema de diferença central. As propriedades constantes do gás e do material do termopar são conhecidas a uma temperatura média do escoamento. Com isto os coeficientes A , B e C da Eq. (7) foram calculados e a Temperatura do gás obtida e comparada com aquela dada inicialmente.

Um resultado é mostrado na Fig. (1) onde se pode notar a diferença de fase e atenuação com relação a temperatura do gás em medidas feitas por termopares. Neste exemplo, a velocidade foi admitida como sendo $v = 1,0 + 0,7 \text{sen}(15,71t)$ e a temperatura do gás, com a mesma frequência e fase, é vista na figura. A distância entre o segundo e o terceiro termopar foi de 5mm e seus diâmetros foram de 1 e 2mm, respectivamente. Neste caso, os erros máximos no cálculo da temperatura do gás ocorreram justamente nos pontos extremos e foi da ordem de 11% com relação a flutuação. A diferença média foi menor que 1% na temperatura do gás.

Para verificar a flexibilidade do método as derivadas de $T(t)$ foram calculadas em intervalos de tempo maiores, ou seja, usando pontos mais distantes do conjunto de dados. Esse resultado é mostrado na Figura (2). Nessa figura as derivadas foram calculadas usando incrementos de tempo 5 vezes maior que o admitido para o conjunto de dados inicial. No caso mostrado o erro médio verificado foi da ordem de 6% e o máximo ocorreu justamente no primeiro ponto e foi aproximadamente de 30%, o qual pode ser simplesmente descartado. Porém para frequências muito altas esses erros

aumentaram bastante, mas com a implementação de filtros digitais no método esses erros podem ser reduzidos.

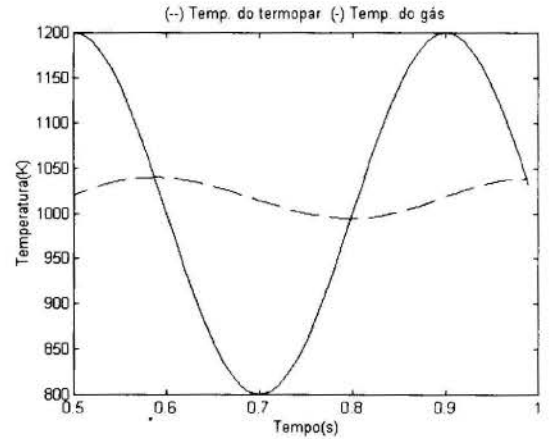


Fig. 1 - Atenuação e diferença de fase em medidas com termopares

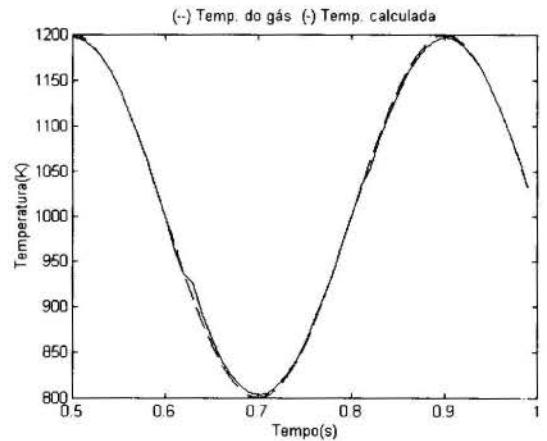
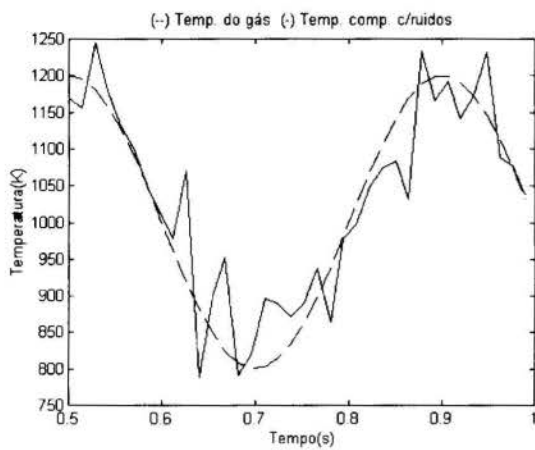


Fig. 2 - Temperatura compensada com erros nas derivadas de T

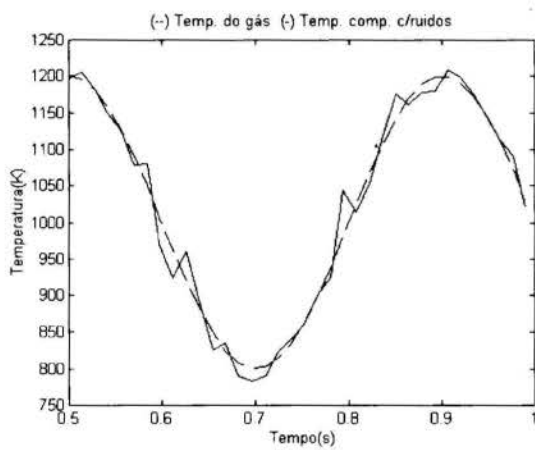
A fim de simular ruídos nos sinais dos termopares os dados de temperatura foram somados com números gerados aleatoriamente no intervalo de -5 a $+5$ K (isto corresponde a erros de até 25% na temperatura do termopar, dependendo do diâmetro) e o conjunto de dados resultante foi utilizado na compensação. Os resultados podem ser vistos na Tab. (1) e na Fig. (3). Nota-se que a medida que os diâmetros dos termopares são reduzidos os erros na solução diminuem bastante. Isto era esperado uma vez que quanto menor o diâmetro do termopar melhor será a resposta.

Tabela 1 - Influência da redução dos diâmetros

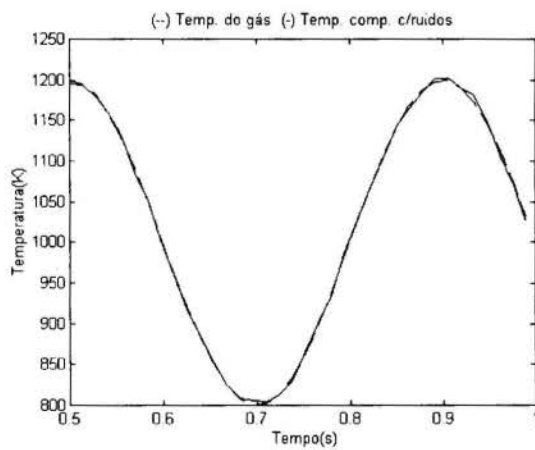
Diâmetros (mm)		Erros (%)	
D_1	D_3	max.	med.
0,50	1,00	111,0	48,8
0,20	0,40	48,5	10,1
0,10	0,20	29,0	03,6
0,08	0,15	12,7	04,4



(a)



(b)



(c)

Fig. 3 - Temperatura compensada com erros de ruídos: (a) $D_1=0,2\text{mm}$ e $D_3=0,4\text{mm}$, (b) $D_1=0,1\text{mm}$ e $D_3=0,2\text{mm}$, (c) $D_1=0,05\text{mm}$ e $D_3=0,1\text{mm}$.

Porém o objetivo é trabalhar com diâmetros não muito pequenos e para isto será necessário eliminar ao máximo os erros

provenientes de ruídos. Uma outra desvantagem do presente método é o seu desempenho com relação à frequências muito altas, mas isto é uma característica da grande maioria dos métodos de compensação. Com a implementação de filtragem digital para eliminar os erros de ruídos o método torna-se mais eficiente.

Nos resultados para a velocidade calculada pela Eq. (10) os erros máximos ocorreram em determinados pontos, equidistantes e afastados de meio período, como pode ser visto na Fig. (4). E, além disso, correspondem aos pontos onde ocorreram um maior erro no cálculo da temperatura.

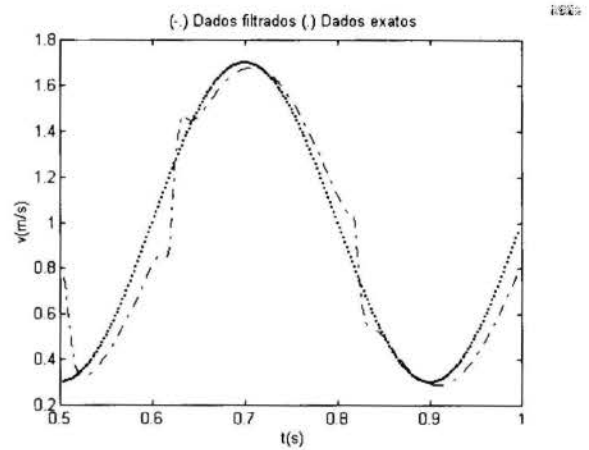


Fig. 4 - Velocidade calculada com filtragem digital

Uma outra observação é que esses pontos estão próximos (mas não coincidentes) dos pontos correspondentes à máximos e mínimos da temperatura do termopar. Nesses pontos, de acordo com a equação diferencial (2), a temperatura do gás é igual a temperatura do termopar e como a velocidade é proporcional a razão $T/(T_k - T)$, conforme a Eq. (6), seria esperado que os maiores erros na velocidade ocorressem justamente nesses pontos. A curva mostrada na Fig. (4) foi melhorada com uma filtragem digital. Os erros máximos com relação a flutuação da velocidade foram bastante reduzidos.

CONCLUSÃO

Os resultados para a velocidade ainda não estão muito satisfatórios. Utilizando filtros digitais mais adequados resultados, provavelmente, bem melhores podem ser obtidos. Além disso, como os erros máximos ocorreram em pontos correspondentes aos erros máximos na temperatura do gás, reduzindo esses erros na temperatura com um outro filtro, é possível obter resultados ainda melhores para a velocidade. Isto será implementado posteriormente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bradbury, L. J. S. and Castro, I. P., 1971, "A Pulsed Fire Technique for Velocity Measurements in Highly Turbulent Flows". *J. Fluid Mech.*, Vol. 39, pp. 657-691.
- Chandran, S.B.S. et al., 1985, "Time Resolved Thermometry by Simultaneous Thermocouple and Rayleigh Scattering Measurements in a Turbulent Flame", *Combustion Science and Technology*, Vol. 44, n. 1, pp. 47-60.
- Cox, G., 1977, "Gas Velocity Measurement in Fires by the Cross-Correlation of Random Thermal Fluctuations - A Comparison With Conventional Techniques", *Combustion and Flame*, Vol. 28, pp. 155-163.
- Gaster, M. and Bradbury, L. J. S., 1976, "The Measurement of

the Spectra of Highly Turbulent Flows by a Randomly Triggered Pulsed-Wire Anemometer", *J. Fluid Mech.*, Vol. 77, pp. 499-509.

Lederman, S. and Sacks, S., 1984, "Laser Diagnostic for Flowfields, Combustion, and MHD Applications", *AIAA Journal*, Vol. 22, n. 1, pp. 161-173.

Mesch, F., Daucher, H. H. and Fritsche, R., 1971, "Correlation Method of Velocity Measurements, Part I - Principles; Applications to Two-Phase Flow", *Messtechnik*, Vol. 79, No. 7, pp. 152-157.

Motevalli, V., Marks, C. H. and McCaffrey, B. J., "Cross-Correlation Velocimetry for Measurement of Velocity and Temperature Profiles in Low-Speed, Turbulent, Nonisothermal Flows", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 114, pp. 331-337.

Peterson, C.W., 1979, "A Survey of the Utilitarian Aspects of Advanced Flowfield Diagnostic Techniques", *AIAA Journal*, Vol. 17, n. 12, pp. 1352-1360.

Queiroz, M. and Yao, S.C., 1990, "Experimental Exploration of the Thermal Structure of an Array of Burning Droplet Streams", *Combustion and Flame*, Vol. 82, n. 3, pp. 346-360.

Reis, A.M., 1994, "Análise de Medidas de Temperatura em escoamentos Turbulentos", Dissertação de Mestrado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, Cachoeira Paulista, SP.

Son, S.F., Queiroz, M., and Wood, C.G., 1989, "Compensation of Thermocouples for Thermal Inertia Effects Using a Digital Deconvolution", *ASME National Heat Transfer Conference*, HTD-106; Philadelphia, 1989, pp. 423-429.

Yoshida, A., 1988, "Structure of Opposed Jet Premixed Flame and Transition of Turbulent Premixed Flame Structure", *Proceedings, International Symposium on Combustion*, 22., Seattle, WA, Aug. 14-19, Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 1988, pp. 1471-1478.

Yoshida, A., Kubozuka, S., and Nakamura, S., 1989, "Compensation of Thermocouple Signals by Digital FIR Filters for Temperature Measurement in Turbulent Premixed Flames", *Combustion Science and Technology*, Vol. 65, n. 4, pp. 317-331.

ABSTRACT

A new technique for measuring the instantaneous velocity and temperature in low frequency turbulent flows by using a thermocouple set has been developed. This technique make use of three thermocouples in which two accomplish the measurements simultaneously. The principle of this technique consists in comparing the differential equations of two thermocouples in order to compensate the effect of thermal lag. The new feature of this method is the use of simple algebraic equations to obtain instantaneous values of velocity and temperature, in which the time constant of the sensor is not necessarily constant. A theoretical simulation of this technique is present.



**CONSTRUCTION AND CALIBRATION OF A SYSTEM FOR MEASURING
LOW AIR FLOW VELOCITIES IN NATURAL CONVECTION
HEAT TRANSFER PROCESSES**



**Alan Carlos Bueno da Rocha
George Santos Marinho
Leônidas Hildebrandt Jr
Samuel Washington Celere**

Department of Mechanical Engineering - São Carlos Engineering School - USP
Av. Dr. Carlos Botelho, 1465 - 13560-550 - São Carlos - SP - Brazil

SUMMARY

A measurement system for low air flow velocities, based on constant current hot wire anemometer (CCA), was built and calibrated using ordinary laboratory facilities. The system is easy to be assembled, flexible and can be used for measurements of velocities of the order of 2cm/s, proper of natural convective processes.

INTRODUCTION

The selection of instrumentation for flow velocity measurements is an essential part of convective heat transfer research. The main features to consider the correct choice are: kind of fluid, conditions of flow, precision of measurement and cost. In the case of natural convection processes, high precision of measurement at low cost is hard to attain the last two criterions are hard to be put together.

Nowadays, in advanced research, convective flow velocity measurements can be done by means of sofisticatily systems, such as laser Doppler anemometry (LDA), whose order of precision may be down to $\pm 0.1\%$. With delicate assembly, limited flexibility and demanding highly skill technical supporting for operation (Mesquita, 1993), the LDA has as main disadvantage its high cost. Some of them can be as expensive as hundreds of thousands of dollars. Otherwise, a good combination between precision and cost can be reached by means of hot wire anemometry techniques (HWA). With broad use in research as well as in industry, the HWA is able to measure from very low to very high velocities, such as 0.005m/s (ASHRAE, 1993), and Mach 14 (Parobek et al, 1989), allowing applications to diversified situations, like: medical research (Alipour et. al., 1994), hypersonic aerodynamic (Stefson, 1988), (Logan, 1989), and (Wattmuff, 1995), combustion analysis (Nakanishi et. al., 1981), criogenic fluid flow (Castaing et al, 1993 and 1994), and automobilistic industry (Takahashi et. al., 1990).

Compared to LDA, the HWA has a relatively low cost - a good system may cost 20 to 30 % of a LDA. Unfortunately, due to limitations of resources in many Latin America Universities, such amount of money is still too high and the purchase of a HWA is not viable, raising difficulties to the researches in areas like thermal comfort. Moreover, many of the HWA in Latin America laboratories are imported.

The purpose of this work is to present an alternative technique that allows the development of a system for measuring low air flow velocities using ordinary laboratory facilities and, therefore, assist convection heat transfer research.

THE HOT WIRE ANEMOMETER

In natural convective phenomena, particularly those related to thermal comfort analysis, air flow velocities of the order of cm/s are very common. For this range, measurement instrumentation such as Pitot tubes or vane anemometers are not

recommended, and the HWA appears as an alternative. HWA is a technique for measuring very low flow velocities that provides high precision, simplicity and flexibility, at relatively low costs.

HWA was first investigate by L.V. King, in 1914. Its principle of work is based on convective heat transfer from a wire with low resistance, heated by Joule's effect when traversed by an electrical current, where the heat transfer rate is a function of air flow velocity, governed by King's law:

$$H = (A + B\sqrt{v_f})(T_w - T_f) \quad (1)$$

Considering the thermal heat power produced by Joule's effect,

$$H = R \cdot I^2 \quad (2)$$

and replacing Eq. (2) into Eq. (1), the flow velocity can be written in the form,

$$v_f = \{B^{-1}[R \cdot I^2 \cdot (T_w - T_f)^{-1} - A]\}^{1/2} \quad (3)$$

After King, other relations were suggest (Ower and Pankhurst, 1977),

$$I^2 R = A + Bv^{0.45} \quad (4)$$

Based on the principle exposed above, three kinds of HWA may be constructed: constant current (CCA), constant temperature (CTA), and constant voltage (CVA). This work deals with the constant current anemometer (CCA), and this was choosen due to its simplicity of construction.

In CCA, a constant current I passes across a wire with resistance R_w , which is exposed to an air flow whose velocity is unknown. When the air flows over, the heat transfer rate changes the wire resistance, causing a drift $\Delta \epsilon$ on circuit voltage. Consequently, applying air flows of known velocities over the wire, it is possible to establish an empirical relation between v_f and the resultant voltage ϵ .

The CCA technique have been intensively used on measurement of flow velocity fluctuations with different kinds of fluids (Stainback and Nagabushana, 1995). However, in the case of flow induced by convection, most of the scientific work done in Latin Armerica are made with imported HWA systems.

The high cost of a complet system and the dependence on replacement parts (probes have a short life), raises difficulties to researchers. Using commom laboratory facilities, like dc-power supply, A/D convorsor and a small computer, it is possible to construct, instead of buying, a CCA system.

CCA CONSTRUCTION

Figure 1 shows the CCA measurement system diagram.

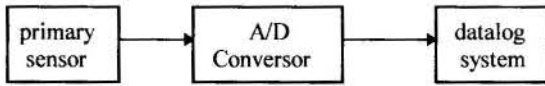


Figure 1 - CCA functional elements.

Primary Probe. According to (Ower and Pankhurst, 1977), (Perry, 1985), (Kawakita and Silvares, 1995), (Tse and Morse, 1989) and (ASHRAE, 1993), effects of heat conduction along the wire edges can be minimized if a ratio $l/d > 200$ (thickness to lenght of wire) is adopted. A single tungsten wire was used to make the CCA sensor. It was 27.50mm long and 0.11mm thick ($l/d = 250$), assembled inside a pvc tube 150.0mm long and 25.0mm internal diameter, whose entry face was shaped in an elliptical form to reduce boundary effects on the air flow.

The tungsten wire was chosen, instead of platinum, as advised by most of authors, due to its mechanical strength, ten times higher than that of platinum (Ower, 1977) and due to its lower cost.

The tungsten wire was cut, washed in solvent and handled with gloves to avoid adhesion of grease. It was mounted through two symmetric holes at the central section of the pvc tube, and fixed on it by means of micro-connectors. After connected to the power supply and signal transmission cables, the micro-connectors were covered with a dielectric and thermal isolating resine.

An ordinary potentiometer (0-10 Ω /5W-linear) was directly coupled to one of the edges of the wire and inserted in an isolated box to provide thermal stabilization. Figure 2 presents the assembled element of the measurement system, as it was suggested by (Prandtl and Tietjens, 1934), (Doebelin, 1966) (Ower and Pankhurst, 1977), (Tse and Morse, 1989) and (Pereira, 1995). Table 1 presents values of resistances for ACC circuit.

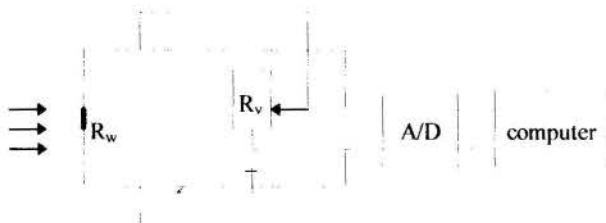


Figure 2 - ACC circuit.

Table 1 - ACC circuit resistances.

Element	Resistance (Ω)
sensor	0.76
potentiometer	2.96
signal transmission cable (4m)	1.98
power supply cable (5m)	5.68

Power Supply. A 0-30V, 0-3A, direct current, high stability power supply was used to provide power for the CCA. It works in an special way, called *cross-over condition for constant current/voltage*, that allows continuous transition between current and voltage in response to a change in the charge of the CCA circuit. The intersection of the two modes of operating is presented in figure 3 (manufacturer manual, 1995).

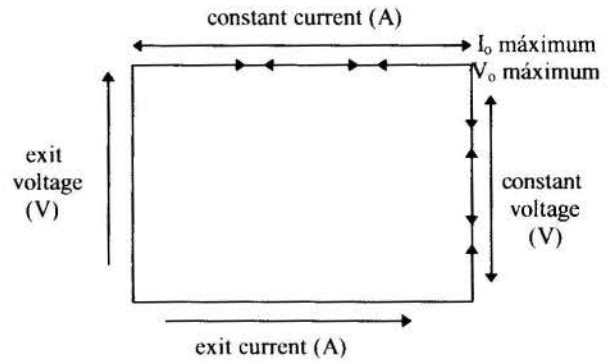


Figure 3 - Cross-over point condition.

Thus, when operating in *cc* mode, a constant current can be achieved, while voltage changes, until the circuit voltage reached the adjusted value.

Analog/Digital Convorsor. A good CCA system depends intrinsicy on an efficient A/D transduction of signal (ϵ) produced by the sensor. Then, to convert the analog voltage signal to digital, a 8-channels A/D convorsor was connected between the sensor and the computer. The remaining channels were used for thermo-couple signal transduction for recording ambient temperature.

Data Acquisition System. Processing signals from HWA by means of digital systems has exceptional advantages (Chew and Ha, 1988) comparing to analog systems (Glover, 1965). Thus, a PC computer was used, with an apropiated software, for processing and recording the signals from the A/D convorsor.

STABILITY TESTS OF CCA

As soon as the measurement system was built, two kinds of tests were performed to verify the CCA stability: sensor at isolated medium and opened to atmosphere.

Sensor Stabilidadade at Isolated Environment. Figure 4 presents the behavior of signals from the sensor as it was enclosed in a thermal isolated box, providing the value of ϵ_0 , against v_0 .

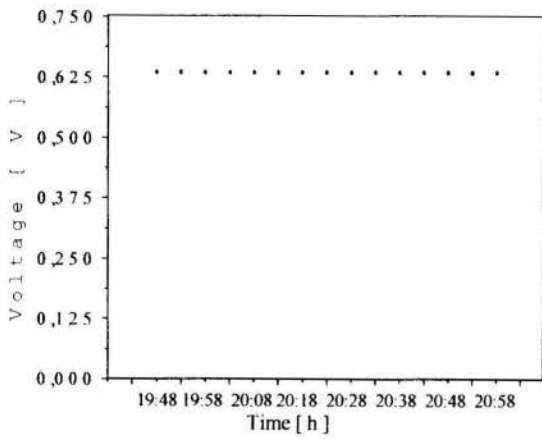


Figure 4 - Sensor response in a thermal isolated medium.

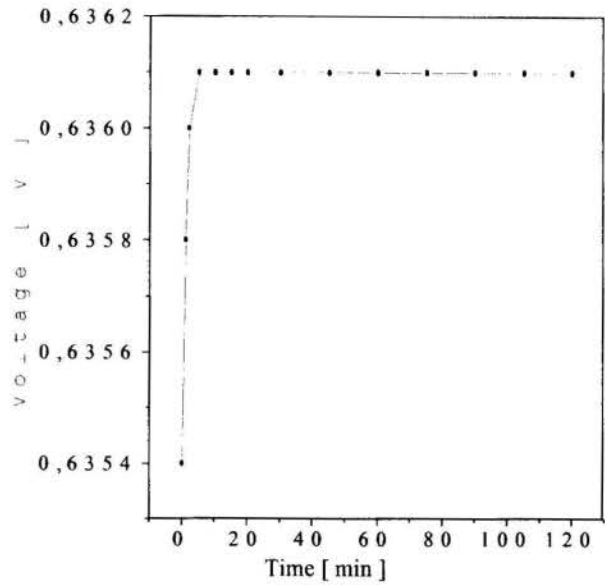


Figure 6 - Sensor response in an opened medium.

Sensor Stability at Opened Environment. To simulate the conditions where the system must operate, the sensor was assembled inside a vertical channel 1.0m high and 0.35m square cross section, with its upper side opened to the surroundings, and coupled to an air flow stabilization chamber at its base, as it can be seen on figure 5.

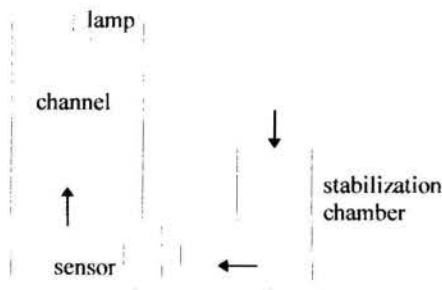


Figure 5 - Opened channel for CCA testing.

With the A/D converter and the computer in operation, current and voltage controls were adjusted at zero and the power supply was turned on. To achieve cross-over mode operating conditions, voltage control was fixed at maximum value and current was slowly risen from zero to 0.85A, observing the sensor signal behavior displayed by the computer. Current adjustment was made in such a way that the tungsten wire temperature was hot enough to detect very low air flows but still remaining below its limit of work, 250°C (Doebelin, 1966). Figure 6 presents the sensor signal behavior as a time function.

After establishing ϵ_0 at opened medium, which corresponded to v_0 , a disturbance was introduced in the thermal equilibrium by turning on a 60W incandescent lamp, fixed at the channel exit, 1.0m distant from the sensor. As the air into the channel was heated, a flow was formed between the stabilization chamber and the vertical channel, and went through the sensor. The aim of this test was to verify the applicability of the CCA system when submitted to real conditions of natural convective air flow development.

During the tests, care was taken to ensure that only the air flow was responsible for sensibilizing the CCA sensor (Perry, 1985) and (Pereira, 1995). To get this, air physical properties were monitored. Temperature (inside chamber and channel, wet and dry bulb) and room pressure were controlled. Figure 7 presents the sensor signal behavior at this test.

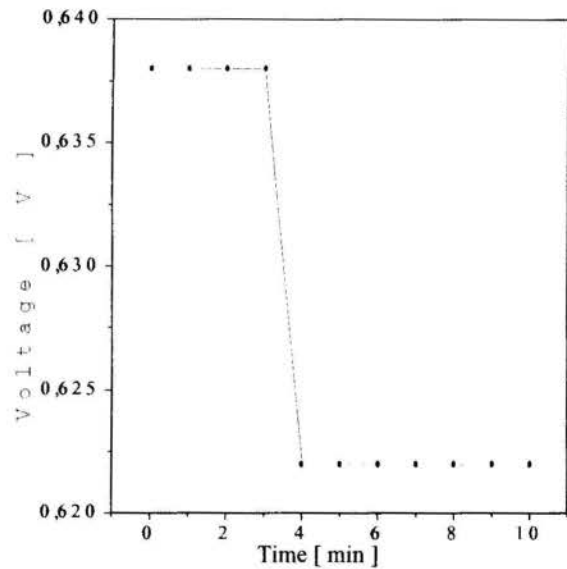


Figure 7 - Sensor response in a convective air flow test.

CALIBRATION

CCA calibration is one of the most important part of its design. However, at the same time, it is the best opportunity to identify mistakes. The evident condition to achieve precision is to calibrate the CCA for the same fluid that it is supposed to work with. The main mistake sources are: changes at fluid properties (specific mass, viscosity and temperature), bad position of the sensor, and changes in flow conditions. According to literature, the wind tunnel is the best way to calibrate HWA systems (Taira, 1989), (Blessmann, 1990), (Taira and Pereira, 1995) and (Hsieh et. al., 1995).

Closed wind tunnels are better when temperature control is a necessary condition. Tunnels with testing section area smaller than 0.6m allow a high quality flow (Taira, 1989). But, there are some more characteristics needed to use a wind tunnel in HWA calibration process: low turbulence, uniform velocity profile, and confined flow (Roma, 1972).

Following informations of (ASHRAE, 1993), CCA calibration tests were made into a miniature wind tunnel (0.25m square section), under confined flow conditions, adjustable fan velocity, uniform room temperature, and using a Pitot tube as a measurement standard (Taira, 1989), (Pereira, 1995) and (Mariani and Pimenta, 1995). A 0.01mm column of water sensibility micromanometer of the Betz type, ideal to very low air velocity, was used to detect the pressure difference at the Pitot. A smoke tracer system was used for measurements at the lower range of velocity.

Before starting calibration, the distribution of velocity at the wind tunnel testing section was analysed to determine its profile in the range of interest. To do so, the test section was divided into 16 cells, and velocity measured in each center of them, according to (Perry and Green, 1984) and (ASHRAE, 1993). Figures 8 and 9 present the results for the higher value of interest velocity.

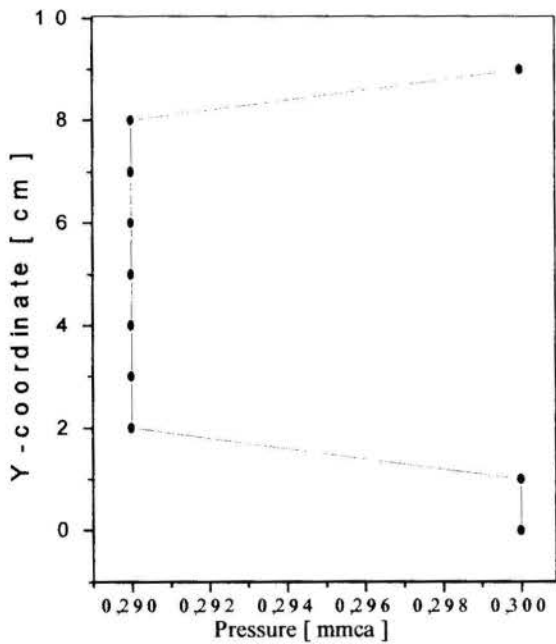


Figure 8 - Velocity profile at Y-coordinate wind tunnel test section for $v = 1.27$ m/s.

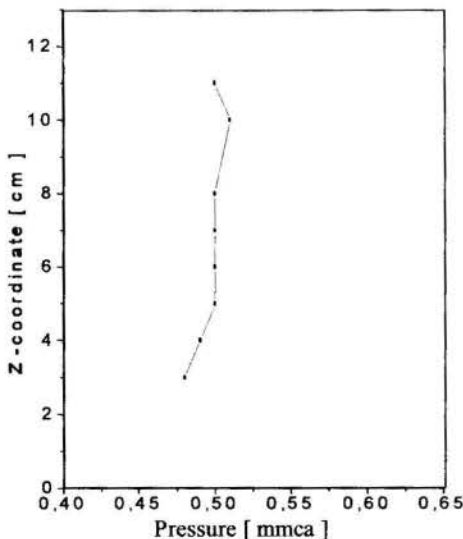


Figure 9 - Velocity profile at Z-coordinate wind tunnel test section for $v = 1.27$ m/s.

The sensor was assembled at the intersection point ($y=5$ and $z=6$, figures 8 and 9) of the curves determined by these tests, with the wire positioned perpendicular to the air flow (Vack, 1989). Copper-constantan type thermocouples were fixed at the test section and one of them, with measurement tip protected by dielectrical film, was fixed at the middle point of the tungsten wire. After that, the whole section was sealed and the calibration tests started. To transform pressure readings through Betz micromanometer (mm of water column) to velocities (m/s), the Bernoulli equation was used,

$$v_f = 4.42 \cdot (h_{\text{water}} / \rho_f)^{1/2} \quad (6)$$

Most of the air flow velocity measurements in engineering are made at situations where the air is at or near atmospheric pressure. Under such conditions, the air can be treated as an incompressible fluid and considered as a perfect gas. Thus, the values of its specific mass (ρ_f) may be determined at excellent approximation by (Roma, 1972), (ASHRAE, 1993),

$$\rho_f = (P_{\text{atm}} - 0.38 \cdot P_{\text{dynamic}}) \cdot (0.754 \cdot T_f)^{-1} \quad (7)$$

In spite of that, during the calibration tests, temperature (atmospheric, wet and dry bulb) and pressure were monitored (Mariani and Pimenta, 1995). Figure 10 presents the CCA system calibration curve.

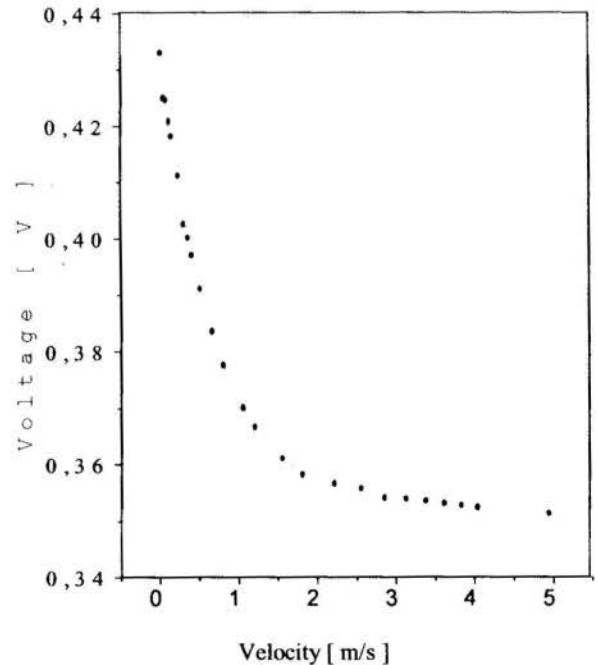


Figure 10 - ACC calibration curve.

Figure 11 presents the tungsten wire temperature variation as it was submitted to a 1.27m/s air flow with constant velocity.

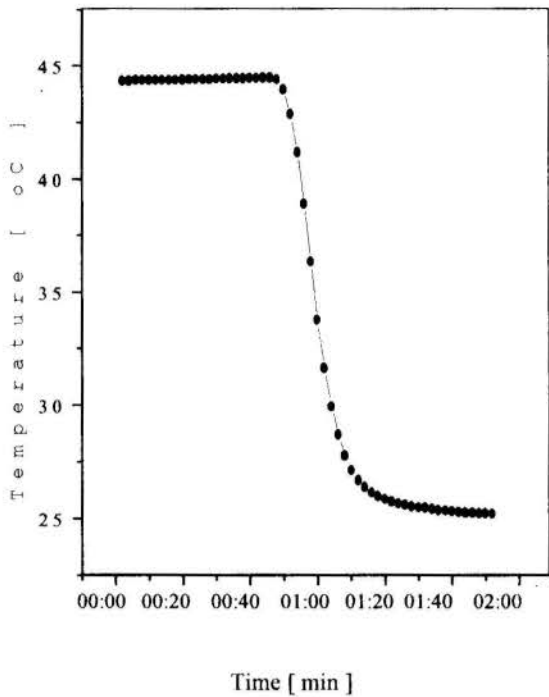


Figure 11- Temperature distribution in tungsten wire under a 1.27m/s air flow.

Figure 12 presents tungsten temperature distribution at inverse condition of the previous test.

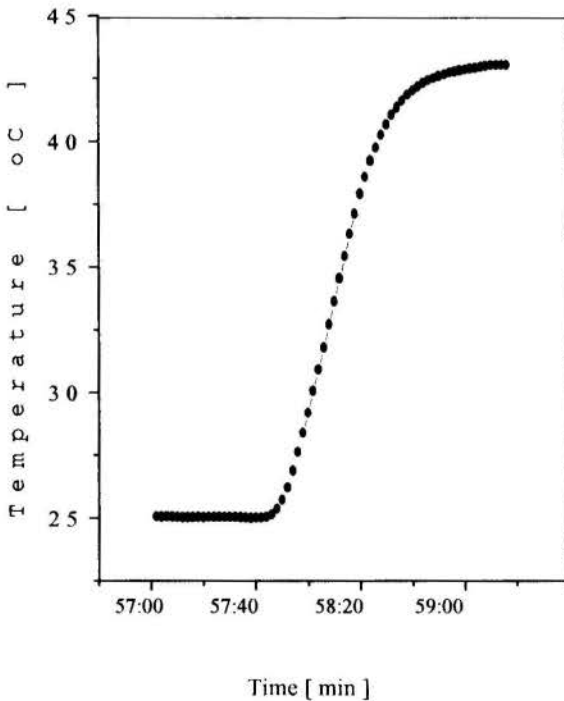


Figure 12- Temperature distribution in tungsten wire with air flow velocity changing from 1.27 to 0m/s.

RESULTS

The CCA system presented an exceptional stability, even when exposed to atmospheric conditions at laboratory room, figures 4 and 6. These results were verified during consecutive days of tests. When submitted to a convective air flow at the vertical channel, induced by a 60W lamp, the CCA presented a very high sensibility, figure 7.

The tungsten wire, with $l/d = 250$, improved the mechanical strength of the sensor, avoiding problems of breaking or burning as described by (Tse and Morse, 1989).

The calibration in a wind tunnel demanded a pre-calibration of the tunnel itself to establish the velocity distribution at the test section, and it was not an easy task, figures 8 and 9. The CCA calibration was made very careful, paying special attention to the thermal control of the test section of the wind tunnel. The results provided an exponential type smooth curve for velocities between 0.02 and 5m/s, figure 10. Using a software program for mathematical analysis, it was possible to achieve an empirical relation between the sensor response signal and the air flow velocity:

$$\varepsilon = 0.3527 + 0.07993 * E[-(v_f / 0.6952)] \quad (8)$$

A computer program was used to comparing the experimental results to the values obtained in Eq. (8), and estimate the uncertainty of measurements, (Kline, 1985). The deviations were of order of 1% to velocity range of 0.02 to 5m/s.

The sensor time constants, were calculate by the fundamental relation of heat transfer:

$$mCdT = UA(T_{amb} - T)dT \quad (9)$$

or, in differential form,

$$mC(UA)^{-1} dT/dt + T = T_{amb} \quad (10)$$

Using

$$mc(UA)^{-1} = \tau_t \quad (11)$$

Introducing Eq. (11) in Eq. (10), results

$$\tau_t dT/dt + T = T_{amb} \quad (12)$$

Solving Eq. (12), results (Marinho and Medeiros, 1991)

$$\tau_t = -t_1 / \ln \{ 1 - [(T_1 - T_0) / (T_{amb} - T_0)] \} \quad (13)$$

Thus, using Eq. (13), the sensor time constants during cooling and heating were 15 and 39.5s, respectively. These values are high but suitable for natural convection heat transfer measurements.

CONCLUSIONS

A constant current hot wire anemometry system, for measurement of very low air flow velocities was constructed using minimum laboratory resources. The CCA system was calibrated and tested at real natural convection conditions, presenting excellent results. The system is suitable for applications where velocities of an order down to 0,1m/s are to be measured.

The main technical advantage of this system is that its electrical power can be started even when there is no air flowing over the wire and work continuously for two weeks or more, when in a clean room, without burning of the wire.

The Operation of the CCA system was possible only due to the high stability of the power supply source and the digital signal processing possibilities. These are the minimum laboratory facility requirements.

ACKNOWLEDGMENTS

To

Dr. Woodrow N. L. Roma, SHS-EESC;
Dr. Antônio Moreira dos Santos, LAT-EESC
Dr. Fernando Catalano, LAE-EESC;

and the Technical staff of LAE and LAT, EESC.

REFERENCES

- Alipour, F., Patel, V. C., and Scherer, R. C., 1994, "Measurement of Pulsatile Flow in Excised Larynges with Hot-Wire Anemometry", ASME, Fluids Engineering Division, Vol. 202, pp.1-4.
- ASHRAE, Handbook of Fundamentals, 1993, pp.13.12-13.16.
- Blessmann, J. "Aerodinâmica das Construções", 1990, P. Alegre, Sagra, 2.ed., 263p.
- Casting, B., Chabaud, B., Hebral, B., and Peinke, J., "Hot-Wire Anemometer for Cryogenic Hydrodynamic Experiments", 1993, Applied Scientific Research, Vol. 51, n.1-2, pp. 143-148.
- Casting, B., Chabaud, B., Hebral, B., Naert, A., and Peinke, J., 1994, "Turbulence at Helium Temperature: Velocity Measurements", Physica B: Condensed Matter, Vol.194-196, pp.697-698.
- Chew, Y. T., and Ha, S. M., 1988, "Microcomputer Based Data Acquisition System for Hot-Wire Anemometry", Jour. of Microcomputer Applications, Vol 11, n. 3, pp. 195-209.
- Doebelin, E. O., 1966, "Measurement Systems: Application and Design", N. York, McGraw-Hill, pp. 448-465.
- Glover, J. R., 1965, "Techniques for Detecting and Analyzing Unsteady-Flow Variables", Technical Bulletin, Xerox Company, pp. 14-16.
- Hsieh, H. Y., Dempsey, M., Rothey, C., Thompson, M., and Zemel, J. N., 1995, "Principles of Pyroelectric Anemometry: A New Mass Flow Sensor", *Anais, II Simpósio Brasileiro de Medição de Vazão*, IPT-SP, pp. 209-217.
- Kawakita, K., and Silveira, O.M., 1995, "Estudo de Corpos de Perfil Não-Aerodinâmico Visando a Aplicação em Medidas de Vazão do Tipo Vórtice", 1995, Technical Bulletin, EP-USP, 8p.
- Kline, S. J., 1985, "The Purpose of Uncertainty Analysis", Journal of Fluids Engineering, Vol. 107, n.2, pp. 153-156, June.
- Logan, P., 1989, "Improved Method of Analyzing Hot-Wire Measurements in Hypersonic Turbulence", AIAA Journal, Vol.27, n.1, pp. 115-117.
- Mariani, A. L. C., and Pimenta, M. M., 1995, "Módulo Experimental para Ensaios de Medidores de Vazão: Implementação e Calibração", *Anais, II Simpósio Brasileiro de Medição de Vazão*, IPT-SP, pp. 343-352.
- Marinho, G. S., and Medeiros, B. L., 1991, "Curvas Características de Semicondutores Utilizados como Sensores de Temperatura", *Anais, Congresso de Engenharia Mecânica Norte-Nordeste*, UFRN, pp. 210-216.
- Mesquita, A. A., 1993, "Preparação e Controle de Experimentos Utilizando a Anemometria a Laser", *Revista Tecnológica*, UFPA, Vol. 6, pp. 19-24.
- Manufacturer Manual, MPC-3003D, 1995, Minipa Indústria Eletrônica Ltd., São Paulo-SP.
- Nakanishi, K., Kadota, T., and Hiroyasu, H., 1981, "Effect of Velocity and Temperature on the Soot Formation by Combustion of a Fuel Droplet", *Combustion and Flame*, n. 40, pp. 247-262.
- Ower, E., and Pankhurst, R. C., 1977, "The Measurement of Air Flow", Pergamon Press, Oxford, pp. 228-247.
- Parobek, D. M., Wagner, M. J., Baust, H. D., and Leugers, J. E., 1989, "Development and Extension of Diagnostic Techniques for Advancing High Speed Aerodynamic Research", *Proceedings, International Congress on Instrumentation in Aerospace Simulation Facilities*, IEEE, Piscataway, pp.332-342.
- Pereira, M. T., 1995, "A Cadeia Metrológica Brasileira de Medição de Vazão", *Anais, II Simpósio Brasileiro de Medição de Vazão*, IPT-SP, pp. 149-159.
- Perry, A. E., 1982, "Hot-Wire Anemometry", Clarendon Press, Oxford, 180p.
- Perry, R. H., and Green, D., 1984, "Chemical Engineers' Handbook", 6 ed.
- Prandtl, L., Tietjens, O. G., 1934, "Applied Hydro and Aeromechanics", Dover Pub., N. York, 306 p.
- Roma, W. N. L., 1972, "Determinação Simultânea dos Perfis de Velocidade e Temperatura, Utilizando a Técnica de Anemometria de Fio Quente", Ph.D. Thesis, Escola de Engenharia de São Carlos-USP, São Carlos, SP, 94p.
- Stainback, P. C., and Nagabushana, K. A., 1995, "Reinvestigation of Hot-Wire Anemometry Applicable to Subsonic Compressible Flows Using Fluctuation Diagrams", ASME, Jour. of Fluids Engineering, Vol. 117, pp. 263-269.
- Stefson, K. F., 1988, "On Non-Linear Aspects of Hypersonic Boundary-Layer Stability", AIAA, Vol. 26, n. 7, pp. 883-885.
- Taira, N. M., 1989, "Túnel de Vento para Aferição de Medidores de Velocidade", *Anais, I Simpósio Brasileiro de Medição de Vazão*, IPT-SP, pp. 143-154.
- Taira, N. M., and Pereira, M. T., 1995, "Construção de um Túnel de Vento para Aferição de Medidores de Velocidade", *Anais, II Simpósio Brasileiro de Medição de Vazão*, IPT-SP, pp. 323-331.
- Takahashi, S., Tsuruoka, S., Nishimura, Y., Arai, N., and Tokuda, H., 1990, "Hot-Wire Air Flow Meter for Engine Control Systems", SAE, Special Publications, n.805, pp. 1-5.
- Tse, F. S., and Morse, I. E., 1989, "Measurement and Instrumentation in Engineering", 1989, Marcel Dekker Inc., N.York, pp. 491-495.
- Vack, G. J., 1989, "How Are Signals from an X-Probe Thermal Anemometry System Interpreted to Give Velocity Magnitude and Direction?", St. Paul, USA, Flow Lines, pp.16-19.
- Watmuff, J. H., 1995, "An Investigation of the Constant Temperature Hot-Wire Anemometer", Elsevier, Experimental Thermal and Fluid Science, Vol. 2, pp. 117-134.



**VISUALIZAÇÃO EXPERIMENTAL DO ESCOAMENTO AO REDOR
DE CILINDROS DE BASE QUADRADA
POSICIONADOS TRANSVERSALMENTE AO FLUXO LIVRE**



**Sérgio Said Mansur, Edson Del Rio Vieira,
Massami Saito, George A. S. Esperança**

UNESP – Fac. de Eng. de Ilha Solteira – Depto. de Eng. Mecânica
15385-000 – Ilha Solteira – SP, Fax: (018) 762-2992, Fone: (018) 762-3113 R138

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo experimental do escoamento ao redor de cilindros de base quadrada posicionados transversalmente ao fluxo livre. Imagens geradas em um túnel hidrodinâmico são capturadas em película fotográfica, digitalizadas e adequadamente processadas, para permitir uma análise qualitativa do escoamento. Além disso, um procedimento experimental é proposto para a determinação do número de Strouhal característico do escoamento, a partir da interpretação de imagens colhidas em fita magnética. Os resultados assim obtidos são comparados com dados da literatura, apresentando boa concordância.

INTRODUÇÃO

Pela sua ampla aplicação em diversos ramos da engenharia, o escoamento ao redor de corpos não-aerodinâmicos tem sido objeto de inúmeros estudos de natureza teórica e experimental. Este tipo de escoamento produz, na maioria das vezes, descolamento da camada limite, ocasionando a formação de vórtices. Sob determinadas condições, estes vórtices são emitidos alternadamente de ambos os lados do corpo, dando origem à chamada esteira turbilhonária de Von Kármán. A frequência de emissão dos vórtices (n) relaciona-se com a velocidade média na seção transversal do escoamento (V) e com a dimensão característica do corpo sólido (D) através do número de Strouhal (Sr), definido pela relação:

$$Sr = \frac{n \cdot D}{V} \quad (1)$$

Dentro de uma larga faixa de velocidades, o número de Strouhal – que mantém estrita dependência com a forma geométrica do obstáculo, Kawakita e Silves (1993) – apresenta boa estabilidade, podendo ser considerado constante na maioria das aplicações práticas. Sobre este padrão de comportamento fenomenológico apoia-se o princípio de funcionamento dos medidores de vazão a efeito vórtice (*vortex flowmeters*), que pode ser assim resumido: Uma vez conhecido o número de Strouhal característico do escoamento em torno de uma dada geometria, a velocidade média do fluxo livre pode ser determinada com o auxílio da Equação (1), quantificando-se o número de turbilhões emitidos por unidade de tempo, provenientes de um mesmo lado do corpo.

A literatura apresenta diferentes métodos para a determinação experimental da frequência de emissão de turbilhões ao redor de corpos rombudos. Modi e Dikshit (1975) obtêm bons resultados empregando um transdutor de pressão bastante sensível, posicionado na linha de centro da esteira turbilhonária. Outros autores o fazem a partir da análise espectral da velocidade, ou de suas flutuações, coletada num ponto previamente estabelecido da esteira. Nestes casos, o sinal de velocidade pode ser obtido por diferentes técnicas, tais como: anemometria de fio quente – Van Atta (1968), Okajima (1982), Ota *et al.* (1987) e Kawakita e

Silves (1993) –, anemometria laser Doppler – Durão *et al.* (1988), Tokumaru e Dimotakis (1991), Durão *et al.* (1991) e Mansy *et al.* (1994) – ou, ainda, velocimetria por imagens de partículas – Agüi e Jiménez (1987). Sarpkaya (1977) e Sarpkaya e Kline (1982), por sua vez, estabelecem a frequência de emissão dos vórtices monitorando as flutuações da força de sustentação atuando sobre o corpo sólido, cujo caráter cíclico decorre do desprendimento dos vórtices alternados. Esta última técnica é aplicada nos medidores de vazão disponíveis comercialmente, instrumentados, via de regra, com transdutores piezoelétricos sensíveis a pequenas oscilações do obstáculo.

O presente trabalho propõe um estudo experimental do escoamento em torno de cilindros de base quadrada posicionados perpendicularmente ao fluxo livre, com vistas à sua eventual aplicação em medidores de vazão a efeito vórtice. Análises qualitativas e quantitativas do escoamento – incluindo a determinação do número de Strouhal – são realizadas, mediante o emprego exclusivo de técnicas de visualização em meio hidrodinâmico, associadas ao processamento de imagens.

INSTALAÇÃO E PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

A montagem experimental aqui utilizada compreende vários elementos, responsáveis pela geração, captura, digitalização e processamento das imagens oriundas dos escoamentos investigados. A discussão que se segue apresenta as principais características construtivas e operacionais desta instalação, fornecendo especificações e informações técnicas sobre a instrumentação empregada.

Aparato Experimental. Em inúmeras situações, os fenômenos associados ao movimento dos fluidos podem ser melhor observados na água do que no ar – Clayton e Massey (1967), Werlé (1973), Mordoff (1986). Existe uma grande variedade de dispositivos experimentais concebidos para a geração de escoamentos em meio líquido, dentre os quais inserem-se os chamados túneis hidrodinâmicos. Segundo Erickson (1981), tais dispositivos substituem com vantagens os túneis aerodinâmicos, particularmente no que concerne à visualização de escoamentos incompressíveis de baixa velocidade.

O sistema de geração de escoamentos utilizado no âmbito deste trabalho consiste de um túnel hidrodinâmico vertical, especialmente projetado e construído para a realização de ensaios de visualização – Figura 1. Confeccionado em material composto – fibra de vidro e resina de poliéster isoftálica – montado sobre estrutura de aço, este equipamento é capaz de operar em regime de descarga contínua ou intermitente (*blow-down*), sempre pela ação da gravidade.

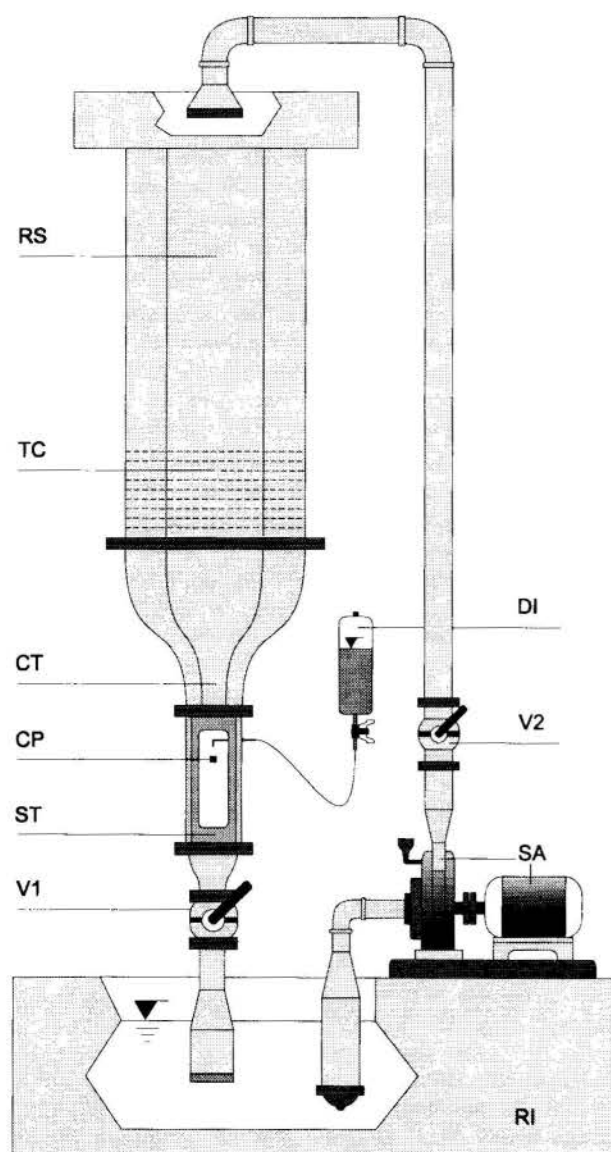


Figura 1 - Túnel hidrodinâmico vertical em circuito aberto, operado pela ação da gravidade.

No modo contínuo de funcionamento, as válvulas (*V1*) e (*V2*) são reguladas simultaneamente, de maneira que o nível de água do reservatório superior (*RS*) se mantenha constante. Nesta condição, a velocidade média na seção de testes (*ST*) permanece inalterada durante todo o tempo de realização dos ensaios.

A operação em modo intermitente (*blow-down*), por sua vez, é realizada fechando-se totalmente a válvula (*V1*), até que o nível do reservatório superior atinja seu ponto máximo. Neste instante, o sistema de acionamento do túnel (*SA*) é desligado, aguardando-

se o tempo necessário para que o fluido no interior do reservatório (*RS*) se tranqüilize. Somente então, com a abertura da válvula (*V1*), tem-se início o ensaio propriamente dito. Evidentemente, este modo de operação provoca uma diminuição contínua da velocidade média na seção de testes, em decorrência da redução do nível de água no interior do reservatório (*RS*). Esta circunstância apresenta-se como fator limitante para a realização de alguns tipos de ensaios, sobretudo aqueles de longa duração. Em contrapartida, este procedimento experimental gera um escoamento livre na seção de testes de qualidade significativamente melhor que em modo contínuo de operação.

Embora, neste trabalho, todos os ensaios tenham sido realizados em modo *blow-down*, é importante salientar que, mesmo em regime de descarga contínua, ensaios preliminares realizados com um anemômetro de fio quente, para velocidades do fluxo não perturbado compreendidas entre 0,05 e 0,20 m/s, comprovaram a excelente qualidade do escoamento na seção de testes, que alia boa uniformidade do perfil de velocidades e reduzida intensidade turbulenta – sempre inferior a 1,0%. Este baixo nível de turbulência, quando comparado com instalações similares operando na mesma faixa de velocidades, deve-se ao projeto acurado da contração (*CT*) e à presença de telas e colmeias (*TC*) no reservatório superior (*RS*), que atuam como manipuladores de turbulência.

A seção de ensaios, designada por (*ST*) na Figura 1, possui dimensões internas 146×146×500 mm e foi projetada de maneira a permitir a rápida substituição do modelo. Construída em alumínio aeronáutico, esta seção é dotada de janelas de observação intercambiáveis, confeccionadas em acrílico transparente de boa qualidade óptica, permitindo acesso visual ao escoamento através de qualquer uma de suas quatro faces.

Um único modelo (*CP*), usinado em liga de alumínio com excelente acabamento superficial, foi utilizado em todos os testes realizados. Com o objetivo de minimizar as influências das paredes do canal sobre a estrutura do escoamento, este modelo foi construído com seção transversal de 5×5 mm, produzindo uma razão de bloqueio inferior a 4%.

Dispositivo e Técnica de Visualização. A visualização de escoamentos sempre constituiu uma importante ferramenta para o estudo do movimento dos fluidos. Os métodos de visualização descritos na literatura são numerosos e englobam diferentes níveis de sofisticação. As publicações de Clayton e Massey (1967), Merzkirch (1974), Goldstein (1983) e Freymuth (1993) constituem excelentes revisões do assunto, apresentando diversas técnicas experimentais utilizáveis em meio hidrodinâmico. Dentre elas, a injeção de traçadores líquidos destaca-se como a mais intensamente empregada, devido à sua simplicidade e reconhecida eficácia. Apesar destas qualidades, sua implementação requer uma série de precauções e, sobretudo, uma boa dose de paciência.

Na Figura 1, o dispositivo de injeção (*DI*) é constituído de um reservatório pressurizado, ligado a uma longa agulha hipodérmica de 0,6 mm de diâmetro externo, dobrada em forma de L e instalada no interior da seção de ensaios com o orifício de saída a 45 mm acima do modelo (*CP*). A velocidade e a pressão de injeção são controladas por intermédio de uma válvula de agulha, para produzir um filete de corante nítido e estável, introduzindo o mínimo de perturbação possível sobre o escoamento.

A escolha do traçador adequado a um determinado tipo de ensaio constitui uma tarefa eminentemente empírica. Os corantes alimentícios, os produtos fluorescentes, os pigmentos de tintas e o leite *in natura*, incluem-se entre os principais fluidos utilizados

para esta finalidade. No presente trabalho, empregou-se uma solução aquosa de pigmentos de tinta PVA com grande poder de tingimento, à qual foi adicionada uma pequena quantidade de álcool etílico, para tornar a viscosidade da mistura mais próxima à da água.

Sistema de Captura e Processamento de Imagens. A correta iluminação do objeto constitui, sem dúvida alguma, o primeiro passo para a obtenção de uma imagem de boa qualidade. Além disso, deve existir perfeita sintonia entre os sistemas de iluminação e de captura utilizados, o que nem sempre pode ser conseguido facilmente. Com efeito, os foto-sensores eletrônicos ou as emulsões químicas foto-sensíveis são incapazes de registrar com fidelidade absoluta aquilo que é observado pela visão humana. Em vista disso, na maioria dos trabalhos experimentais envolvendo a visualização de fenômenos físicos, uma série de testes preliminares devem ser realizados, até que se obtenham imagens exploráveis cientificamente.

Em todos os ensaios realizados no contexto desta pesquisa, utilizou-se uma iluminação branca, refletida, difusa e em contraluz, proveniente de dois holofotes verticais, constituídos, cada um deles, de seis lâmpadas GE do tipo Photo-flo, totalizando 6000 W de potência. Este tipo de lâmpada mostrou-se absolutamente adequado para o tipo de trabalho realizado, produzindo uma iluminação com alta temperatura de cor, a um custo moderado.

As imagens geradas no túnel hidrodinâmico foram capturadas em película fotográfica ou em fita magnética, segundo o tipo de ensaio realizado.

No primeiro caso, registros estáticos ou congelados do escoamento foram efetuados com o auxílio de uma câmera Nikon, modelo F4s, do tipo SLR (*Single Lens Reflex*), equipada com objetiva de aproximação macro Nikkor 60 mm f/2.8 AF, utilizando película fotográfica Kodak Ektacolor Pro 160 GPX, 24x36 mm, que proporciona boa fidelidade de cores e tons de contraste adequados à reprodução por *scanners*. O tempo de exposição foi regulado em 1/60 s, com abertura focal f/5.6.

As cópias fotográficas foram produzidas em papel e posteriormente digitalizadas em um *scanner* do tipo *flat bed*, de 600 dpi ópticos. Em seguida, para a supressão de ruídos indesejáveis e a realização de pequenos retoques, estas imagens foram submetidas a um processamento digital, realizado por intermédio do *software* Corel Photo Paint 5.0. De acordo com a nomenclatura empregada por Economikos *et al.* (1990), este tipo de tratamento denomina-se processamento de baixo nível, em oposição ao processamento de alto nível, que envolve o reconhecimento e a manipulação de objetos gráficos, bem como a aquisição de dados quantitativos associados ao fenômeno estudado.

O procedimento experimental acima descrito permitiu identificar alguns dos regimes de escoamentos que ocorrem ao redor da geometria analisada.

Para a obtenção da frequência de emissão dos vórtices, necessária ao cálculo do número de Strouhal, desenvolveu-se um método baseado exclusivamente na interpretação de imagens dinâmicas do escoamento, previamente registradas em fita magnética. Em sua essência, o procedimento mostra-se relativamente simples, podendo ser executado de acordo com as seguintes etapas:

- Captação das imagens em fita magnética, à razão de F fotogramas por segundo, o que implica na aquisição de um fotograma a cada $1/F$ de segundo – o valor de F depende, naturalmente, da filmadora utilizada;
- Identificação e numeração dos fotogramas quadro a quadro;

- Contagem de um número (N) preestabelecido de turbilhões emitidos de um mesmo lado do corpo, a partir da visualização das imagens gravadas do escoamento, reproduzidas em *slow motion*;
- Anotação do número atribuído ao fotograma inicial (I_0) – primeiro turbilhão – e ao fotograma final (I_N) – último turbilhão da seqüência;
- Cálculo da frequência de emissão de turbilhões, através da equação:

$$n = \frac{N \cdot F}{[I_N - I_0]} \quad (2)$$

A identificação e numeração dos fotogramas poderia ser facilmente efetuada, mediante a utilização de uma filmadora munida de placa TC (*Time Code*). De fato, os equipamentos que dispõem de leitor e gravador de TC geram, antes do registro da imagem em fita, um código magnético paralelo, que permite a identificação precisa de cada um dos fotogramas, dispensando o uso de qualquer dispositivo adicional de controle.

Neste trabalho, entretanto, as imagens foram capturadas por intermédio de uma câmera Panasonic, modelo NV-MS1PX, formato SVHS / NTSC, com um único CCD (*Charge-Coupled Devices / Solid State Discrete-Array Sensors*) de 1/2 polegada, equipada de uma objetiva 8-80 mm f/1.4 com função macro, desprovida de placa TC. Em vista disso, antes de seu registro em fita magnética, as imagens obtidas foram primariamente processadas em um controlador de fotogramas, posicionado entre a filmadora e o vídeo gravador, conforme mostra a Figura 2.

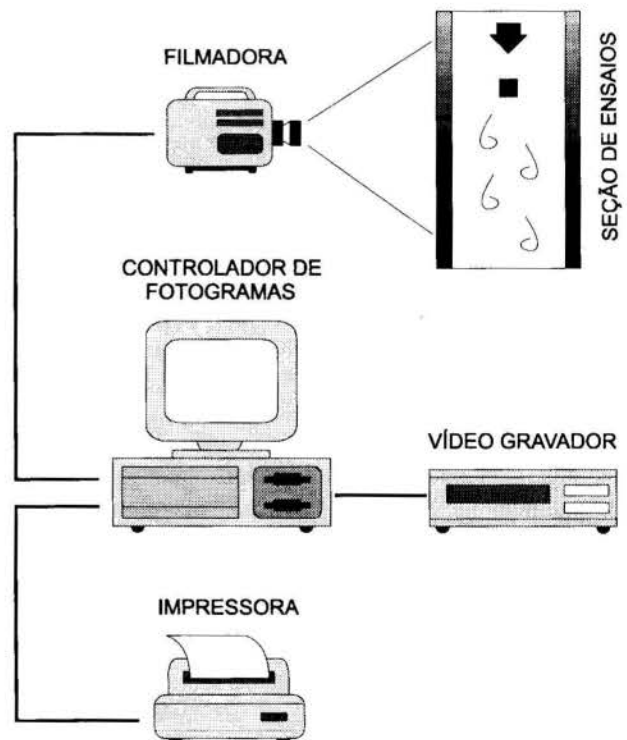


Figura 2 - Sistema de captura e tratamento de imagens animadas de escoamentos.

O controlador de fotogramas acima mencionado, trata-se, na verdade, de um micro computador CBM, modelo A-500, com

processador Motorola MC 68000 e placa digitalizadora DigiView Gold 4.0, de fabricação New Tek Co. Através deste sistema, os diversos fotogramas que compõem a imagem animada de um dado ensaio podem ser precisamente identificados e numerados eletronicamente, tornando-se passíveis de serem digitalizados quadro a quadro, em até 737×482 pixel e 8 bits de cores, ou seja, 256 tons de cinza.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 3 apresenta, através de um conjunto de imagens estáticas colhidas em película fotográfica, a estrutura da esteira produzida pelo cilindro de base quadrada, para valores do número de Reynolds – baseado no lado da seção quadrada (L) e na velocidade de aproximação do escoamento livre (V) – compreendidos entre 3 e 220.

Na Figura 3(a), observa-se que o filete de corante líquido utilizado como traçador, ao incidir contra a superfície frontal do modelo divide-se em dois, contornando o corpo sólido sem descolamento expressivo. Neste caso, verifica-se um feixe de emissão independente do tempo, com simetrias longitudinal e transversal quase perfeitas, caracterizando um regime de escoamento onde os efeitos viscosos assumem substancial importância.

A Figura 3(b) mostra que, ao contrário do verificado no regime anterior, os efeitos de inércia se fazem presentes de maneira mais significativa. Como resultado, o feixe de corante torna-se incapaz de acompanhar os contornos do obstáculo, notadamente em sua face posterior. A região da esteira caracteriza-se, neste caso, pela presença de dois filamentos independentes e bem definidos, que se fundem apenas a uma distância considerável do cilindro. A esteira turbilhonária pode ser dividida em duas regiões bastante distintas. Na primeira delas, localizada imediatamente após o corpo sólido – cerca de duas a três dimensões características – o escoamento apresenta uma boa simetria longitudinal. Nesta região, entre os dois filamentos de corante verificou-se, durante a realização dos ensaios, a existência de duas bolhas de recirculação estáveis, mas de difícil registro fotográfico. Na zona mais afastada do modelo ocorre uma degradação contínua da simetria originalmente observada. A estabilidade do filete é comprometida, surgindo ondulações cujas amplitudes aumentam no sentido do escoamento.

Como era de se esperar, estas instabilidades amplificam-se substancialmente com o aumento do número de Reynolds, originando a formação da estrada de vórtices de Von Kármán – Figura 3(c). Imediatamente atrás do modelo, pode-se distinguir uma região de recirculação com forte assimetria longitudinal.

A Figura 3(d), por sua vez, mostra uma esteira turbilhonária melhor definida, mas ainda em desenvolvimento. A exemplo do caso anterior, identifica-se claramente a presença de duas regiões distintas: Na primeira delas, localizada nas proximidades do obstáculo, ocorre a formação e o desprendimento dos vórtices. Na segunda região, observa-se o transporte destes vórtices através da esteira. O artigo de Modi e Dikshit (1975) relata, ainda, a existência de uma terceira região, no interior da qual os vórtices se dissipam e perdem sua identidade, gerando um campo de escoamento turbulento. No caso do presente estudo, esta região encontra-se fora da janela de observação, motivo pelo qual o fenômeno não pôde ser visualizado.

Por último, a Figura 3(e) mostra uma esteira já plenamente desenvolvida, onde o centro de cada estrutura turbilhonária pode ser facilmente identificado.

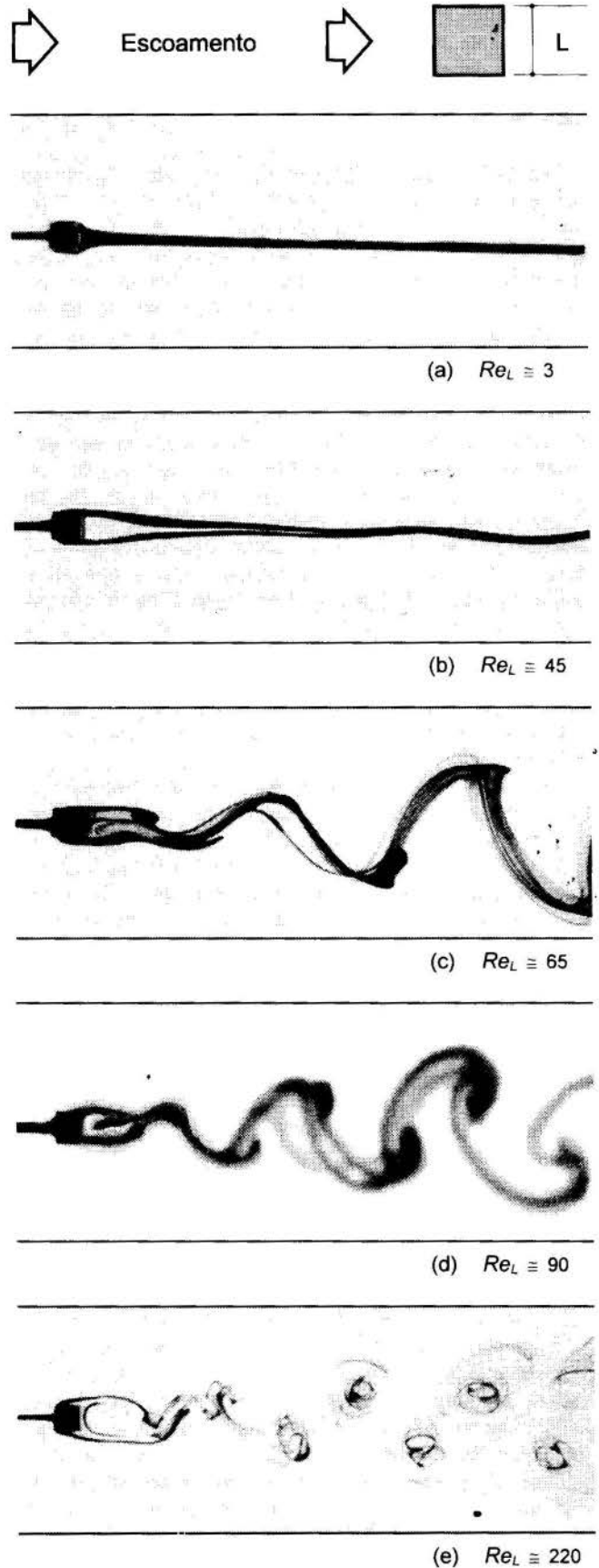


Figura 3 - Estrutura do escoamento ao redor de um cilindro de base quadrada posicionado transversalmente ao fluxo livre. Visualização em meio hidrodinâmico efetuada através da injeção de corantes líquidos.

Uma comparação entre o conjunto de imagens da Figura 3 com aquelas apresentadas por Coutanceau e Defaye (1991) e Gersten (1983) para cilindros circulares, permite verificar que as configurações dos escoamentos ao redor de ambos os tipos de obstáculo guardam entre si enorme semelhança. Por outro lado, a presença das arestas que caracterizam os cilindros de base quadrada favorece o descolamento da camada limite, antecipando a formação dos vórtices em regimes mais brandos que aqueles verificados no caso dos cilindros circulares.

Os ensaios para a determinação do número de Strouhal, por sua vez, foram realizados na faixa de Reynolds compreendida entre 75 e 1230.

A Figura 4 estabelece uma comparação entre os resultados do presente trabalho com os dados experimentais de Okajima (1982), obtidos por anemometria de fio quente. Na faixa de Reynolds onde os ensaios se sobrepõem, observa-se uma boa concordância dos resultados, comprovando as potencialidades do método de contagem de fotogramas para a determinação do número de Strouhal.

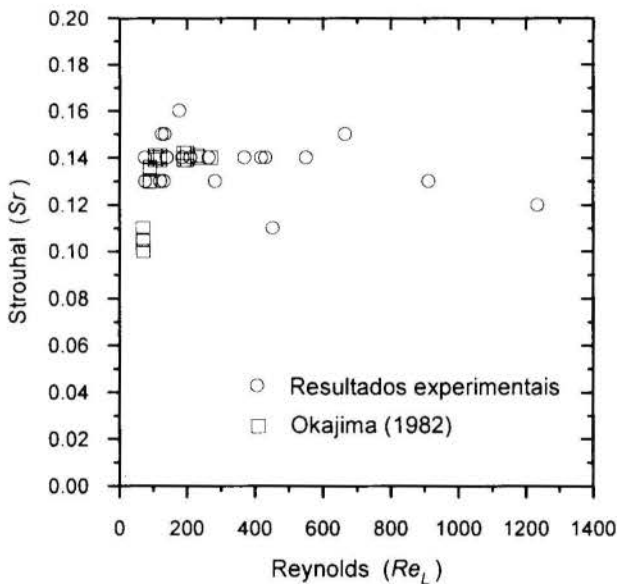


Figura 4 - Evolução do número de Strouhal em função do regime de escoamento: comparação dos resultados experimentais obtidos do presente trabalho com os disponíveis na literatura.

Uma estimativa preliminar dos erros envolvidos neste procedimento acusam uma incerteza máxima da ordem de 3% na determinação das frequências de emissão de vórtices. Este valor pode ser reduzido substancialmente às custas de pequenas adaptações no sistema, já em estudo.

Finalmente, é interessante assinalar que, embora as tecnologias atualmente disponíveis para a captura e o processamento automático de imagens dificultem a implementação do método proposto a nível industrial, sua utilização em laboratório pode ser de grande interesse, sobretudo na aferição ou validação de outras metodologias.

CONCLUSÃO

A concepção de medidores de vazão eficientes pressupõe a utilização de obstáculos que, além de introduzirem uma perda de

carga moderada no escoamento, assegurem uma boa estabilidade do número de Strouhal, numa ampla faixa de operação. A forma geométrica do corpo sólido constitui, pois, aspecto de fundamental importância na concepção de medidores de vazão eficientes.

A visualização de escoamentos insere-se neste contexto como um instrumento extremamente poderoso para a análise experimental qualitativa e quantitativa de escoamentos, podendo contribuir significativamente na definição de geometrias adequadas a este tipo de aplicação.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi desenvolvido com recursos financeiros provenientes da FAPESP (Proc. 95/6833-4) e da FUNDUNESP (Proc. 271/94-DFP/F/CET).

REFERÊNCIAS

- Agüi, J.C. e Jiménez, J., 1987, "On the Performance of Particle Tracking", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.185, pp.447-468.
- Clayton, B.R. e Massey, B.S., 1967, "Flow Visualization in Water: A Review of Techniques", *Journal of Science and Instrumentation*, Vol.44, pp.2-11.
- Countanceau, M e Defaye, J.R., 1991 "A Circular Cylinder Wake Configurations: A Flow Visualization Survey", *Applied Mechanics Review*, Vol.44, pp.255-305.
- Durão, D.F.G., Heitor, M.V. e Pereira, J.C.F., 1988, "Measurements of Turbulent and Periodic Flows Around a Square Cross-Section Cylinder", *Experiments in Fluids*, Vol.6, pp.298-304.
- Durão, D.F.G., Gouveia, P.S.T. e Pereira, J.C.F., 1991, "Velocity Characteristics of the Flow Around a Square Cross Section Cylinder Placed Near a Channel Wall", *Experiments in Fluids*, Vol.11, pp.341-350.
- Economikos, L. et al., 1990, "Toward Full-Field Measurements of Instantaneous Visualizations of Coherent Structures in Turbulent Shear Flows", *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol.3, pp.74-86.
- Erickson, G.E., 1981, "Vortex Flow Correlation", *Air Force Wright Aeronautical Laboratory, Report: AFWAL-TR-80-3143*.
- Freythuth, P., 1993, "Flow Visualization in Fluid Mechanics", *Revue Science Instruments*, Vol.64, pp.1-18.
- Gersten, K., 1983 "Immersed Bodies", *Heat Exchanger Design Handbook*, Vol.2, Single Phase Fluid Flow, pp.223.1-223.9, Hemisphere Publishing Co.
- Goldstein, R.J.(ed.), 1983, "Fluid Mechanics Measurements", Hemisphere Publishing Co., New York.
- Kawakita, K. e Silveira, O.M., 1993, "Estudo de Corpos de Perfil Não-Aerodinâmico Visando a Aplicação em Medidores de Vazão do Tipo Vórtice", *Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, pp.901-904, Brasília.
- Mansy, H., Yang, P.M. e Williams, D.R. 1994, "Quantitative Measurements of Three-Dimensional Structures in the Wake of a Circular Cylinders", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.270, pp.277-297.
- Merzkirch, W., 1974, "Flow Visualization", Academic Press Inc., New York.

Modi, V.J. e Dikshit, A.K., 1975, "Near-Wakes of Elliptic Cylinders in Subcritical Flow", *AIAA Journal*, Vol.13, n.4, pp.490-497.

Mordoff, K.F., 1986, "NASA Water Tunnel Aids Flow Dynamics Research", *Aviation Week & Space Technology*, Vol.124, n.14, pp.130-131.

Okajima, A., 1982, "Strouhal Numbers of Rectangular Cylinders", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.123, pp.379-398.

Ota, T., Nishiyama, H. e Taoka, Y., 1987, "Flow Around an Elliptic Cylinder in the Critical Reynolds Number Regime", *Trans. of the ASME: Journal of Fluids Engineering*, Vol.109, pp.149-155.

Sarpkaya, T., 1977, "In-line and Transverse Forces on Cylinders in Oscillatory Flow at High Reynolds Numbers", *Journal of Ship Research*, Vol.21, pp.200-216.

Sarpkaya, T. e Kline, H.K., 1982, "Impulsively-Started Flow About Four Types of Bluff Body", *Trans. of the ASME: Journal of Fluids Engineering*, Vol.104, pp.207-213.

Tokumar, P.T. e Dimotakis, P.E., 1991, "Rotary Oscillation Control of a Cylinder Wake", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.224, pp.77-90.

Van Atta, C.W., 1968, "Experiments on Vortex Shedding from Yawed Circular Cylinders", *AIAA Journal*, vol.6, pp.931-933.

Werlé, H., 1973, "Hydrodynamic Flow Visualization", *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol.5, pp.361-382.

ABSTRACT

Experimental investigation has been performed on the incompressible flow around a square cylinder. Images generated by flow visualization in a water tunnel are captured in photographic film, digitalized and processed for qualitative flow analysis. An experimental procedure for determination of the Strouhal number based in the interpretation of images recorded in magnetic tapes is also proposed. Results are in agreement with data available in the literature.



CONSTRUÇÃO E CALIBRAÇÃO DE DOIS MODELOS DE TUBO DE PITOT DE 5 FUROS PARA APLICAÇÃO EM CÂMARAS DE COMBUSTÃO



Waldir A. Bizzo

André L. Cardoso

Leonardo Goldstein Jr.

Faculdade de Engenharia Mecânica

Universidade Estadual de Campinas

13083-970 - Campinas - SP - Brasil

RESUMO

Dois sondas de Pitot de 5 furos para a determinação da direção e velocidade de gases em câmaras de combustão, de formatos hemisférico e cônico, refrigeradas a água, foram construídas e calibradas utilizando três métodos diferentes de correlação de dados a partir de dois sistemas de referências. A sonda hemisférica apresentou maior dificuldade de fabricação e a correlação de dados, de fácil utilização, dependeu fortemente da qualidade de fabricação. A sonda cônica apresentou maior facilidade de construção e as correlações obtidas também são de utilização simples, através de gráficos ou computador.

INTRODUÇÃO

A medição da velocidade e direção do escoamento de gases em câmaras de combustão é uma necessidade básica para o entendimento dos fenômenos físicos e químicos que ocorrem no interior de câmaras de combustão e queimadores. As condições no ambiente de medição, tais como alta temperatura e atmosfera reativa, impõem dificuldades na execução de medições. Medidas de velocidade e direção com tubos de Pitot de 5 furos, refrigerados com água, constituem uma opção em investigações de câmaras de combustão. Mesmo se tratando de um dispositivo intrusivo, a utilização de sondas de Pitot tem proporcionado resultados que não diferem muito dos obtidos com a utilização de métodos não invasivos, tal como a Anemometria a Laser (Beltagui et al., 1993).

Tubos de Pitot de 5 furos são sondas que possuem em sua extremidade 5 tomadas de pressão, as quais, através de relacionamento conveniente de suas leituras permite determinar a direção e o módulo da velocidade dos fluidos no escoamento. O formato clássico da sonda, para aplicação em câmaras de combustão é a sonda de cabeça hemisférica, com refrigeração forçada por circulação de água. Esta sonda foi derivada da sonda de cabeça esferoidal, cujo desenvolvimento teórico e método de calibração foi descrito por Lee e Ash (1956), para determinação do escoamento no interior de rotores de máquinas rotativas. Chedaille e Braud (1972), descrevem as sondas para aplicação específica em câmaras de combustão e que foram utilizadas nas pesquisas realizadas no IFRF - International Flame Research Foundation.

Treaster e Yocum (1979), entre outros, descrevem a fabricação e o método de calibração de dois outros tipos de sondas: uma de formato prismático e outra composta por um feixe de 5 tubos cujas extremidades são cortadas por um ângulo de 45° em relação ao seu eixo. Ambas as sondas têm por finalidade a obtenção dos campos de velocidade em máquinas rotativas e não dispõem de refrigeração. Devido às geometrias externas de cada sonda, hemisférica, prismática ou angular, os métodos de calibração adequados para cada uma delas são diferentes.

Neste trabalho foram construídas e calibradas duas sondas diferentes para aplicação em câmaras de combustão (Fig. 1): uma sonda de formato hemisférico e uma sonda de formato cônico, ambas com refrigeração forçada por circulação de água. A sonda de formato cônico é uma derivação do modelo

apresentado por Treaster e Yocum (1979), com modificações para permitir a refrigeração à água.

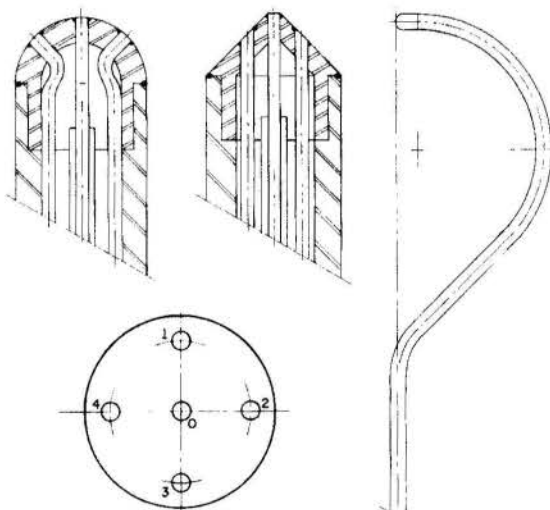


Figura 1 - Tubo de Pitot de 5 furos, de formato hemisférico e cônico.

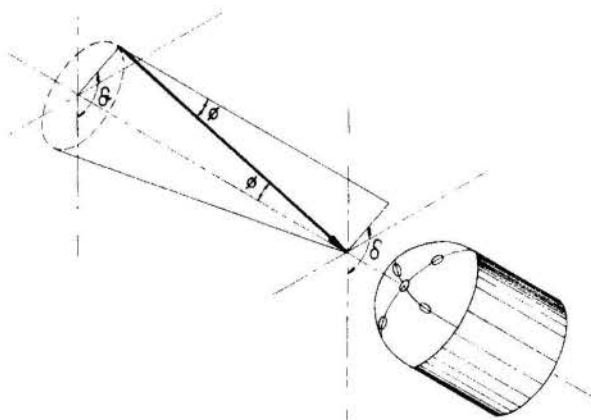


Figura 2 - Sistema de referência com ângulo cônico e ângulo diédrico.

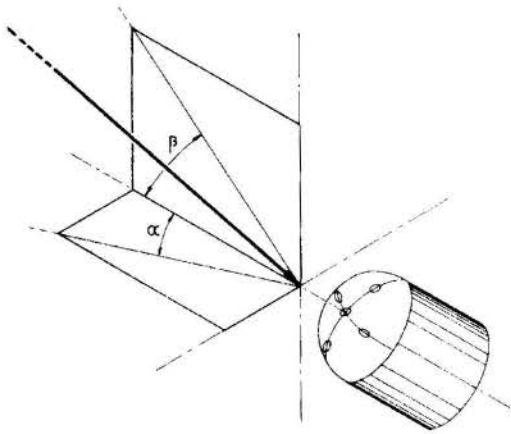


Figura 3 - Sistema de referência com ângulos horizontal e vertical.

Dois sistemas de referência são comumente utilizados para determinação da direção da velocidade. No primeiro sistema o par de ângulos de referência são o ângulo cônico ϕ e o ângulo diédrico δ , conforme Fig. 2. O segundo sistema é expresso em função dos ângulos horizontal α e vertical β , (em inglês, "yaw" e "pitch"), que são os ângulos das projeções do vetor velocidade nos planos horizontal e vertical com o eixo da sonda, conforme a Fig. 3. A sonda hemisférica pode utilizar os dois sistemas de referência, enquanto na sonda cônica somente é possível a utilização do par de ângulos horizontal e vertical. Neste trabalho, a sonda hemisférica foi calibrada utilizando os dois sistemas de referência.

CALIBRAÇÃO DA SONDA HEMISFÉRICA

Calibração com o sistema de referência ϕ e δ . Com a aplicação da teoria do escoamento potencial numa esfera, como mostrado por Lee e Ash (1956), é possível calcular a distribuição de pressões sobre a sonda, em que a pressão p_n em um orifício genérico n , situado na superfície da sonda é dado por:

$$p_n = p_s + \frac{1}{2} \rho V^2 \left[1 - \left(\frac{V_n}{V} \right)^2 \right] \quad (1)$$

onde p_s é a pressão estática do escoamento longe da esfera, ρ é a densidade do fluido, V é a velocidade do escoamento longe da esfera e V_n é a velocidade do escoamento no orifício n .

Definindo o fator de recuperação de pressão k_n por:

$$k_n = \left[1 - \left(\frac{V_n}{V} \right)^2 \right] \quad (2)$$

a equação anterior pode ser escrita como:

$$p_n = p_s + k_n \frac{1}{2} \rho V^2 \quad (3)$$

O fator k_n é função do número de Reynolds e do ângulo constituído entre o vetor velocidade e o orifício n da sonda. Chedaille e Braud (1972) relatam que, no intervalo onde a maioria das medições normalmente são feitas, para Reynolds entre 100 e 60000, foi verificado experimentalmente que o fator

de recuperação de pressão varia muito pouco com o número de Reynolds; entretanto, na vizinhança do ponto de separação da camada limite e após este, k_n não obedece à teoria do escoamento potencial e seu valor precisa ser obtido através de calibração da sonda para cada posição em relação ao vetor velocidade. A rugosidade superficial e fatores construtivos também desviam o comportamento do escoamento em relação ao previsto para o escoamento sobre uma esfera perfeita e sua influência requer, em adição, a necessidade de uma calibração experimental.

A calibração da sonda é feita orientando-se a mesma em diferentes posições em relação a um escoamento de velocidade e direção conhecidas, como o que pode ser obtido em um jato livre. Neste trabalho, foram utilizados dois métodos de interpretação dos dados: o método proposto por Lee e Ash (1956) e o método utilizado pelo IFRF - International Flame Research Foundation, descrito por Wright (1970).

Método de Lee e Ash. Combinando as equações que fornecem a pressão em cada um dos cinco orifícios, as seguintes relações podem ser obtidas:

$$\frac{p_1 - p_3}{p_0 - p_3} = \frac{k_1 - k_3}{k_0 - k_3} = X_{133}(\phi, \delta) \quad (4)$$

$$\frac{p_2 - p_4}{p_0 - p_3} = \frac{k_2 - k_4}{k_0 - k_2} = Y_{243}(\phi, \delta) \quad (5)$$

onde k_n é o fator de recuperação de pressão do orifício n , e X_{133} e Y_{243} são parâmetros de calibração em função dos ângulos ϕ e δ .

A determinação da magnitude da velocidade é feita aplicando a equação geral da distribuição de pressão entre o centro da sonda (orifício 0) e qualquer um dos outros quatro orifícios, como, por exemplo o orifício 3:

$$V = \sqrt{\frac{2}{\rho} \frac{p_0 - p_3}{k_0 - k_3}} \quad (6)$$

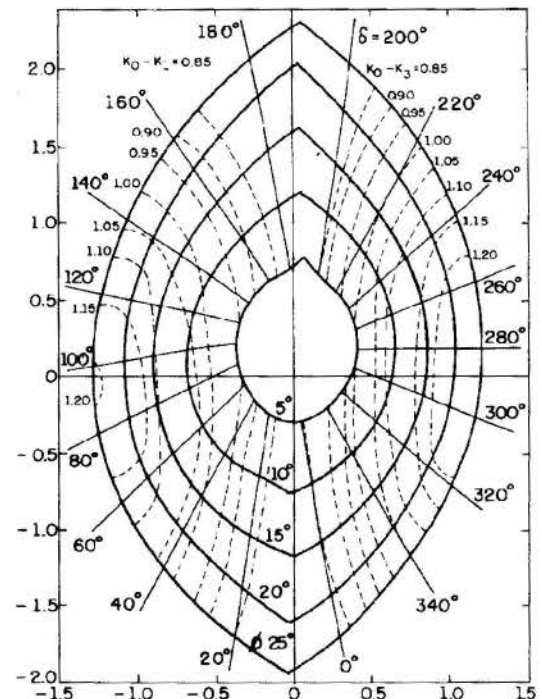


Figura 4 - Gráfico típico de calibração para sonda de formato hemisférico (Trigo et al., 1989).

Para a sonda em questão, a aplicação destas equações gera um gráfico com curvas de calibração conforme a Fig. 4.

A utilização deste método no levantamento do campo de velocidades em um escoamento real é laboriosa e sujeita a erros de interpretação e de leitura do gráfico. A automação para utilização em computador, por outro lado, também não é fácil, haja vista a necessidade de interpolação gráfica e a dificuldade de ajustar as curvas de ângulo ϕ constante a uma (ou mais) equação matemática.

Método do IFRF. A fim de simplificar a forma de apresentação e utilização dos dados de calibração, pesquisadores da IFRF utilizaram três fatores de calibração:

$$k_\phi = \sqrt{1 - \frac{\sum_1^4 (p_0 - p_n)}{2\sqrt{\sum_1^4 (p_0 - p_n)^2}}} \quad (7)$$

sendo um fator do ângulo ϕ .

$$k_v = \frac{\rho V^2}{\sqrt{\sum_1^4 (p_0 - p_i)^2}} \quad (8)$$

é um fator de velocidade e

$$k_p = 2 \frac{(p_0 - p_s)}{\rho V^2} \quad (9)$$

um fator de pressão estática.

A determinação do ângulo δ é feita a partir da relação teórica:

$$\tan \delta = \frac{(p_3 - p_1)}{(p_2 - p_4)} \quad (10)$$

A função tangente permite obtenção de ângulos entre 0 e 90°, sendo que, para determinação do quadrante do ângulo δ medido, deve ser feita uma verificação conveniente de quatro desigualdades, conforme descrito em Wright, 1970.

A análise matemática dos fatores acima, aplicada à teoria do escoamento potencial numa esfera, mostra que k_ϕ é função dos ângulos ϕ e δ , porém, é uma função fraca de δ , de maneira que a influência do ângulo δ na variação do fator k_ϕ pode ser negligenciada (Wright, 1970). O fator k_v é função também dos ângulos ϕ e δ , sendo que, para calibração de ϕ de 0 a 45°, a influência do ângulo δ no valor de k_v também pode ser desprezada, apresentando uma variação de cerca de 2%.

Maior importância tem o comportamento da sonda na determinação do ângulo diédrico δ . Se os dados obtidos para a sonda não apresentar uma correlação conveniente com a Eq. (10), o método em questão não pode ser utilizado. A correlação é mais facilmente obtida conforme a superfície da sonda se aproxima da forma geométrica de uma esfera perfeita.

O método de calibração utilizando o outro sistema de referência, ângulos horizontal e vertical, será apresentado com a descrição da calibração da sonda de formato cônico.

CALIBRAÇÃO DA SONDA CÔNICA:

Ao contrário da sonda de formato hemisférico, expressões analíticas desenvolvidas a partir da teoria do escoamento potencial aplicadas a sonda de formato cônico não são obtidas. A geometria cônica, com mudanças abruptas de contorno, que ocasionam descolamentos do escoamento e maior sensibilidade a efeitos de viscosidade, dificulta um modelamento teórico, que

poderia ser utilizado para formatar o equacionamento de calibração da sonda. Deste modo, a calibração da sonda para representar a velocidade e direção do escoamento medido é feita a partir de 4 coeficientes adimensionais empíricos, descritos em Treaster e Yocum (1979). Os coeficientes são definidos conforme:

$$Cp_\alpha = \frac{(p_4 - p_2)}{(p_0 - \bar{P})} \quad (11)$$

$$Cp_\beta = \frac{(p_3 - p_1)}{(p_0 - \bar{P})} \quad (12)$$

$$Cp_{total} = \frac{(p_0 - P_{estática})}{(p_0 - \bar{P})} \quad (13)$$

$$Cp_{estática} = \frac{(\bar{P} - P_{estática})}{(p_0 - \bar{P})} \quad (14)$$

$$\bar{P} = (p_1 + p_2 + p_3 + p_4) / 4 \quad (15)$$

Cp_α e Cp_β são os coeficientes que representam as diferenças de pressão nos planos horizontal α e vertical β , Cp_{total} é o coeficiente de pressão total e $Cp_{estática}$ é o coeficiente de pressão estática.

Devido à normalização das diferenças de pressão com o valor médio das quatro pressões estáticas medidas, estes coeficientes são independentes da velocidade e dependem apenas da direção do escoamento numa faixa limitada de ângulos. O procedimento de calibração é similar ao adotado para a sonda hemisférica, ou seja: num escoamento com direção e velocidade conhecida, posiciona-se a sonda em diversos pares de ângulos α e β , e mede-se a pressão em cada orifício.

DESCRIÇÃO DO DISPOSITIVO E DO PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Um esquema da montagem para calibração é mostrado na Fig. 5. Um jato livre de ar é obtido pelo escoamento através de um duto. Uma calibração prévia do jato é feita relacionando-se a vazão de ar passando pelo duto com a velocidade do jato livre medida através de um tubo de Pitot convencional, em diversos pontos na extremidade do duto, determinando-se uma região onde a velocidade do jato é constante e função apenas da vazão no duto. Para que a direção do escoamento seja conhecida a medição é feita na extremidade de saída do duto onde é sabido que a direção do escoamento é paralela ao eixo axial. A sonda é posicionada em relação ao jato de ar, variando-se convenientemente os pares de ângulos ϕ e δ ou α e β conforme o sistema de referência utilizado. Dois dispositivos de posicionamento foram utilizados: para o sistema de referência ϕ e δ o dispositivo foi especialmente construído para esta finalidade, e para o sistema de referência α e β foi utilizado uma morsa esférica convencional, normalmente usada como dispositivo de usinagem. Como o dispositivo especial para os ângulos ϕ e δ tinha limitação até 25° no ângulo ϕ , foi estabelecido uma relação matemática de equivalência entre os dois sistemas, permitindo a abrangência de ϕ até 45° com a utilização da morsa esférica. Em cada posição escolhida era medido as diferenças de pressão entre o orifício central (nº 0) e

os outros quatro orifícios e o orifício central e a pressão atmosférica. Na calibração com o sistema de referência de ângulo cônico e diédrico, o ângulo ϕ foi variado a cada 5° e o ângulo δ a cada 20° . Com o sistema de referência de ângulos horizontal e vertical, α e β foram variados a cada 10° .

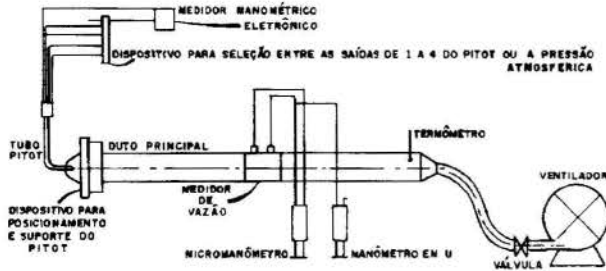


Figura 5 - Esquema da bancada de calibração.

APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os resultados da calibração da sonda hemisférica para determinação da direção da velocidade, segundo o método de Lee e Ash, são apresentados na Fig. 6. Não está apresentado neste gráfico as curvas de determinação dos coeficientes de velocidade k_0-k_3 . A obtenção de curvas de k_0-k_3 constantes requer uma interpolação gráfica, pois os dados experimentais obtidos da medição planejada dos ângulos ϕ e δ não resultam em valores constantes do coeficiente k_0-k_3 .

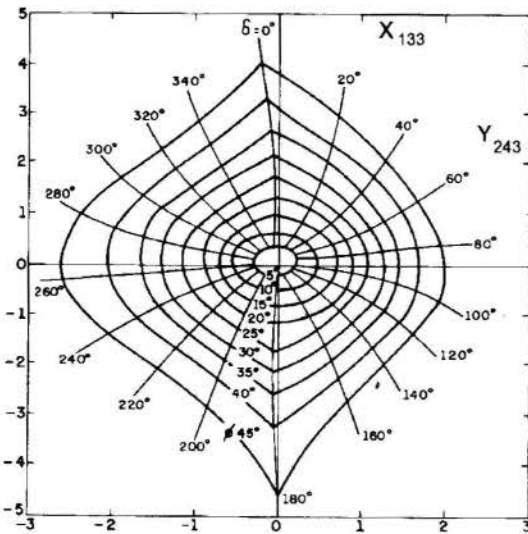


Figura 6 - Gráfico de calibração para a sonda hemisférica, segundo o método de Lee e Ash.

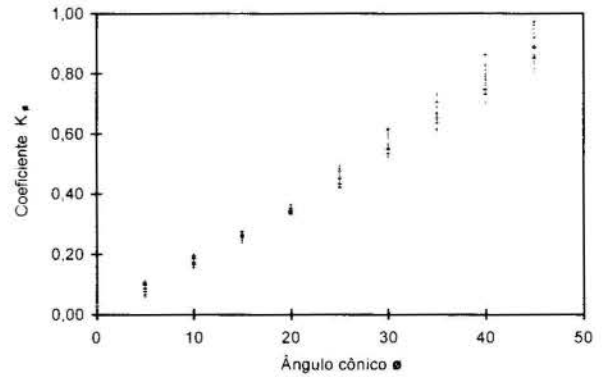


Figura 7 - Coeficiente k_ϕ em função do ângulo cônico ϕ , para a sonda hemisférica.

As figuras 7 e 8 apresentam as curvas de calibração obtidas, segundo o método descrito em Wright (1970), para o coeficiente k_ϕ em função do ângulo ϕ e da correlação experimental entre o ângulo δ medido e o ângulo δ fornecido a partir da Eq. (10), para todos os pares de ângulos ϕ e δ utilizados. Observa-se que, para a sonda em questão, foi obtida correlação razoável de dados, possibilitando a utilização prática deste método de calibração. A Fig. 9 apresenta o comportamento do coeficiente de velocidade K_v , para cada ângulo δ medido. A dispersão do coeficiente K_v aumenta muito com o ângulo ϕ e não apresenta um comportamento muito homogêneo em relação ao ângulo δ . Mesmo assim, dentro de uma variação aproximada de 7%, é possível a utilização deste coeficiente para determinação da grandeza da velocidade, conhecido o ângulo ϕ .

A Fig. 10 apresenta os valores obtidos para os coeficientes Cp_α e Cp_β para a sonda hemisférica no intervalo de -30 a $+30^\circ$ dos ângulos α e β . A aplicação deste método também apresenta boa correlação, diminuindo a precisão quando os ângulos de aproximam dos limites de -30 e $+30^\circ$. As Fig. 11 e Fig. 12 apresentam as curvas dos coeficientes de pressão total e estática em função dos ângulos α e β .

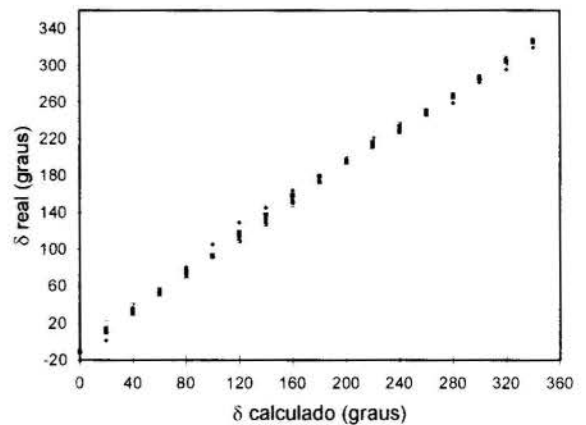


Figura 8 - Correlação experimental entre o ângulo δ real e o ângulo δ determinado pela relação teórica.

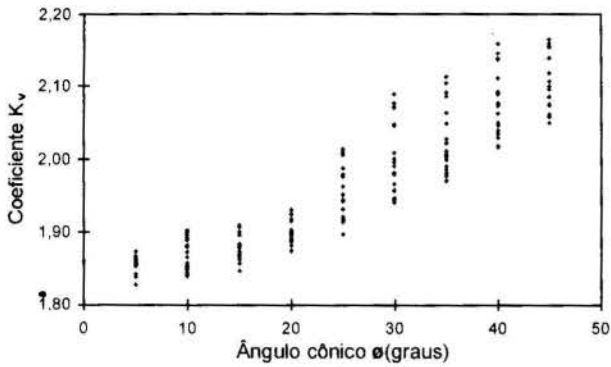


Figura 9 - Correlação experimental do coeficiente de velocidade K_v , para a sonda hemisférica.

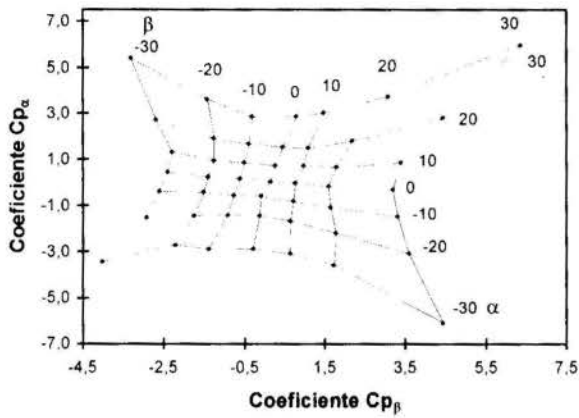


Figura 10 - Gráfico de correlação dos coeficientes Cp_α e Cp_β para determinação dos ângulos α e β , para a sonda hemisférica.

A Fig. 13, apresenta os resultados da calibração da sonda cônica, no intervalo de -20 a $+20^\circ$. Embora tenham sido feitas medições até o intervalo de -40 a $+40^\circ$ para esta sonda, os resultados obtidos acima de 20° apresentaram grande dispersão de valores, impossibilitando a utilização da sonda em ângulos maiores do que 20° . As Fig. 14 e Fig. 15 apresentam as curvas de calibração para os coeficientes de pressão total e pressão estática para a sonda cônica.

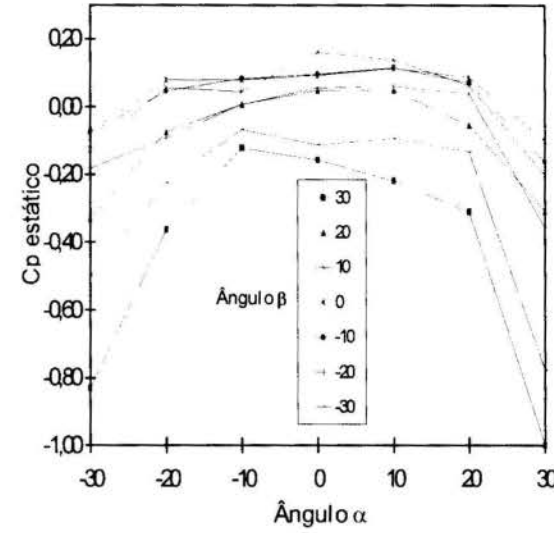


Figura 12 - Coeficientes de pressão estática para a sonda hemisférica.

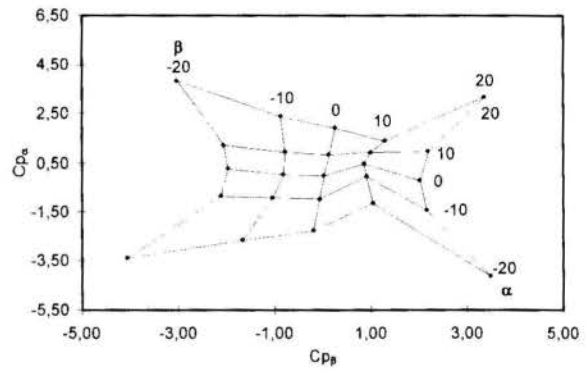


Figura 13 - Correlação dos coeficientes de pressão em relação aos ângulos α e β para a sonda cônica.

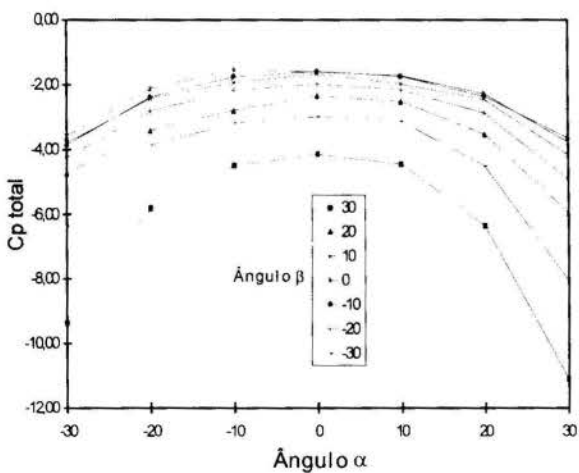


Figura 11 - Coeficientes de pressão total para a sonda hemisférica.

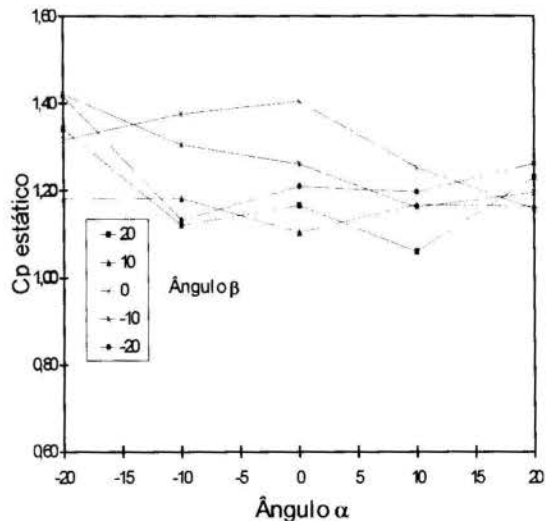


Figura 14 - Coeficientes de pressão estática para a sonda cônica.

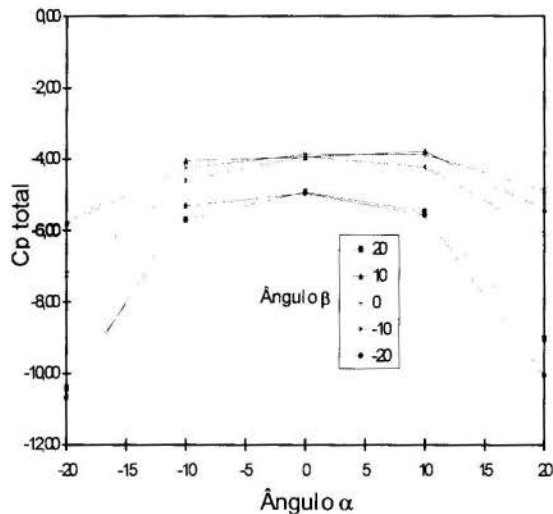


Figura 15 - Correlação para os coeficientes de pressão total, para a sonda cônica.

CONCLUSÃO

Os resultados obtidos para ambas as sondas e métodos de calibração permitem delimitar a utilização destes para medição da direção e da grandeza da velocidade de escoamentos em câmaras de combustão.

A sonda hemisférica apresenta boa correlação de dados experimentais segundo qualquer método de calibração, permitindo a escolha adequada conforme a aplicação desejada. O método de Lee e Ash é apropriado para utilização manual dos gráficos obtidos, embora seja de difícil compilação dos dados, principalmente para determinação do coeficiente de velocidade. O método empregado pela IFRF, e apresentado por Wright, é de fácil utilização e compilação dos dados, e é favorável a aplicação através de rotinas de computador, e mesmo em simples planilhas de cálculo, já que é possível obter equações simples de correlação de dados. Este método, porém, é sensível à qualidade da fabricação da sonda, no que se refere ao formato esférico e a rugosidade superficial, já que o sucesso da calibração depende da boa correlação de dados com a Eq. (10). Duas das sondas fabricadas foram descartadas pois não apresentaram boa correlação através desta equação.

A calibração da sonda hemisférica pelo sistema de referência dos ângulos horizontal e vertical também permite boa correlação de dados, com a vantagem de necessitar uma quantidade menor de medições para a calibração do que usando a referência ϕ e δ . Este sistema tem a desvantagem de necessitar das curvas de calibração de pressão estática para determinação da velocidade do escoamento, ao contrário dos métodos de Lee e Ash e do IFRF. Nos limites de medições executadas os dois sistemas de referências angulares apresentam praticamente a mesma abrangência espacial.

A sonda cônica também se mostrou possível de utilização para medições de direção e velocidade de escoamento, porém com uma abrangência espacial menor do que a sonda hemisférica. Esta necessita de um número menor de medições para calibração, porém para determinação da velocidade do escoamento é necessário uma calibração adicional, correspondente ao coeficiente de pressão estática. Na interpretação de dados em câmaras de combustão, através de rotinas de computador, a sonda cônica acoplado ao sistema de referência de ângulos horizontal e vertical necessita de um número maior de ajustes de curvas e interpolação do que a sonda

hemisférica e o método da IFRF. Do ponto de vista de fabricação, a sonda cônica é de mais simples construção do que a sonda hemisférica.

Entre as sondas, métodos de calibração e sistemas testados, a sonda hemisférica apresenta-se, no conjunto, como a melhor opção, desde que os cuidados de fabricação sejam suficientes. O sistema de referência de ângulos cônico e diédrico, com o método de interpretação de dados utilizado pela IFRF, apesar de necessitar um número maior de pontos de calibração, proporciona maior facilidade para medição dos escoamentos em câmaras de combustão, já que a direção e a grandeza da velocidade pode ser obtida a partir de 3 correlações matemáticas, propícias à automação em programa de computador ou planilha de cálculo.

REFERÊNCIAS

- Beltagui, S. A., Kenbar, A. M. A. e Maccallum, N. R. L., 1993, "Comparison of Measured Isothermal and Combusting Confined Swirling Flows: Peripheral Fuel Injection", *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 6, pp. 147-156.
- Chedaille, J. e Braud, Y., 1972, "Measurements in Flames", Edward Arnold (Pub.), London.
- Lee, J.C. e Ash, J.E., 1956, "A Three Dimensional Spherical Pitot Probe", *Transactions of the ASME*, pp.603-608.
- Sitaram, N., Lakshminarayana, B. e Ravindranath, A., 1981, "Conventional Probes for the Relative Flow Measurement in a Turbomachinery Rotor Blade Passage", *Journal of Engineering for Power*, Vol.103, pp.406-413.
- Treaster, A.L. e Yocum, A.M., 1979, "The Calibration and Application of Five-Hole Probes", *ISA Transactions*, Vol. 18, No. 3, pp.23-34.
- Trigo, F.C., Pereira, M.T. e Taira, N.M., 1989, "Tubo de Pitot de 5 Orifícios", *Anais, X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Rio de Janeiro, pp. 17-20.
- Wright, M.A., 1970, "The Evaluation of a Simplified Form of Presentation for Five-Hole Spherical and Hemispherical Pitometer Calibration Data", *Journal. of Physics E: Science and Instrumentation*, Vol. 3, pp.356-362.

ABSTRACT

Five hole Pitot tubes are utilized to determine the magnitude and direction of the gas velocity in a combustion chamber. Two Pitot probes were built, one spherical and one conical, both water cooled. They were calibrated applying three different data correlation procedures, based on two angular reference systems. The spherical Pitot probe was harder to built, the feasibility of the data correlation depending on the precision of the geometry and of the surface finishing. The correlating equations suggested by IFRF are simple to use. The conical Pitot probe, on the other hand, was easier to manufacture and the corresponding correlating equations are easy to apply. The region covered in space, however, is limited and the equations require a lot of manipulation so that they are obtained.

ESTUDO TEÓRICO DA MEDIÇÃO DE GRANDES VAZÕES BASEADA EM TRANSIENTES HIDRÁULICOS

Idalberto Ferreira de Ataídes, Aristeu da Silveira Neto
e Carlos Roberto Ribeiro

Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Uberlândia
38400-902 - Uberlândia - MG - Brasil

SUMÁRIO

A medição de grandes vazões em condutos forçados constitui num grande desafio para os engenheiros que atuam nas áreas de usinas hidrelétricas ou grandes instalações de bombeamento de água. O método de Pressão - Tempo (Método de Gibson), fornece a vazão permanente, deduzida das variações temporais da diferença de pressão estática entre duas seções da tubulação. Estas variações são criadas pelo fechamento rápido de uma válvula à jusante. Apartir da obtenção do histórico de diferenças de pressões, são procedidas as devidas integrações para se obter a vazão no regime permanente, ou seja, aquela quando a válvula estava totalmente aberta, antes do transiente hidráulico. Estuda-se, neste trabalho, a influência da distribuição das tomadas de pressão no conduto.

INTRODUÇÃO

Medições precisas da eficiência de hidroturbinas é essencial para o monitoramento das condições das unidades e para avaliações econômicas referentes a substituições destas unidades. O conhecimento da curva real de rendimento obtida após a determinação da vazão, em diversos pontos de operação das turbinas, permite uma análise mais detalhada de possíveis melhorias no rendimento global das instalações, seja pela otimização das faixas operativas ou até pela substituição dos rotores das turbinas, após uma avaliação de custo-benefício.

A medição de vazão em condutos forçados, de grandes diâmetros, constitui um grande desafio para os engenheiros que atuam nas áreas de usinas hidrelétricas ou grandes instalações de bombeamento de água. Os métodos prescritos nas normas técnicas (Cortina Salgada, Diluição, Molinetes, etc.), além de exigirem instalações complexas e de alto custo, são de validades discutíveis, em termos da precisão exigida.

Embora taxas de escoamentos absolutas devessem ser conhecidas precisamente, poucos medidores de escoamentos de hidroturbinas, em serviço, têm sido calibrados em campo. O método de pressão-tempo, ou método de Gibson, no qual a taxa de escoamento é deduzida através dos aumentos de pressão durante o fechamento de uma válvula a jusante (Figura 1), fornece um método relativamente barato para medir taxas de escoamentos em condutos fechados.

Objetiva-se com este artigo é apresentar os resultados preliminares de um projeto em desenvolvimento na Universidade Federal de Uberlândia (UFU), onde, inicialmente, o diferencial de pressão é simulado via computador, fazendo uso de uma teoria já estruturada sobre transientes hidráulicos (Wylie e Streeter, 1978; Chaudhry, 1979). Apartir destes diferenciais de pressão, obtém-se, através do método de Gibson, a vazão no estado permanente, ou seja, aquela existente antes do início do fechamento da válvula.

Numa segunda etapa do projeto, o registro do diferencial de pressão-tempo será obtido utilizando-se de uma instalação experimental em desenvolvimento no Departamento de Engenharia Mecânica da UFU.

DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

Nesta sessão, serão relacionadas as equações básicas que representam os fenômenos físicos em estudo. Inicia-se

mostrando a celeridade das ondas de pressão, as equações para o escoamento transitório e o método das características. Trata-se de teorias já bastante estruturadas, podendo ser encontradas em Bordón e Tiago Filho (1992), Chaudhry (1979), Souza Jr. e Santos (1993), Wylie (1984) e Wylie e Streeter (1978). Em seguida, a teoria relativa ao método de pressão-tempo será fundamentada.

Na figura 1, apresentam-se os componentes básicos do sistema utilizado neste estudo, que são o reservatório, a tubulação e a válvula. São posicionados os pontos de tomadas de pressão nas seções "a", "b" e "c".

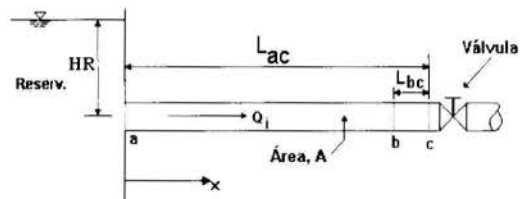


Figura 1 - Representação esquemática do sistema composto pelo reservatório, tubulação e válvula.

Celeridade das Ondas de Pressão. A celeridade (a), que representa a velocidade de propagação do som em um meio fluido infinito, para a situação mostrada na figura 1, pode ser calculada através da seguinte expressão:

$$a = \frac{\sqrt{\frac{K}{\rho}}}{\sqrt{1 + \frac{K D}{e E} c_1}} \quad (1)$$

onde K e ρ representam, respectivamente, a compressibilidade e a densidade do fluido. No denominador, tem-se a influência do diâmetro (D), da espessura (e) e do módulo de elasticidade (E) do tubo. A constante c_1 é função do tipo de ancoramento utilizado na tubulação (Wylie e Streeter, 1978).

Equações Diferenciais do Transiente Hidráulico. Duas equações básicas são aplicadas a um volume de controle, contendo uma parte do conduto, para a obtenção das equações

diferenciais do movimento transitório: a segunda lei do movimento de Newton e a equação da continuidade. As variáveis dependentes são a elevação da linha piezométrica $H(x,t)$, acima de um plano de referência fixo e a velocidade média $V(x,t)$, numa seção transversal do conduto. As variáveis independentes são a distância x (figura 1) e o tempo t .

Aplicando-se a segunda lei de Newton ao volume de controle, obtém-se a equação diferencial do movimento (Wylie e Streeter, 1978):

$$L2 = g \frac{\partial H}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial t} + \frac{fV|V|}{2D} = 0, \quad (2)$$

onde g é a aceleração da gravidade (m/s^2), H é a altura piezométrica (m), V é a velocidade média do escoamento (m/s) e f é o fator de atrito.

Aplicando-se a lei da conservação de massa, para um determinado volume de controle, segundo Wylie e Streeter (1978), obtém-se a equação diferencial da continuidade, que considerando os efeitos de compressibilidade da água e de elasticidade do tubo. Desta forma, obtém-se:

$$L1 = V \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial t} - V \text{sen} \theta + \frac{a^2 \partial V}{g \partial x} = 0, \quad (3)$$

onde θ é o ângulo de inclinação do tubo e "a" representa a celeridade da onda de pressão.

L1 e L2 são duas equações diferenciais parciais não lineares entre V e H , em função de x e t . Estas equações podem ser resolvidas por diferenças finitas, através do método das características.

A Solução pelo Método das Características. As equações L1 e L2, do item precedente, contêm duas incógnitas, V e H . Essas equações podem ser combinadas como $L=L1+\lambda L2$. Quaisquer dois valores reais distintos de λ fornecem duas equações, em função de V e H , que expressam o mesmo fenômeno físico representado por L1 e L2 e que podem substituí-las diante de qualquer solução.

A obtenção de dois valores reais para λ leva a dois pares de equações que são agrupadas e identificadas como equações C^+ e C^- de acordo com a figura 4 (Wylie e Streeter, 1978).

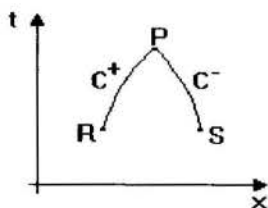


Figura 4 - Linhas Características no plano xt.

Estas equações são as seguintes:

$$\frac{gdH}{a dt} + \frac{dV}{dt} - \frac{g}{a} V \text{sen} \theta + \frac{fV|V|}{2D} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{dx}{dt} = v + a \quad (5)$$

$$-\frac{gdH}{a dt} - \frac{dV}{dt} + V \text{sen} \theta + \frac{fV|V|}{2D} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{dx}{dt} = v - a \quad (7)$$

As Eqs. (4) e (5), pertencem à característica C^+ , enquanto as Eqs. (6) e (7) pertencem à C^- .

Cada uma das equações, (4) e (6), contêm duas incógnitas para um ponto conhecido de sua característica, mas na intersecção de C^+ com C^- no ponto P, as duas equações podem ser resolvidas para a determinação de VP e HP. Neste ponto, as Eqs. (5) e (7) também podem ser resolvidas para a obtenção de x e t . Portanto, a solução é procurada sobre as características, partindo-se de condições conhecidas e achando-se novas interseções para a determinação de cargas e velocidades posteriores.

O método das Características sem interpolações (Wylie e Streeter, 1978), apresenta as seguintes equações finais, utilizando-se agora a vazão (Q) ao invés da velocidade:

$$C^+ : HP_i = C_p - B QP_i \quad (8)$$

$$C^- : HP_i = C_M + B QP_i, \quad (9)$$

onde C_p e C_M são constantes calculadas em função das condições conhecidas no instante anterior, da seguinte maneira:

$$C_p = H_{i-1} + B Q_{i-1} - R Q_{i-1} |Q_{i-1}| \quad (10)$$

$$C_M = H_{i+1} - B Q_{i+1} + R Q_{i+1} |Q_{i+1}| \quad (11)$$

As soluções para HP e QP são dadas por:

$$HP_i = \frac{C_p + C_M}{2} \quad (12)$$

$$QP_i = \frac{C_p - HP_i}{B_R} \quad (13)$$

onde $B = a/gA$ e $R = f \Delta x / (2gDA^2)$.

Condições de Contorno Básicas. Na extremidade a montante, ou da esquerda, do conduto, a equação da característica C^- fornece uma equação com duas incógnitas QP_1 e HP_1 (figura 6a). Para resolver a equação é necessária uma condição exterior ao conduto.

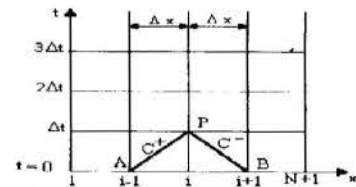


Figura 5 - Plano xt para o método das Características com interpolações.

Na extremidade a jusante, ou da direita, do conduto (figura 6b), a característica C^+ também fornece uma equação com duas incógnitas QP_{NS} e HP_{NS} . Uma condição externa faz-se necessária.

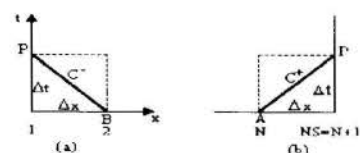


Figura 6 - Característica nos Contornos.

1a. Condição: Reservatório na Extremidade a Montante com Elevação Especificada

Em um grande reservatório, a montante, a elevação da superfície acima do plano horizontal de referência pode ser assumido constante durante uma pequena duração do transiente. Assim,

$$HP_1 = HR \quad (14)$$

2a. Condição: Válvula na Extremidade a Jusante da Tubulação
Segundo Wylie e Streeter (1978), tem-se:

$$QP_{NS} = BC_V + \sqrt{(BC_V)^2 + 2C_V C_P} \quad (15)$$

onde $C_V = \frac{(Q_0 \tau)^2}{2H_0}$

τ = abertura adimensional da válvula

H_0 = perda de altura no estado permanente através da válvula

Q_0 = vazão no estado permanente.

Método de Pressão-Tempo em Conduitos Fechados. No desenvolvimento a seguir, assume-se a hipótese de escoamento turbulento, ligeiramente compressível, não uniformemente distribuído sobre uma seção transversal do conduto. A integração da equação do movimento, para o método de pressão-tempo admite que a descarga variável no tempo, no volume de controle da medição, é invariável com x (teoria da coluna rígida).

Conservação de Massa. A conservação de massa para um escoamento compressível é dada pela equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho A) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U A) = 0 \quad (16)$$

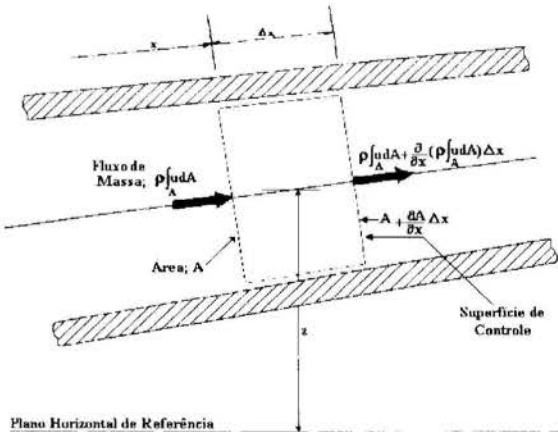


Figura 7 - Volume de controle para conservação de massa.

Princípio da Quantidade de Movimento. A figura 8 ilustra os fluxos de quantidade de movimento axiais e também as forças agindo num volume de controle, de comprimento infinitesimal, Δx , numa seção não uniforme de um conduto inclinado. O princípio da quantidade de movimento iguala a taxa no tempo de acumulação da quantidade de movimento, dentro do volume de controle, ao escoamento líquido da quantidade de movimento, mais a soma de forças agindo sobre o volume de controle.

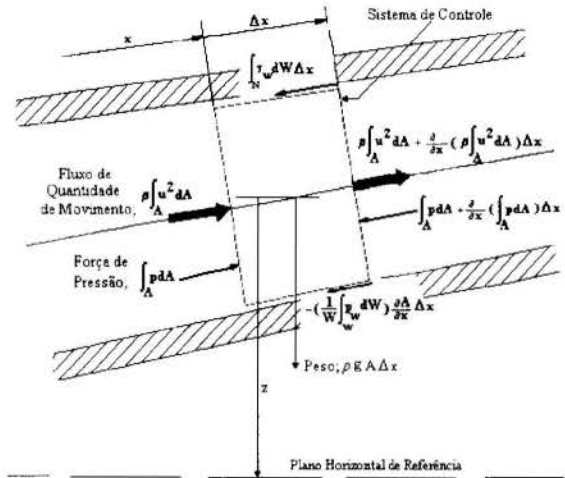


Figura 8 - Volume de controle para a conservação da quantidade de movimento.

A equação resultante, de acordo com a norma da ASME PTC 18 (1992), é a seguinte:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U A) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \zeta U^2 A) + A \frac{\partial P_w}{\partial x} + \rho g A \frac{dz}{dx} + T_w W = 0 \quad (17)$$

Surgem, nesta relação, alguns termos tais como o coeficiente de soma ζ , que é igual à soma do fator de correção da quantidade de movimento β , mais o fator de intensidade de turbulência ξ , mais o coeficiente de pressão K_w . Estas grandezas, juntamente com P_w e T_w , são definidas a seguir:

$$\zeta = \beta + \xi + K_w \quad (18)$$

$$\beta = \frac{1}{U^2 A} \int \bar{u}^2 dA \quad (19)$$

$$\xi = \frac{1}{U^2 A} \int \bar{u}'^2 dA \quad (20)$$

$$P = \frac{1}{A} \int \bar{p} dA \quad (21)$$

$$T_w = \frac{1}{W} \int \bar{\tau}_w dW \quad (22)$$

$$P_w = \frac{1}{W} \int \bar{P}_w dW \quad (23)$$

$$K_w = \frac{P - P_w}{\rho U^2} \quad (24)$$

Para um volume de controle no conduto, a Eq. (17) é transformada numa expressão, igualando mudança de quantidade de movimento ao pulso, pela integração, sobre o tempo, a partir de um tempo inicial t_i até o tempo final t_f e sobre o comprimento do volume de controle, localizado entre uma posição a montante x_m e uma posição a jusante x_d . Antes de ser integrada, a equação deve ser modificada, expandindo suas derivadas e subtraindo a Eq. (16), multiplicada por U. Assumindo-se que a descarga, variável no tempo no volume de controle, é invariável com z, o que implica em fluido incompressível, de densidade uniforme e paredes do conduto rígidas. Assim, utilizando-se $h_w = \frac{P_w}{\rho g} + z$, a equação resultante

(Schohl e March, 1991) é a seguinte:

$$Q_i - Q_f = \frac{g}{F} \int_{t_i}^{t_f} \{ (h_{wd} - h_{wu}) - \frac{Q^2}{Q_i^2} (h_{wdi} - h_{wui}) + \frac{Q^2}{2g} [\frac{\zeta_d''}{A_d^2} - \frac{\zeta_u''}{A_u^2} + \int_{x_u}^{x_d} \frac{1}{A^2} (\frac{f''}{d_h} + \frac{\partial \zeta''}{\partial x}) dx] \} dt \quad (25)$$

onde f' e ζ'' representam a variação sobre o tempo de f e ζ com relação aos valores iniciais permanentes, ou seja:

$$f = f_i + f'' \quad (26)$$

$$\zeta = \zeta_i + \zeta'' \quad (27)$$

A Eq. (25) é a expressão usada na aplicação do método de pressão-tempo para determinar a descarga, em condutos fechados não uniformes e inelásticos, conduzindo a um escoamento não uniforme e incompressível.

É necessário assumir que as distribuições de velocidade e pressão, como também as flutuações de velocidades turbulentas, permanecem constantes durante o tempo em que o escoamento é levado ao repouso (isto é, que ζ'' e f'' são iguais a zero). Embora estas hipóteses não sejam satisfeitas durante a medição e registro de pressão-tempo, é necessário se fazer desta forma porque as funções $\zeta''(t)$ e $f''(t)$ geralmente são indeterminadas. Análises e discussões apresentadas por Schohl e March (1991) sugerem que os erros, associados ao fato de se abandonar estas funções, são desprezíveis.

Algoritmo de Pressão-Tempo. O algoritmo de pressão-tempo consiste de uma fórmula de integração numérica para determinar a descarga, de acordo com a Eq. (25), como também de procedimentos para definição dos pontos de início e final do intervalo de integração no registro de pressão-tempo. A Eq. (25) é, primeiramente, simplificada, desprezando-se os termos com coeficientes variáveis no tempo e retirando-se os subscritos w das alturas piezométricas. O algoritmo pode ser empregado num código computacional para a determinação da descarga, a partir de registros de pressão-tempo obtidos. Na atual fase deste projeto, o algoritmo de pressão-tempo determina a descarga, usando-se registros de pressão-tempo gerados numericamente.

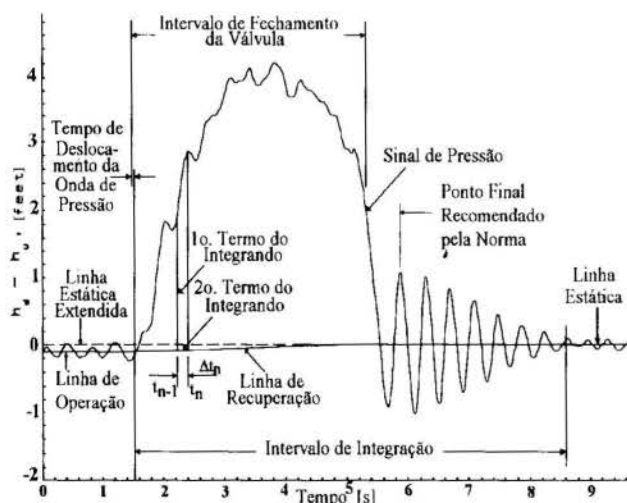


Figura 9 - Integração numérica de um registro de Pressão-Tempo (Almquist e Kirkpatrick, 1986).

A curva de pressão-tempo mostrada na figura 9, apresenta anotações relevantes para o algoritmo de pressão-tempo. O intervalo de integração estende-se desde o tempo em que a

primeira onda de pressão, gerada pelo fechamento da válvula, influencia o sinal de pressão, até o tempo, depois que a válvula foi completamente fechada, em que a magnitude da oscilação de pressão decrescente é mínima. A linha de operação, que estende-se desde um ponto inicial arbitrário até o início do intervalo de integração, define a média da diferença de altura inicial no estado permanente, através do volume de controle. A linha estática, que estende-se desde o final do intervalo de integração até um ponto final arbitrário, define a diferença de altura através do volume de controle. Esta diferença normalmente é zero, a menos que seja influenciada por uma significativa vazão de fuga. A linha de recuperação, que conecta as linhas estática e de operação, define a variação do segundo termo no integrando da Eq. (25), sobre o intervalo de integração.

No algoritmo de pressão-tempo usa-se a regra do trapézio para integrar numericamente a distribuição de pressão diferencial de acordo com a Eq. (25), desprezando-se os termos com coeficientes variáveis no tempo. Para uma diferença incremental no tempo, $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$, a figura 9 ilustra as áreas entre o sinal de pressão e a linha de recuperação, correspondendo aos primeiros dois termos no integrando da Eq. (25). Aplicada a estas áreas incrementais, a expressão para o cálculo de Q_n é a seguinte:

$$Q_n - Q_{n-1} = - \frac{g \Delta t_n}{F} \left[\frac{1}{2} (\Delta h_n + \Delta h_{n-1}) - \frac{\Delta h_i}{2Q_i^2} (Q_n^2 + Q_{n-1}^2) \right] \quad (28)$$

onde $\Delta h_n = (h_d - h_n)_n$ e o subscrito i refere-se à condição inicial, no estado permanente, no ponto final da linha de operação (correspondendo a $n=0$). O rearranjo da Eq. (28) resulta numa fórmula quadrática para a descarga Q_n . Dada uma estimativa inicial do seu valor, a descarga inicial, no estado permanente, Q_i (ou Q_0), é determinado através de iterações, para, sucessivamente, fornecer a estimativa de Q_i , até que descarga final calculada seja igual a zero, ou igual à vazão de fuga, se houver.

Na seleção do intervalo de integração, na norma ASME PTC 18 (1992), recomenda-se que para registros de pressão-tempo que apresenta uma oscilação amortecida, após o fechamento da válvula, o final do intervalo de integração deverá coincidir com o primeiro pico após o completo fechamento da válvula. A influência da seleção do ponto final é minimizada quando este é escolhido numa posição além da oscilação amortecida, como ilustrado na figura 9. A amplitude do sinal de pressão é suficientemente pequena, de forma que a descarga seja praticamente insensível à escolha do ponto final.

RESULTADOS

Como foi mencionado anteriormente, o registro de pressão-tempo será gerado numericamente, tendo como base os aspectos teóricos descritos. Para um caso específico, cujos dados de entrada serão apresentados posteriormente, aplica-se o algoritmo de pressão-tempo para se obter, de forma indireta, a vazão no estado permanente.

Explora-se, inicialmente, a variação das posições das tomadas de pressão, sendo que no primeiro caso, fixa-se uma delas junto à entrada da válvula e a outra será localizada em posições subsequentes a montante da primeira. A distância entre elas será, a cada passo, aumentada até que o comprimento do volume de controle seja igual ao próprio comprimento do conduto. Para cada distância entre as tomadas, gera-se o arquivo de diferencial de pressão versus tempo. Em seguida, calcula-se a vazão no estado permanente. Compara-se esta vazão com

aquela utilizada na geração do diferencial de pressão versus tempo, calculando o erro entre elas. Será possível, então, analisar o erro relativo à distância entre as tomadas de pressão. A norma ASME PTC 18 (1992) estabelece que a distância mínima entre duas tomadas de pressão não deve ser inferior a 10 metros (33 ft). Com esta análise torna-se possível estabelecer as posições das tomadas que poderão proporcionar o menor erro no cálculo da vazão permanente.

Numa etapa posterior, será analisado o erro obtido no cálculo da vazão quando as posições das duas tomadas de pressão são variadas simultaneamente, mantendo-se fixa a distância entre elas. Isto significa que o comprimento do volume de controle será sempre o mesmo.

O erro entre a vazão Q_0 , utilizada no algoritmo para a geração do arquivo de diferencial de pressão versus o tempo, e aquela vazão (Q_i), calculada pelo método de Gibson, será dado pela relação abaixo:

$$\text{Erro} = \left| \frac{Q_i - Q_0}{Q_0} \right| * 100 \quad (29)$$

O primeiro resultado, portanto, apresentado na Fig. 11, foi elaborado, considerando-se a figura 10 a seguir, que relaciona também os dados de entrada do programa.

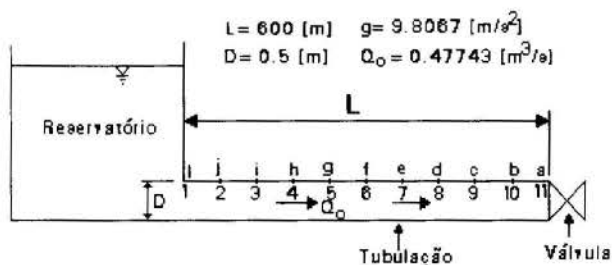


Figura 10 - Representação esquemática do sistema composto pelo reservatório, tubulação, válvula e as posições para colocação das tomadas de pressão.

A tubulação foi subdividida em dez seções igualmente espaçadas. Uma primeira tomada de pressão se manterá fixa na seção "a" e a segunda será, paulatinamente, deslocada desde a seção "b" até a seção "l". Em cada passo, calcula-se a vazão, pelo método de Gibson, assim como o erro, calculado através Eq. (29). O resultado é apresentado na figura 11.

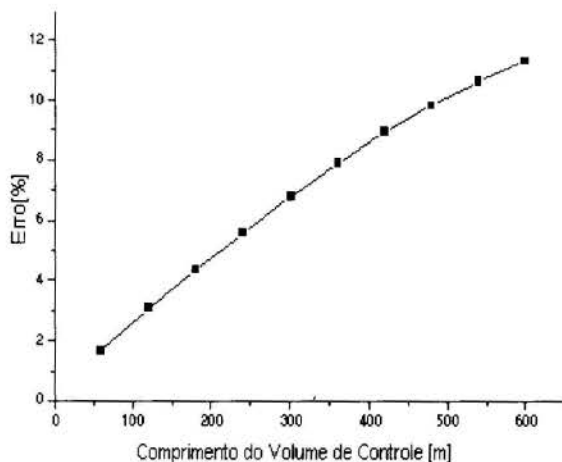


Figura 11 - Erro no Cálculo da Vazão versus o Comprimento do Volume de Controle.

Nota-se que, à medida que o comprimento do volume de controle aumenta, aumenta-se o erro. O comprimento total da tubulação L, foi dividido em dez partes iguais, então cada seção mede 60 metros. Este é o menor comprimento do volume de controle, que nesta primeira análise, se forma quando a tomada de pressão fixa está localizada na seção "a" e a outra na seção "b". Exatamente com esta disposição, obtém-se o menor erro. O maior erro foi obtido quando a segunda tomada de pressão se posiciona na seção "l", ou seja, o comprimento do volume de controle se iguala ao comprimento total do conduto.

A justificativa para o aumento do erro, quando se aumenta também o comprimento do volume de controle, está relacionada com o fato de que a Eq. (3) da continuidade, é válida para um líquido compressível no interior de um conduto elástico. O parâmetro "a", que é a celeridade da onda de pressão, formada com o fechamento da válvula, é que introduz estas características. Já a Eq. (25), relativa ao método de Gibson, assume que a descarga é variável no tempo, no volume de controle, e invariante com a distância x. Isto implica em fluido incompressível, de densidade uniforme e paredes do conduto rígidas. Portanto, quanto maior o comprimento do volume de controle, mais significativa torna-se esta diferença entre a geração dos registros de pressão-tempo e o método de Gibson.

Uma outra análise deverá ser feita, afim de identificar a posição do volume de controle em que se poderá obter a vazão com menor erro. As tomadas de pressão serão colocadas, inicialmente, nas posições "a" e "b" da figura 10, numa próxima etapa serão colocadas nas posições "b" e "c", depois "c" e "d", até que alcance "j" e "l". Em cada etapa, calcula-se a vazão e o respectivo erro. Assim será construído um gráfico, relacionando o erro, no eixo vertical, com a posição daquela tomada mais a montante (com relação às duas tomadas). Ou seja, a posição que vai da seção "b" até a "l" (figura 10). Este gráfico é apresentado na figura 12.

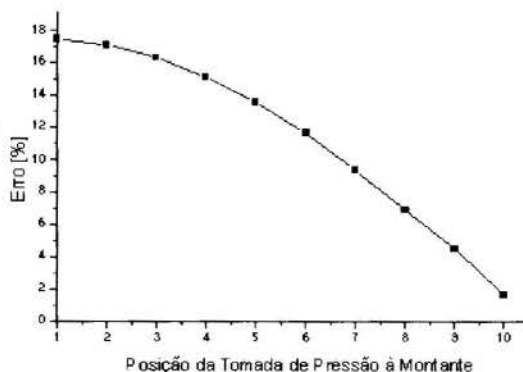


Figura 12 - Variação do erro no cálculo da Vazão com relação à posição do volume de controle, de acordo com a Fig. 10.

Nota-se que, à medida que o volume de controle se afasta da fonte geradora do transiente hidráulico - a válvula - o erro na determinação da vazão aumenta. Portanto, a posição que proporciona o menor erro na vazão é aquela cujo volume de controle se estende da seção "a" até "b". Isto será alvo de novos estudos, através de registros de pressão-tempo gerados experimentalmente para confirmação deste resultado.

O comprimento mínimo dos volumes de controle analisados até aqui é de 60 m, obtendo-se um erro também mínimo de 1,6%, quando o volume de controle localiza-se entre as seções "a" e "b". Mas esta distância entre as tomadas de pressão é consideravelmente alta. Subdividindo-se a tubulação em 50 partes iguais, cada uma terá um comprimento de 12 metros. Posicionando-se as tomadas de pressão junto à válvula, obtém-se um baixo erro, da ordem de 0,45%. Nestas condições,

constata-se o menor erro, novamente, localizando-se o volume de controle nesta seção junto à válvula, ou seja, junto à fonte geradora do transiente hidráulico.

A figura 9 faz parte dos resultados dos relatórios referentes à implementação do método de Gibson na Great Falls Hydro Plant, no estado do Tennessee, USA (Almquist e Kirkpatrick, 1986; Schohl e March, 1991). A posição do volume de controle, neste caso, é no centro da tubulação, cujo comprimento é 8,60 metros. O relatório fornece a vazão de 44.432 [m³/s] para o estado permanente. Através do algoritmo, referente ao presente trabalho, obtém-se uma vazão de 43.994 [m³/s]. O erro, calculado através da Eq. (29), considerando-se Q_0 como sendo a vazão fornecida pelo relatório e Q_1 aquela do presente trabalho, foi da ordem de 1%. Trata-se de um erro consideravelmente baixo, levando-se em conta o fato de que esta é apenas uma primeira etapa de um projeto de pesquisa, o que, sem dúvida, é bastante animador.

CONCLUSÕES

Todas as conclusões que serão aqui apresentadas, terão como retaguarda o objetivo principal que norteia este artigo, que divulga o que está sendo feito, juntamente com os resultados obtidos, nesta primeira etapa de implementação do método de pressão-tempo para medição de grandes vazões. Todos estes resultados deverão ser confirmados nas etapas posteriores do projeto, através de experimentação.

Então, de acordo com o que foi apresentado, pode-se chegar às seguintes conclusões preliminares:

- i) Quanto menor o comprimento do volume de controle, menores são os erros cometidos no cálculo da vazão. A norma ASME PTC 18 (1992) limita este comprimento, estabelecendo que ele não deve ser inferior a 10 metros (33 ft). Mas existem, na literatura, trabalhos que utilizam comprimentos menores do que este, proporcionando excelentes resultados no cálculo da vazão. Em Schohl e March (1991), por motivos de limitações físicas, o comprimento foi de 8,60 metros e obteve-se grande sucesso no cálculo da vazão. Testa-se, até neste ponto do trabalho, comprimentos até de 3 metros, obtendo-se erros de 0,25% no cálculo da vazão. Acredita-se, portanto, que este seja um aspecto merecedor de um estudo mais aprofundado, no sentido de se obter subsídios para uma ampla discussão no que se refere a esta limitação imposta pela norma;
- ii) Quando o volume de controle se afasta da fonte geradora do transiente hidráulico, a válvula, o erro da vazão calculada torna-se maior. Serão necessários maiores estudos, inclusive a nível de experimentação, aumentando-se a frequência de aquisição de dados para se confirmar este fato. Até o momento, trabalhando-se com até 200 leituras por segundo, chega-se a este resultado. Em Watt et al. (1980), trabalha-se com 2000 leituras por segundo, colocando o volume de controle junto à válvula;
- iii) Com a implementação do método sobre os dados provenientes dos estudos realizados por Schohl e March (1991), obtém-se excelentes resultados, com erros da ordem de 1%. Isto mostra que se pode ter bastante confiança no método. Mas a posição do volume de controle no centro da tubulação, tendo uma frequência de aquisição de apenas 60 leituras por segundo, torna-se mais um incentivo para um aprofundamento nos estudos do método, dando grande ênfase à etapa experimental.

Com todos estes subsídios, parte-se para a etapa seguinte do trabalho, exatamente a fase de experimentação, para o estabelecimento dos conceitos e verificação das conclusões que foram tiradas até agora. Deseja-se também obter novas conclusões e certezas, que serão objetos de novas publicações.

REFERÊNCIAS

- Almquist, C. W. e Kirkpatrick, J. F., 1986, "Flow Measurements Using the Pressure-Time Method at the Great Falls Hydro Plant", Report WR28-1-13-104, Tennessee Valley Authority, Engineering Laboratory, Norris, Tennessee.
- ASME (American Society of Mechanical Engineers), 1992, "Hydraulic Turbines", Performance Test Code 18, pp. 47-52, New York, N.Y.
- Bordón, C. A. e Tiago Filho, G. L., 1992, "Simulação e Análise de Transitórios Hidráulicos em Tubulações sob Pressão: O Método das Características Aplicado às Pequenas Centrais Hidrelétricas", 7o. Simpósio Brasileiro Sobre Tubulações e Vasos de Pressão", pp. 661-671, Florianópolis - SC, Brasil.
- Chaudry, M. H., 1979, "Applied Hydraulic Transients", Van Nostrand Reinhold Company, New York, N. Y.
- Schohl, G. A. e March, P. A., 1991, "Theoretical and Numerical Analysis of Pressure-Time Flow Measurement Method", Report WR28-1-900-244, Tennessee Valley Authority, Engineering Laboratory, Norris, Tennessee.
- Souza Jr., O. H. e Santos, A. H. M., 1993, "Estudo de Transitórios Hidráulicos Através da Simulação de Modelos Não Lineares", XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, pp. 841-844, Brasília-DF, Brasil.
- Watt, C. S., Hobbs, J. M., e Boldy, A. P., 1980, "Hydraulic Transients Following Valve Closure", ASME Journal of the Hydraulics Division, Vol. 102, No. HY10, pp. 1627-1640.
- Wylie, E. B., 1984, "Fundamental Equations of Waterhammer", Journal of Hydraulic Engineering, Vol. 110, No. 4, pp. 539-542.
- Wylie, E. B. e Streeter, V. L., 1978, "Fluid Transients", McGraw-Hill Book Co., Inc., New York, N. Y.

ABSTRACT

The measurement of high flowrates in closed conduits is a challenge to engineers working in hydroelectric plants and pumping units. The pressure-time method (or Gibson method) provides the steady-state flowrate from the differential static pressure between two sections of the conduit as a function of time. This differential static pressure is obtained by closing a downstream valve. After the pressure-time records are obtained, they are integrated numerically to compute the steady-state flowrate, i.e., the flowrate when the valve is completely open. In the present work the influence of the position of the pressure taps on the conduit is investigated.



THEORETICAL AND EXPERIMENTAL ANALYSIS FOR THE RETARDING TORQUES OF A TURBINE FLOW METER



Ferreira, V.C.S. and Favaretto C.F.
 Department of Mechanical Engineering
 Federal University of Rio Grande do Sul
 90050-170, Porto Alegre, RS, Brazil

SUMMARY

Many theoretical and experimental studies have been made to access the actual values of the retarding torques of a turbine flowmeter but because of the complex flow interaction and their tiny value this has been an uneasy task. The aim of this work is to obtain a consistent analytical expression, experimentally established, which represents the equilibrium equation of a turbine meter for the whole flow range.

INTRODUCTION

Turbine type flow meter is an especial turbomachine with no power output. When running at constant speed, in equilibrium, the driving torque is equal to the retarding ones. The retarding torques are due to the blade surface (T_s) and rotor hub skin friction (T_h), due to the bearing friction (T_{brl}), due to the friction between the disk surface of the hub and the support (T_f), due to the drag at blade tip clearance (T_{bt}), and due to the retarding force caused by the pickup (T_p), when a magnetic type is used. The T_d , which provides the turbine motion, comes from the mean flow energy through the rotor blades. This torque may be calculated using the angular momentum analysis or the airfoil theory applied for a turbomachinery, as used by Blows (1981), Rubin et. al. (1965) and Thompson and Grey (1970). Eq. (1) below, presents the equilibrium equation in this situation. Fig. 1, from Favaretto (1995), illustrates all the involving torques in a running turbine meter.

$$T_d = \Sigma T_R = T_s + T_h + T_f + T_{bt} + T_{brl} + T_p \quad (1)$$

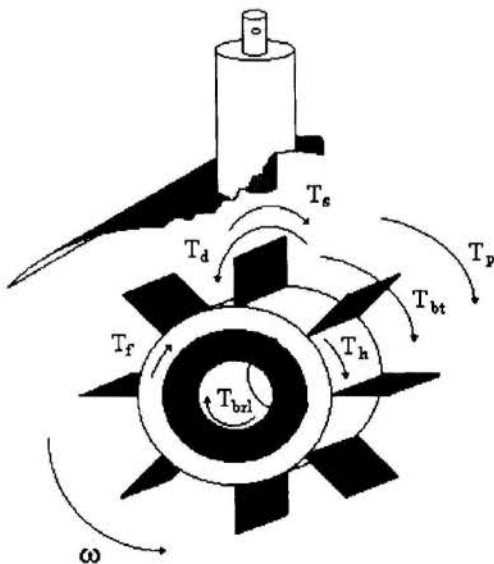


Figure 1 - Driving and retarding torques

Many theoretical approaches and experimental studies have been made to access the actual values of the retarding torques but, because of the complex flow interaction with the meter and their tiny values, performing each torque has been a difficult task. The aim of the present work is to obtain a consistent analytical expression, experimentally established, which represents the equilibrium equation of a turbine flow meter for the whole flow range. The purpose of this study is also to better understand the flow behaviour in order to design new prototypes and/or improve the performance of the old ones.

In the present paper, two retarding torques measured experimentally are presented. The other ones were analytically performed by using expressions which came from the technical literature or especially here developed. The equilibrium equation for the whole flow range of the prototype tested is also presented and discussed.

The bearing retarding force and the magnetic pickup drag were measured experimentally using a special developed test rig. The effect of the magnetic pickup on the calibration curve is also analysed. An optical pickup, with no drag effect, was developed. A comparison between the two situations with and without the magnetic force is analysed through the calibration curve of the turbine meter tested.

EXPERIMENTAL ANALYSIS

Bearing Retarding Torque. The test rig used for measuring the bearing retarding force was described by Favaretto (1995) and comprises a driving motor with a continuous speed control, a load cell using strain gages, a dynamic amplifier bridge and a computer data acquisition system. A single ball bearing and a complete turbine rotor with double bearings were tested for several rotational speed within the flow range of the turbine meter, according to its calibration curve. The tests were taken with three different fluids: air, water and low viscosity oil. Fig. 2 illustrates the test rig developed.

Measuring the bearing retarding force consisted of recording the strain signal from the load cell pressed by a punctual contact of the blade surface of the turbine meter rotor. The internal ring of the ball bearing rotates driven by the servo-motor at a selected speed. The rotational velocity ranged from 200 RPM up to 3000 RPM, which is within the flow range of the prototype tested. Fig. 3 shows a particular test with oil as the working fluid and at the rotational speed of 1550 RPM. The turbine rotor

was tested in the same rig, showed in Fig. 2, replacing the ball bearing.

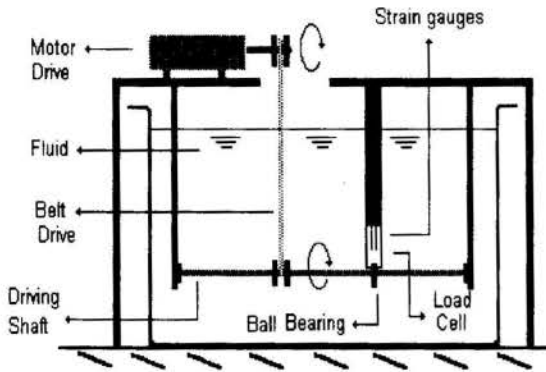


Figure 2 - Test rig for measuring the bearing drag torque

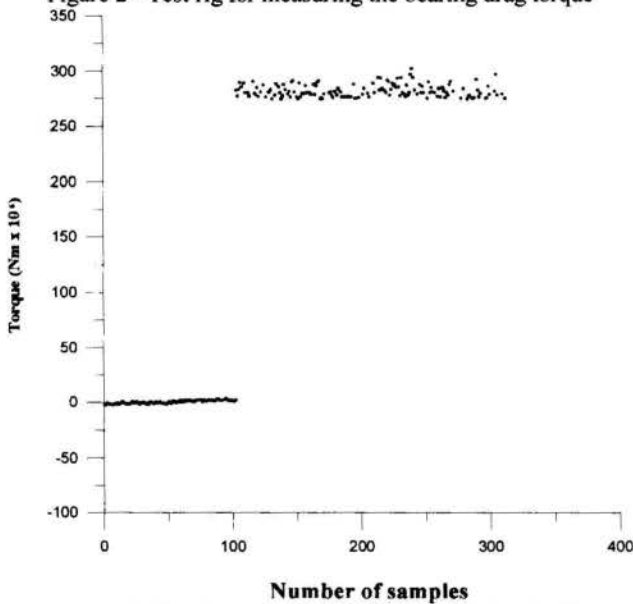


Figure 3 - Bearing retarding torque (1550 RPM in oil)

The data acquisition system is able to record samples for the computer hard disk at a frequency of 2.6 KHz. Each test consisted of an average of 500 sample points with the first 100 samples acquired without load and the remaining 400 under stress. The plot discontinuity shown in figure 3 represents, practically, this situation.

The load cell was particularly developed for very small forces. It consists of a rectangular stainless steel blade with a thickness of 0.2 mm and fixed onto a stiff support. The load cell is able to record forces as low as 0.002 N. A complete analysis for a particular case is formed for several tests in different rotational speed.

The experimental results are presented in Figs. 4, 5 and 6. Fig. 4 shows the relationship between the bearing drag retarding torque for a single glass ball bearing in air and in water medium. Fig. 5 presents for the same ball bearing retarding torque now operating in a low viscosity oil (31.2 Cst at 40°C). The last figure, Fig. 6, shows the results for a complete turbine meter rotor in water. The rotor hub comprises two glass ball bearings, similar to the previously tested one, in parallel arrangement and running inside the water. From figure 6 one can see the linear characteristic of the relationship between the bearing retarding torque and the rotational speed N (RPM) of the rotor:

$$T_{brl} = 4.19956 \times 10^{-8} N$$

(2)

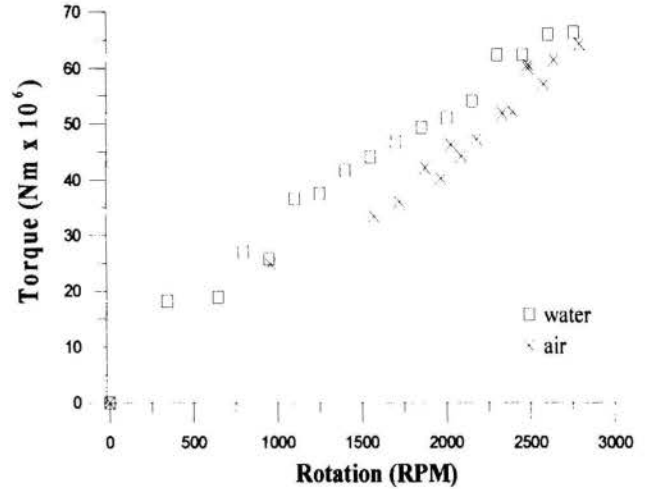


Figure 4 - Bearing torque x Rotational speed

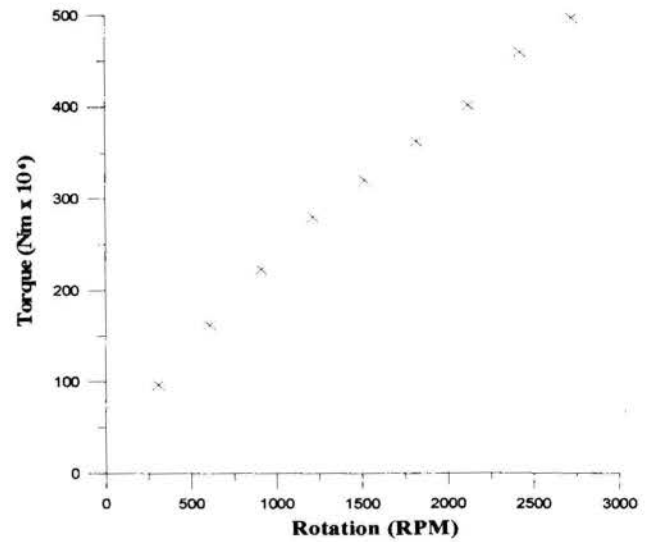


Figure 5 - Bearing torque x Rotational speed (Fluid Oil)

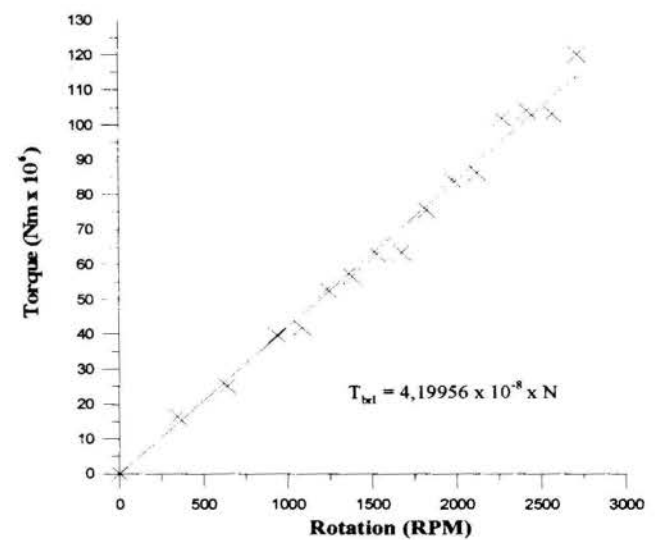


Figure 6 - Bearing Torque x Rotational Speed (Turbine rotor prototype in water)

The experimental results showed a linear behaviour with small of uncertainty. The uncertainty ranged from $\pm 3\%$ up to $\pm 8.5\%$ with the small values for the oil tests, the medium values

for water and the high values for the air tests. One important effect noticed during the measuring tests was the vibration induced by the load cell, itself. Tiny transient effects produced in the torque transmission from the motor, pulley, and/or from the belt drive were transmitted up to the turbine rotor and amplified by the *load cell blade*. This fact produced a torque fluctuation dependent on the fluid used. In oil, due to the dumping effect caused by the high viscosity, small fluctuations were noticed, whereas in air, the opposite was found. Measurements close to the natural frequency of the load cell blade were also avoided due to the resonance effects which caused high torque fluctuation.

It is important to compare the magnitude of the retarding torque measured in different media. As it was expected, the torque measured in oil assumed higher values than in water. This was probably, because the oil viscosity (absolute, μ or kinematics viscosity, ν) is bigger than the water viscosity. The same comparison between water and air is not so clear. It is interesting to notice that the retarding torque measured for both fluids are of the same order of magnitude being the absolute viscosity of the water about fifty times the air viscosity and the kinematic viscosity of the air eighteen times the water.

Magnetic Pickup Retarding Torque. The magnetic retarding effect was measured using the same previous rig, though, in a slight different arrangement. Instead of spinning the internal ring of the ball bearing, as for the bearing drag tests, the servo-motor moves the load cell upwards pressing the punctual contact of the blade rotor. Fig. 7 characterises the physical arrangement of the test rig.

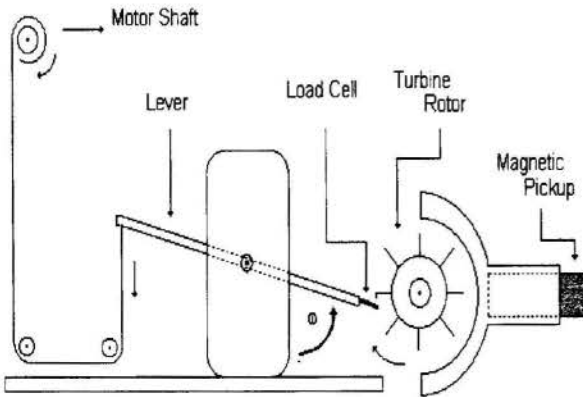


Figure 7 - Test rig for measuring the magnetic pickup

A turbine rotor prototype is placed under the effect of the magnetic field and in contact with the load cell. As the rotor has an even number of blades (eight) we used opposite blades to set up the test. The first blade is placed under the effect of the magnetic field and the fifth one is pressed by the load cell. The servo-motor moves the load cell upwards and against the magnetic force. The purpose of this movement is to take the system out of the equilibrium. The magnetic force is continuously recorded through the load cell, till the equilibrium is dismissed.

In order to simulate a real situation, the rotor was assembled keeping the same tip clearance and same distance between tip blades and the magnetic sensor. The rotor was free to turn restricted only by the bearing friction and the magnetic effect of the pickup. A punctual contact between the turbine blade and the load cell was adopted to reduce the influence of others frictions.

Figure 8, shows a record of the magnetic retarding force from the data acquisition system.

The x-coordinate of this figure shows the angle between the blade and the lever position.

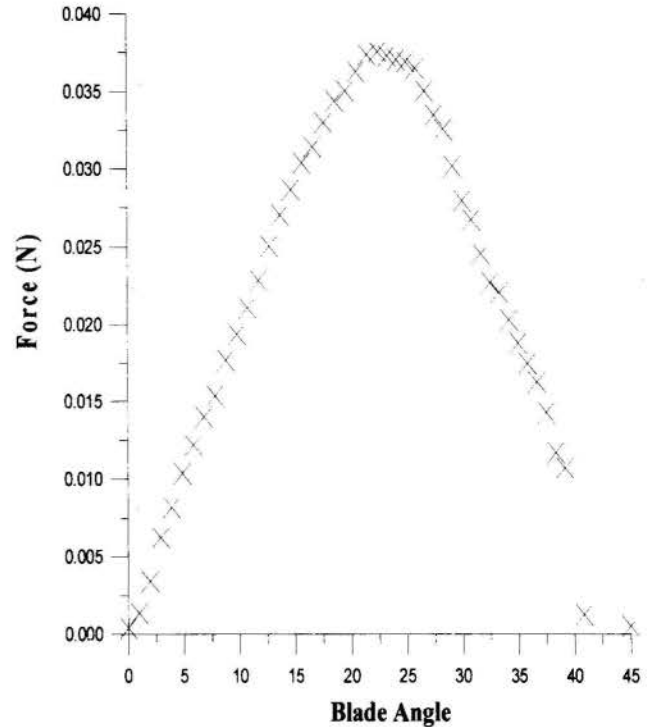


Figure 8 - Magnetic pickup retarding torque

From this figure (Fig. 8) one can easily see the distinct situations of the magnetic influence. The first region is the rising part of the curve, where the retarding force increases from zero up to the maximum value. The record reaches the maximum value when the contact between the cell and the blade is almost disconnecting. The following region shows the load cell relief during the rotor's turn. Figure 8 also shows a small step of discontinuity of the results happening about the blade angle of 40° . This was due to vertical movement of the lever with the magnetic retarding effects acting on the approaching (the sixth) blade.

Actually, the data shown in Fig. 8 have an additional retarding effect. The bearing's static friction is always included in these records. In order to access the bearing static friction a set of measurement was taken with the same test rig. The same procedure was adopted, however, without the influence of the magnetic pickup. The magnetic pickup force is obtained by subtracting this value from the previous one (fig. 8). The bearing static friction measured was $0.003893 \text{ N} \pm 0.000641 \text{ N}$, so the maximum magnetic pickup retarding force was $0.03405 \text{ N} \pm 0.0016 \text{ N}$ with an estimate uncertainty of $\pm 4.7\%$ FS. The retarding torque can be calculated by multiplying the force value by the cantilever arm (30.9 mm) of the load cell.

The influence of the magnetic retarding torque on the turbine rotor is quite different from the previous retarding effects identified by the equilibrium equation (Eq. 1). This retarding effect oscillates from zero up to a maximum, every time a blade passes near by the pickup, whereas the other ones, act continuously depending, normally, on the rotational speed. The magnetic effects depend on the blade position, number Z of blades and on the rotational speed. It varies every angular sector of $2\pi/Z$ rad in a sinusoidal oscillatory feature as shown in figure 9. Figure 9 presents the variation of the magnetic pickup retarding torque for several rotational speed of the turbine flow meter prototype tested.

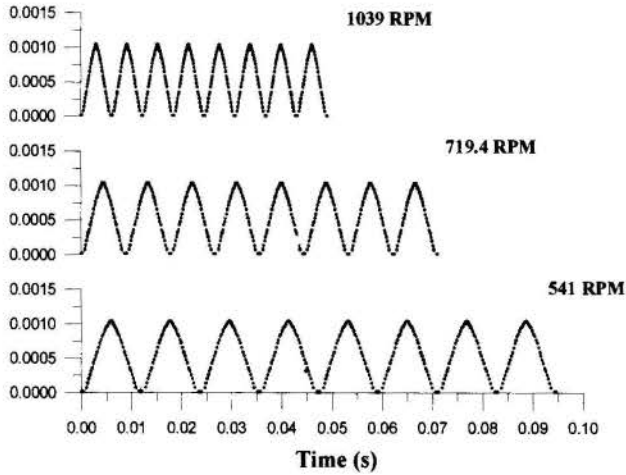


Figure 9 - Magnetic retarding torque versus rotational speed

For the equilibrium equation (Eq. 1), though, the average value for a long period of time of the magnetic retarding effect is of interest. Thus, as the blade position is fixed with respect to the magnetic pickup, the average effect \bar{T}_p can be calculated by the RMS of any result (curves) shown in figure 9 (T_{RMS}). The value of T_{RMS} remains constant (independent on the turbine rotational speed) and given, in Nm, as:

$$\bar{T}_p = T_{RMS} = 0.0003231743 \quad (3)$$

The magnetic pick up also caused an electric generated power due to the running blades near by the magnetic field. The value of this effect was neglected due to the very low value obtained ($< 10^{-8}$ Nm).

THEORETICAL ANALYSIS

The left hand side of the equilibrium equation is identified as the *driving torque* and may be calculated using the angular momentum approach or by the airfoil theory.

The infinitesimal driving torque (dT_d), according to the angular momentum (Rubin et al., 1965), can be calculated as:

$$dT_d = 2\pi\rho V_z^2 \left[\tan\beta_2 - \frac{\omega_a r}{V_z} \right] r^2 \quad (4)$$

where the variables V_z and β_2 are represented in figure 10, r is the radial coordinate, ω_a the rotational speed of the turbine meter and ρ the specific gravity.

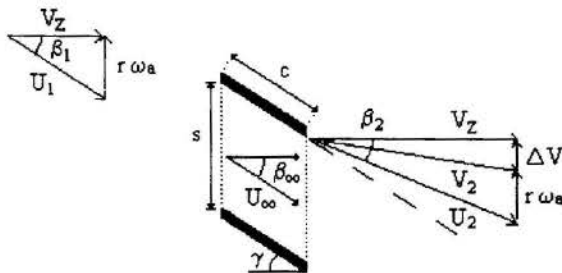


Figure 10 - Momentum approach for a constant blade angle γ

Applying the airfoil theory (Shepherd, 1969), the driving torque of any turbomachine may be obtained. If the blade surface drag is not the only retarding effect and is placed to the right hand side of the equation, the infinitesimal driving torque, for a turbine type flowmeter, will be given, by:

$$dT_d = \frac{1}{2}\rho V_z^2 c Z \left[\frac{2\pi K_0 \sin\delta}{\cos\beta_\infty} \right] r dr \quad (5)$$

where, K_0 is the cascade coefficient, c is the chord of the straight blade and δ ($\delta = \beta_1 - \gamma$) is the angle of incidence.

The outlet flow angle (β_2) differs from the blade angle (γ) due to the inability of the fluid to follow the blade. The actual value of β_2 is always difficult to be accessed. Theoretically, there are some approximate techniques to evaluate β_2 . Experimentally, one may measure it by using Laser Doppler Velocimetry techniques (LDV). At the present work an analytical process described by Schlichting, 1959, was used. The experimental analysis with LDV is still under way.

Thus, for the previous equation (Eq. 5), β_∞ is calculated as:

$$\tan\beta_\infty = \frac{1}{2}(\tan\beta_1 + \tan\beta_2) \quad (6)$$

where β_1 is the inlet flow angle. The difference between the blade angle γ and the inlet fluid angle β_1 is known as the angle of incidence δ . The blade angle of the present turbine prototype is $12.3^\circ \pm 1^\circ$.

In order to integrate equations 4 or 5 all over the radial coordinate r one must know V_z (mean axial velocity) and the rotational speed ω_a . These two variables were obtained from the calibration curve of the turbine prototype so, for any particular flowrate one may obtain the V_z and ω_a .

The retarding torques, presented in the right hand side of Eq. 1, are calculated using the analytical expressions developed by Blows (1981), Rubin et. al. (1965), Thompson and Grey (1970) and Tsukamoto and Hutton (1985) or experimentally, already presented in this paper.

- The blade surface drag torque T_s , was expressed by:

$$T_s = \int dT_d = \frac{1}{2} \int \rho V_z^2 c Z \left[\frac{C_D \sin\beta_\infty}{\cos^2\beta_\infty} \right] r dr \quad (7)$$

where the C_D is the total drag coefficient of the blades. The total C_D included the blade surface drag, the induced drag (Senoo, 1987) and the wake effect due to the trailing edge (Klein, 1977).

The wake effect is function of the energy loss thickness δ_{3H} , at the trailing edge. This loss thickness was assumed to be of the order of three time the size of the blade thickness for both sides of the blade (suction and pressure side). This assumption is supported due to the straight blade shape adopted in this turbine flow meter. This straight blade prototype has no cusp at the trailing edge.

- The rotor hub friction torque T_h , is expressed using the following expression presented by Thompson (1970):

$$T_h = \frac{1}{2} Z \rho V_z^2 C_D CS \cos \gamma \left[\left(\frac{q}{1+q} \right) \tan \gamma + \left(\frac{1}{1+q} \right) \tan \beta_1 \right] \left\{ 1 + \left[\left(\frac{q}{1+q} \right) \tan \gamma + \left(\frac{1}{1+q} \right) \tan \beta_1 \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} r_h \quad (8)$$

where q is function of the space-to-chord ratio (s/c) and defined as:

$$q = \frac{\pi K_0}{2s/c} \cos \gamma \quad (9)$$

Another expression for the T_h was used based on the skin friction for rough surface presented by Schlichting, 1960. The results obtained showed not much difference from the previous expression (Eq. 8).

- The disk surface slip drag between the rotor hub and the support T_f , is expressed by Eq. 10 (Favaretto, 1995):

$$T_f = \frac{2}{\Delta z} \pi \omega_a \mu (r_c^2 - r_e^2) (r_c - r_e) [r_e + 2/3(r_c - r_e)] \quad (10)$$

where μ is the absolute viscosity, r_c and r_e the radial coordinate of the hub and the shaft of the prototype rotor, respectively. Δz is gap between rotor hub and support.

- The retarding torque due to the blade tip clearance, T_{bt} , is given by Eq. 11 (Thompson, 1970):

$$T_{bt} = \frac{0,078}{2 R_e^{0,43}} \rho \omega_a^2 r_t^3 c t Z \quad (11)$$

where R_e is Reynolds number, r_t radial coordinate of the blade tip and t the thickness of the blade. The Reynolds number is function of the tip clearance Δr and defined as:

$$R_e = (\rho/\mu) \omega_a r_t \Delta r \quad (12)$$

Another expression may be used to evaluate the blade tip clearance torque, based on the journal bearing analogy proposed by some authors. The following expression (presented by Blows, 1981) was also tested with similar results of Eq. 11:

$$T_{bt} = 4\pi^2 \omega_a \mu c r_p^3 \cos \gamma / (r_p - r_t)^3 F_A \quad (13)$$

where r_p is the radius of the turbine meter case and F_A is the area factor, that is, a percentage of the tip area to the total case area.

- The bearing retarding torque T_{bt} , measured experimentally, was expressed by previous equation (Eq. 2).

- The mean magnetic pickup torque $T_p = \bar{T}_p$, is constant (that is independent on the rotational speed), and is given by the Eq. 3.

With the above expressions it is possible to calculate the right hand side of Eq. 1. Figure 11 shows a comparison between the driving torque, left hand side of Eq. 1, and the summation of the retarding torques. As one can see from this figure the maxi-

mum difference between the driving and retarding torque is about 10%. This difference, which is due to the analytical models adopted for the driving and retarding torques, remains as a challenge for improving this work in the near future.

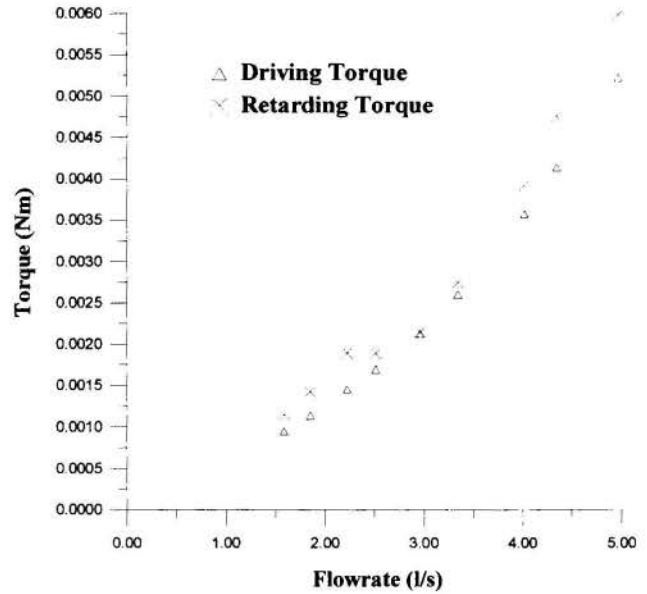


Figure 11 - Comparison between driving torque and retarding torques

PERFORMANCE ANALYSIS

The influence of the magnetic pickup on turbine meter performance was also analysed based on the calibration curves. The two different situations were studied: with and without the influence of the magnetic pickup. The calibration curves were obtained using the water test facility described by Ferreira et al. (1991). The test rig is an intermittent gravimetric calibration system for water flowmeters ranging from 0.1 up to 5 l/s with an uncertainty $\pm 0.5\%$ FS. The following figure (Fig. 12) presents the two calibration curves. In this figure, K_i (%) represents a percentage deviation coefficient from the meter factor \bar{K} (litres/pulse), as a function of the flow rate.

To eliminate the magnetic effect an optical pickup was developed using an infrared emitter/receptor device. The new pickup produced no detected retarding effect on the meter rotor.

From figure 12 it is apparent that the friction produced by the magnetic effect is important at the beginning of the calibration curve. The magnetic pickup caused a significant delay in the motion of the turbine meter. Therefore, without magnetic retarding torque, the turbine started running at much lower flow rate (0.73 l/s) than with the magnetic sensor (1.067 l/s). Thus, using an optical pickup, the "operational range" of this prototype increased from about 28%.

Assuming that the "usage flow range" of the prototype tested is the region of the calibration curve where the meter factor (K) lays within the linearity of $\pm 2.5\%$, is easy to see, from figure 12, that the useful flow range is smaller for the magnetic pickup than for the optical one.

The linearity of the calibration curve, apart from the beginning part, did not show significant changes. Although the flow range tested not included the whole range it is believed that the behaviour of the calibration curve would not be affected a high flow ranges. As was shown previously, the magnetic retarding torque is constant (independent on the rotational speed) and

the remaining retarding torques depend upon the rotational speed (N) or/and on the flow rate. Therefore, the greater is the flow rate the least significant is the magnetic effect.

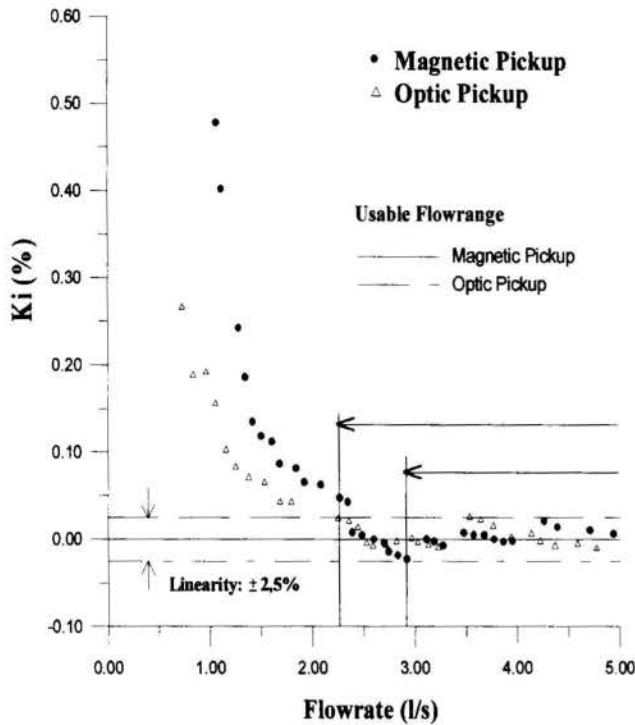


Figure 12 - Calibration Curves

CONCLUSION

The equilibrium equation presented by this analytical/experimental model showed reasonable good results comparing the right with the left hand side. A comparison for the driving torque of both theories, airfoil and momentum, presented some disagreements along the whole range tested. There are some reasons for this divergence: a) to assume V_2 constant, instead of an inlet velocity profile and b) to calculate the outlet flow angle β_2 , instead of measuring experimentally. These are the most important reasons, according to the authors.

The use of the magnetic pickup signal alters the turbine meter performance only in the beginning region of the calibration curve. This is important because affects the operational range and also the useful flow range. The substitution of the magnetic pickup for an optical or an RF pickup type will increase the flow range allowing measurements at much lower flow rates.

The perfect knowledge of the retarding effects of a turbine flow meter will allow to predict the performance and to improve the design of new prototypes.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors would like to thank the Turbomachinery and Flow Measurement Laboratory staff for the contributions received and CNPq for the financial support received in this project.

REFERENCES

- Blows, L.G., 1981, "Towards a better Turbine Flowmeter- International Conference on Advances in Flow Measurements Techniques" - paper L3, University of Warwick, UK, England.
- Favaretto, C. F. F., 1995, "Medição do Torque Resistivo em Turbinas de Medição", Internal Report, CNPq. LTMF - UFRGS, Porto Alegre.
- Ferreira, V. C. S., Souto, S.L.L. and Schuller, M.B., 1991, "Medidores de Fluxo: Obtenção da Curva de Calibração via Terminal Inteligente", XI COBEM, Proceedings, pp 49-52, S.Paulo.
- Ferreira, V. C. S., 1994, "Estudo Experimental do Atrito Mecânico em Turbinas de Medição", 10th Seminário de Instrumentação do IBP, Proceedings, pp 216-225, Porto Alegre.
- Klein, A., 1977, "Aerodynamics of Cascades". AGARD-AG-220, NATO, Verlag G. Braun.
- Rubin, M., Miller, R.W. and Fox, R.W., 1965, "Driving Torques in Theoretical Model of a Turbine Meter"- Journal of Basic Eng. Trans. ASME. pp 413-420.
- Schlichting, H., 1959, "Application of the boundary layer theory in turbomachinery", Trans. ASME, J. of Basic Engineering, 81, pp 543-551, NY.
- Schlichting, H., 1960, "Boundary Layer Theory", 4th ed. McGraw-Hill, New York.
- Senoo, Y., 1987, "Pressure Losses and Flow Field distortion Induced by tip Clearance of Centrifugal and axial Compressors". JSME, Int. Journal, Vol 30, No. 261, pp375-385.
- Shepherd, D.G., 1969, "Principles of Turbomachinery", 9th Ed. The Macmillan Company, Collier-Macmillan Canada, Ltd. Toronto, Ontario.
- Thompson, R.E. and Grey, J., 1970, "Turbine Flowmeter Performance Model"- Journal of Basic Eng., Trans. ASME, pp 713-722.
- Tsukamoto, H. and Hutton, S.P., 1985, "Theoretical Prediction of Meter Factor for a Helical Turbine Flowmeter", Fluid Control and Measurements - Meiji University, Tokyo.
- Ferreira, V.C.S. and Venzon, M.C. P., 1995, "Orifice Plate Behavior in Two Phase Flow (Air-Water)". COBEM-CIDIM/95, UFMG, Proceedings (Compact Disk), Belo Horizonte.



LIQUID FILM MOTION UNDER THE ACTION OF GRAVITATIONAL AND CENTRIFUGAL FIELDS.

**Rosa, Eugênio S.¹, Morandin, Marcelo L.¹, Dias, Silvio G.²,
França, Fernando A.¹**

¹Departamento de Energia - Faculdade de Engenharia Mecânica - UNICAMP
13.071-970, 6122 - Campinas - SP - Brazil
²PETROBRÁS



SUMMARY

A preliminary study on the liquid film motion under the action of gravitational and centrifugal fields is made. The film mass and momentum equations are developed using a boundary layer approximation. The momentum integral formulation is then employed to reduce the system of partial differential equations to a set of ordinary differential equations which are readily integrated using Runge-Kutta scheme. Numerical and experimental values are compared with each other to assess the model.

INTRODUCTION

Motion of fluids in the form of a liquid film, developing along solid walls of various shapes and orientations, occurs in quite a few processes and engineering systems. Applications may be found in thermal desalination and drying systems, nuclear reactors, gas absorption and desorption related problems, and gas-liquid separation systems. Since the pioneering work of Nusselt on the laminar film flow model, in 1916, a large number of theoretical and experimental studies have been reported concerning the film thickness distribution, film friction factors and heat transfer coefficients. Despite the efforts spent during the last seven decades, studies on the flow of film under the combined action of centrifugal and gravitational forces are not known, at least to the authors. This work addresses the topic of developing a hydrodynamic model to describe the flow of a film over the internal wall of a cylindrical chamber, under the combined action of the gravitational and centrifugal fields.

PROBLEM FORMULATION AND GOVERNING EQUATIONS

A falling liquid, driven by gravitational and centrifugal fields, results when a nozzle discharges a liquid over the inner wall of a cylindrical chamber in a tangential direction. The chamber curvature exerts a centrifugal field on the liquid film pulling it against the wall. The gravity force, acting along the axial direction, pushes the film downward. The fluid particles describe a spiral path as they move toward the bottom of the chamber.

A force balance on a fluid element shows the gravity and the pressure gradient pushing the film and the wall shear stresses opposing the fluid flow. These forces balance the momentum flux across the element boundaries, see Fig. 1 for reference. The momentum source in θ direction is given by the film inlet condition. The wall shear stress in θ direction dissipates the angular momentum until the fluid rotational velocity disappears. From this moment on, the liquid flows as a free falling film. The momentum flux along the axial direction, z , increases, but it is balanced by the axial wall shear stress component. The flow reaches the asymptotic limit of a free falling film when the rotational velocity vanishes and the axial velocity profile attains a fully developed state.

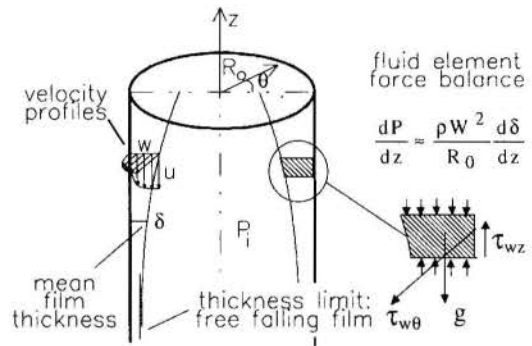


Figure 1 - Liquid film flowing inside a cylindrical chamber

The cylindrical coordinates are used as a natural choice given by the problem geometry. The radial, azimuthal and axial coordinates are, respectively, r , θ and z , see Fig. 1. The velocity components along the r , θ and z directions are, respectively, v , w and u . The film behavior is dominated by the irregular motion of the interface, where the liquid and the air alternate each other in a rapid succession, and is intrinsically time-dependent. As a first approach to the problem, the conservation equations are time averaged (Levich, 1962) and the flow is considered axisymmetric. This procedure eliminates the time dependent terms and any θ dependence. Furthermore, considering that the averaged film thickness, δ , is small compared to the cylinder radius, R_0 , a 'boundary layer' approximation is used. Neglecting the axial gradient of the shear stress term in relation to the radial gradient, the conservation equations are then simplified. Based on this order of magnitude analysis, the conservation equations, in conservative form, read:

$$\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} = 0, \tag{1}$$

$$-\frac{w^2}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial r}(vw) + \frac{\partial}{\partial z}(uw) = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial r}(\tau_{r\theta}) \right], \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial r}(uv) + \frac{\partial}{\partial z}(uu) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial r}(\tau_{rz}) \right] - g. \tag{4}$$

The variables ρ , τ and g refer to the liquid density, shear stress and gravity, respectively. The boundary conditions are given below:

- i) Initial conditions, specifying the velocities at a given position z_0 : $v(r, z_0) = v_0(r, z_0)$; $w(r, z_0) = w_0(r, z_0)$ and $u(r, z_0) = u_0(r, z_0)$.
- ii) No slip at the wall: $v(R_0, z) = w(R_0, z) = u(R_0, z) = 0$.
- iii) At the liquid interface ($r = R_0 - \delta$), there is no shear, the pressure is constant, $P = P_1$, and $v = U_1(z) \cdot \partial\delta/\partial z$, where $U_1(z)$ refers to the u velocity at the interface.

It seems unlikely that a full analytical solution of the equations (1) through (4) can be obtained. Although, the literature describes successful applications of the momentum integral method introduced by Kármán-Pohlhausen (Schlichting, 1960). Despite the giving approximate results, the use of an integral method is particularly encouraging in the present case, since the descendent liquid film velocity is in the direction of the pressure gradient. The method is applied patterning the pioneering work of Taylor (1949) on swirl atomizers. To obtain the conservation equations in the integral form, the set of equations (1) to (4) is integrated throughout the liquid film, which has a definite thickness δ . The integral form of the equations becomes:

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_{R_0-\delta}^{R_0} u \cdot dr = 0, \quad (5)$$

$$P(r, z) - P_1 = \rho \int_{R_0-\delta}^r \frac{w^2}{r} \cdot dr, \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_{R_0-\delta}^{R_0} uw \cdot dr = -\frac{\tau_{w\theta}}{\rho}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_{R_0-\delta}^{R_0} uu \cdot dr = -\frac{\partial}{\partial z} \int_{R_0-\delta}^{R_0} \left[\int_{R_0-\delta}^r \frac{w^2}{r} \cdot dr \right] \cdot dr - \frac{\tau_{wz}}{\rho} - g \cdot \delta \quad (8)$$

The pressure gradient, $\partial P/\partial z$, evaluated accordingly to Eq. (6), was substituted into the axial momentum equation, Eq. (8). Also, $\tau_{w\theta}$ and τ_{wz} represent the wall shear stress acting along the azimuthal and axial directions, respectively.

To apply the momentum integral method, it is necessary to assume an arbitrary form for the velocity distribution throughout the liquid film. This is achieved considering the u and w velocity components being represented by a product of functions of z and η only,

$$u = U(z) \cdot f(\eta), \quad w = W(z) \cdot h(\eta) \quad (9)$$

where $\eta = (R_0 - r)/\delta(r)$ and η varies from 0 to 1.

With the assumptions for the functions f and h , the variables U , W and δ , which are functions of z only, determine the behavior of the liquid film. Substituting Eq. (9) in Eqs. (5), (7) and (8), one obtains:

$$\frac{\partial(U \cdot \delta)}{\partial z} \cdot \chi = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} (UW\delta) \cdot \xi = -\frac{\tau_{w\theta}}{\rho}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} (U^2 \cdot \delta) \cdot \psi = \frac{1}{R_0} \frac{\partial}{\partial z} (W^2 \delta^2) \cdot \zeta$$

$$-\frac{\tau_{wz}}{\rho} - g \cdot \delta, \quad (12)$$

where the coefficients χ , ξ , ψ and ζ are:

$$\chi = \int_0^1 f \cdot d\eta, \quad \xi = \int_0^1 f \cdot h \cdot d\eta, \\ \psi = \int_0^1 f^2 \cdot d\eta, \quad \zeta = \int_0^1 \int_0^1 h^2 d\eta d\eta. \quad (13)$$

These coefficients are uniquely determined once assumptions for the velocity profiles are made but, a choice of an appropriate velocity profile for liquid films is not a closed issue. The literature lacks of experimental data and few results are presented for laminar flow of falling liquid films (Alekseenko, 1984) and theoretical proposals for turbulent profiles (Malamatenios, 1994). Despite these efforts, none of them reported results for films with two velocity components, as found in the present case. In this work a choice is made to the simplest power expressions which, satisfying the boundary conditions, can also represent typical turbulent velocity profiles,

$$f(\eta) = h(\eta) = \eta^{1/7}. \quad (14)$$

Substituting Eq. (14) into Eq. (13), the values of the constants are found to be $\chi = 0.88$, $\xi = 0.78$, $\psi = 0.78$ and $\zeta = 0.44$.

The wall shear stresses along the θ and z directions are determined assuming a resultant wall shear stress, $\tau_w = (\tau_{w\theta}^2 + \tau_{wz}^2)^{0.5}$ and an effective velocity $V = (U^2 + W^2)^{0.5}$ corresponding to τ_w (White, 1974). Furthermore, τ_w and V are related through a Blasius friction factor for a turbulent channel,

$$\frac{\tau_w}{\rho V^2} = 0.03 \cdot Re_\delta^{-0.25}, \quad (15)$$

where $Re_\delta = (V\delta)/\nu$

A limiting value of $Re_\delta > 1500$ is used as a transition criteria for the film turbulent regime (Levich, 1964). Using Eq. (15), $\tau_{w\theta}$ and τ_{wz} are written as:

$$\tau_{w\theta} = \tau_w \cdot \sin\phi, \quad \tau_{wz} = \tau_w \cdot \cos\phi. \quad (16)$$

where $\phi = \arctan(W/U)$.

The set of equations (10) to (12) describes the velocities and averaged thickness of the liquid film. It is solved numerically with the aid of the auxiliary equations defined through Eqs. (13) to (16). The integration routine employs a standard Runge-Kutta method and was implemented using the Mathematica® package (Wolfran, 1991).

EXPERIMENTAL APPARATUS AND MEASUREMENT TECHNIQUES

The experimental apparatus consisted of a cylindrical chamber made of transparent Plexiglas with an internal radius, R_0 , of 68 mm. The liquid is injected tangentially to the internal wall chamber through a nozzle. The nozzle centerline crosses the origin of the z axis. The working liquid, tap water, runs through a

closed pumping loop, where its flow rate and temperature are measured.

Three electrical probes spaced at 135, 120 and 105 degrees from each other measured the instantaneous interface position for three axial positions at 185 mm, 327 mm and 515 mm below the nozzle centerline. The average film thickness, $\bar{\delta}$ at each axial position, was obtained averaging the probe readings from different angular positions. Figure 2 shows the schematics of the test section and the probes locations. The probes could be displaced along the chamber radius, from the inner side of the wall towards the center. They sensed the phase surrounding its tip. The water, as a conducting liquid, closes the electrical path between the probe's tip and its stainless steel stem. When the tip is in the air, the circuit is open, otherwise it is closed.

As the probes are displaced toward the center, they reach the wavy interface region, where the liquid and the gas occurs in rapid succession. The three channel electronic circuit measured the sharp variation of the electrical signal and directed it to a data acquisition board driven by a PC-AT computer. The signal was then digitized and the local void fraction, $\alpha(r)$, was calculated, an approach used elsewhere (Guimaraes et al, 1993).

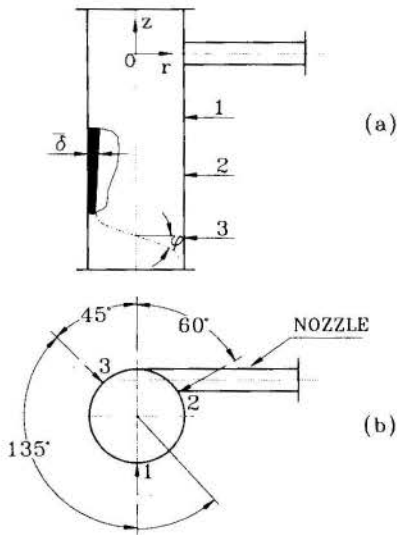


Figure 2 - Schematics of the test section and probe location

The void fraction is defined as the time average of the gas density function, $N_g(r,t)$,

$$\alpha[r] = \frac{1}{\Delta t} \int_t N_g(r,t) dt \quad (17)$$

where r is the radial position of the probe's tip and t is the time. The gas density function is the step function that indicates the occurrence of gas at the probe's tip: $N_g(r,t)=1$ when the gas surrounds the tip; otherwise, $N_g(r,t) = 0$.

Taking data at 7 to 12 discrete radial positions, starting from the inner chamber wall, it was possible to determine the interface probability distribution function, PDF. This PDF was fitted according to a normal distribution, which gave the best agreement. The time average film thickness δ was taken as the radial position where the PDF of the local void fraction is $\text{PDF}[\alpha(r)] = 0.5$. When

$$\text{PDF}[\alpha(r)] = 0.5 \Rightarrow \delta \pm \Delta\delta \text{ (95\%)}$$

The uncertainty of the time averaged film thickness, $\Delta\delta$, was associated to the interfacial waves periodicity. For the experimental purposes it was considered to be twice the standard deviation giving a 95% of confidence to the average value of δ . Figure 3 depicts the probe's set-up (a) and the resulting PDF (b). In Figure 3.b, the solid line represents the adjusted curve and the dots represent the experimental data.

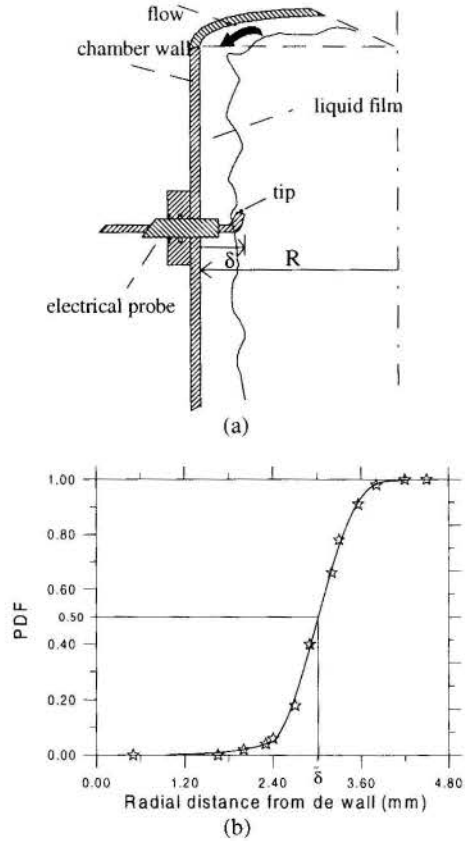


Figure 3 - (a) Probe's set-up and (b) resulting PDF

The flow direction was measured employing wall tufts. A cotton thread was used to visualize the flow and measure its direction. The thread was attached to the probe stem, next to the chamber wall, and followed the liquid stream. The deviation of the thread inclination regarding the horizontal direction was then measured at each probe location.

The data were taken for one liquid mass flow rate (tap water, average temperature 20°C), of 2.3 kg/s. Nearly 80 experimental points were acquired to render the three averaged film thickness and flow angles corresponding to the axial positions of 185 mm, 327 mm and 515 mm below the nozzle centerline.

EXPERIMENTAL RESULTS AND MODELING COMPARISON

The experiments were run for mass flow rate of 2.3 kg/s. The values of the variables directly measured during the experiments (film thickness δ and flow direction ϕ) are shown in Table 1. In Table 2 are presented the averaged values of δ and ϕ for each axial position together with the U and W velocities, resulting from the mass balance and vector decomposition. The uncertainty of each variable follows its averaged value. Concerning the film thickness, the uncertainty reflects the wavy nature of the interface. When measuring the flow direction, on the other hand,

the uncertainty results from the intrinsic subjectivity of the direct visual inspection.

Table 1 - Experimental data: film thickness and flow direction for three angular positions and three axial locations.

Probe #	δ (mm)			$\varphi \pm 5$ (degrees)		
	1	2	3	1	2	3
Z (mm)						
-185	2.5±0.8	3.0±.8	2.2±0.6	27	35	25
-327	2.3±0.6	2.6±1.0	3.2±0.8	40	40	40
-515	2.8±1.0	2.6±1.0	2.8±1.2	45	49	45

Table 2 - Averaged values of film thickness, flow direction, and azimuthal and axial velocities at three axial locations.

Z (mm)	$\bar{\delta}$ (mm)	$\bar{\varphi} \pm 3$ (degree)	\bar{W} (m/s)	\bar{U} (m/s)	Re_{δ}	δ/R_0
-185	2.6±0.4	29	3.8±0.3	2.1±0.3	11300	0.04
-327	2.7±0.5	40	2.4±0.4	2.0±0.4	8400	0.04
-515	2.7±0.6	46	1.9±0.5	2.0±0.5	7500	0.04

Table 1 shows a non uniform film thickness distribution along the θ direction. This lack of azimuthal symmetry decreases as the axial distance from the nozzle increases. The tendency to uniformization is due to the radial pressure gradient, nevertheless this behavior contradicts one of the hypothesis of the numerical model. The lack of axis-symmetry reflects, consequently, on the δ averaged value for a z location, as well as on its uncertainty, as shows Table 2. Concerning the flow direction, one observes a similar behavior of the experimental data. The non-uniform behavior along θ is due to the single liquid injection point on the cylindrical chamber. In fact, the flow at the coordinate $z = 0$ is intrinsically non-symmetric.

The others model's premises are readily satisfied. The film thickness to cylinder radius ratio is 0.04 ensuring the 'boundary layer' approximation. The film Reynolds number, Re_{δ} , spanned between 11300 to 7500, well above the laminar transition limit of 1500, see Table 2. The experimental data of Table 2 and the model results are presented in Figures 4 and 5.

In Figure 4, the experimental data on film thickness and flow direction are shown in conjunction with the results calculated by the model. The film thickness and the flow direction at the first measuring station are input in the model as initial values. Hence, data and model coincide at that position. Regarding the film thickness, it is worthwhile to notice that the model predicts negative slope for the curve and the experimental data do not follow the same trend. In fact, it remains nearly constant, within ± 0.05 mm, while the model approaches the asymptotic limit of a free falling film. These deviations are attributed to both, experimental and modeling shortcomings. The experimental deficiency is mainly related to the lack of axis-symmetry and to modeling simplifications. The model does not take into account neither the wave structure of the interface nor the surface tension effects on the pressure field. Despite of that, one has to stress that the experimental and numerical results still lie within the uncertainty limit of the film thickness measurement. Focusing now on the flow direction, the experimental data and model exhibits the same behavior. As the axial distance increases, the flow angle also increases, indicating that the velocity ratio \bar{U}/\bar{W}

increases. The velocity component W decreases continuously under the action of the shear stress, until vanishing.

Figure 5 shows the average axial (\bar{U}) and tangential (\bar{W}) velocities, as calculated from a mass balance and a vector decomposition, respectively. The solid lines represent the values as delivered by the model. Referring to \bar{W} , the model and experimental data exhibit similar behavior. On the other hand, the experimental data for the \bar{U} are nearly constant, within ± 0.05 m/s, throughout the range of the experimental points. The model predicts a positive slope. This discrepancy results from the propagation of the uncertainties of the film thickness measurements: \bar{U} result from the ratio between the volumetric flow rate and the flow area (the pipe perimeter times δ). Despite of that, the model results lie within the uncertainty limits of the experimental data.

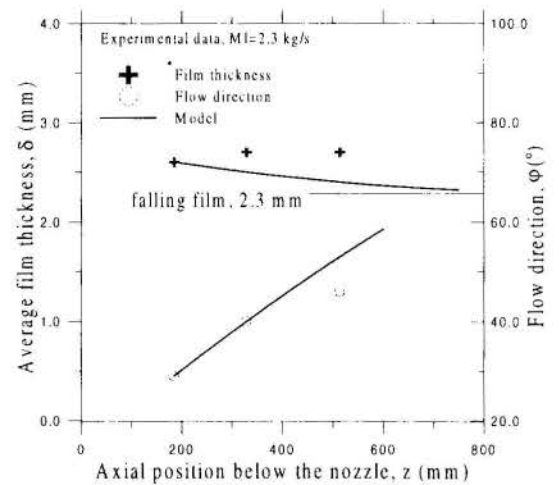


Figure 4 - Averaged film thickness and flow direction: experimental and predicted values

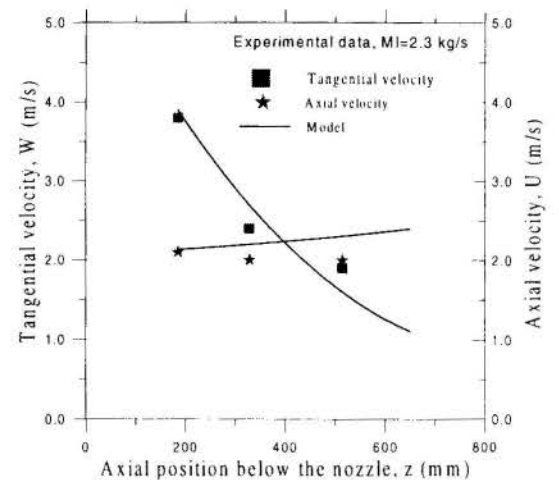


Figure 5 - Averaged axial and azimuthal velocities: experimental and predicted values

CONCLUSIONS

This preliminary study on the liquid film motion under the action of gravitational and centrifugal fields discloses a notable mechanism of momentum source along the axial direction: the pressure gradient due to the rate of change of the film thickness

along z direction. This momentum source occurs by the existence of the fluid rotational velocity and produces, besides the gravity force, an extra acceleration term in the liquid film.

The boundary layer approximations used to derive the conservation equations reveals the coupling among the θ , z momentum equations and the mass conservation. They show the basic mechanisms for film distribution and have proved to be consistent with the physics of the problem, revealing: film thickness, flow direction and the axial (U) and azimuthal (W) velocities along the z axis. The solutions exhibited convergence to the asymptotic limit where W vanishes and the film behaves as a free falling film.

The model and the experimental data exhibited agreement in some of the variables predicted and measured. The gap between the experimental and numerical results, in absolute terms, stayed less than 0.5 mm for film thickness, 5 degrees for flow direction and 0.2 m/s for both, U and W velocities. These disagreements proved to be hard to solve on the experimental hardware. Nonetheless the predicted values were always within the uncertainties of the experiment. The gap between the experimental and numerical results is attributed mainly to the lack of axis-symmetry in the flow.

REFERENCES

- Alekseenko, S.V., Nakoryakov, V.E., and Pokusaev, B.G., "Wave formation on vertical falling liquid films", *Int. J. of Multiphase Flow*, Vol. 11, n.5, pp. 607-627, 1984.
- Guimaraes, P.E., Pedras, M.J. and França, F.A., "The characterization of the flow reversal phenomenon in vertical concurrent annular flow", *Proc. 6th Int. Conference Multiphase Production*, BHRG, France, 1993.
- Levich, V. G., "Physicochemical Hydrodynamics", Prentice Hall, 1962.
- Malamatenios, C, Giannakoglou, K.C. and Papailiou, K.D., "A coupled two-phase shear layers/liquid film calculation method. Formulation of the physical problem and solution algorithm", *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 20, n.3, pp. 593-612, 1994.
- Nusselt, W., "Die Oberflächen Kondensation des Wasserdampfes", *Zeitschrift Verein Deutscher Ingenieure*, Vol. 60, pp. 541-546 and 569-575, 1916.
- Schlichting, H., "Boundary Layer Theory", McGraw Hill, 1960.
- Taylor, G. I., "The boundary layer in the converging nozzle of a swirl atomizer", *Quart. J. Mech. and Applied Math.*, vol III, part 2, pp. 129 -139, 1949.
- White, F.M., "Viscous Fluid Flow", 2nd ed., McGraw Hill.
- Wolfran, S., "Mathematica - A system for doing mathematics by computer", Addison Wesley, 1991.



**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 PAULÍNIA (REPLAN)**



Luciano Fernando dos Santos Rossi¹ e Antonio Carlos Bannwart²

1 - DAMEC / - CEFET-PR 80230-901 Curitiba - PR - Brasil

2 - DE / FEM / - UNICAMP 13081-970 - Campinas - SP - Brasil

RESUMO

Este estudo analisa a etapa de pré-aquecimento da carga de um reator catalítico, à luz da Metodologia "Pinch" de recuperação de energia em redes, e da Programação Matemática, em especial a formulação do Transporte da Programação Linear. Objetiva-se a otimização do processo de craqueamento catalítico minimizando o consumo energético da unidade e o número de equipamentos térmicos, buscando-se a melhor integração energética para o processo.

INTRODUÇÃO

Esta análise aborda o estudo de caso da otimização da etapa de pré-aquecimento, da carga do reator catalítico da refinaria de petróleo de Paulínia, da PETROBRÁS (REPLAN). Nessa etapa produtiva, a carga do reator catalítico (a corrente de gás-óleo) deverá alcançar um determinado nível de temperaturas (273°C), para poder entrar no reator da unidade de craqueamento. Para tanto, dispõem-se de correntes quentes de processo que transferem energia ao gás-óleo. Entretanto, existe a necessidade de uma transferência adicional de energia à carga, e para isto dispõem-se de um forno na unidade de craqueamento. Este trabalho pretende minimizar a intervenção do forno, no processo, fazendo uso de conceitos da "Metodologia Pinch", de recuperação de energia em redes, que irá assegurar a obediência ao Segundo Princípio da Termodinâmica. Isto é conseguido através do Método dos intervalos de temperatura (Linnhoff and Flower, 1978), utilizando como parâmetro chave, a menor diferença de temperaturas observada na rede. A partir deste ponto, mostra-se que o problema originalmente apresentado pode ser também formulado através da Programação Linear. Através deste aspecto, resolve-se o problema da máxima recuperação energética (mínima intervenção do forno). Em seguida, buscar-se-á encontrar o menor número de equipamentos térmicos que permita alcançar a máxima recuperação energética, para o processo. Esta busca caracteriza um problema adequado à Programação Linear Inteira. Esta etapa é satisfatoriamente resolvida, através da relaxação do problema linear inteiro a um problema linear. Como resultados, são apresentados a intervenção mínima do forno, e as necessidades de água de resfriamento para a unidade, além do menor número de trocadores de calor necessários ao mínimo consumo energético para as condições observadas na REPLAN, e para outras condições propostas, da menor diferença de temperaturas da rede. Os resultados obtidos para o consumo de utilidades, principalmente a intervenção do forno, e para o número de equipamentos mostram uma significativa redução do consumo energético do processo de pré-aquecimento do gás-óleo, a partir da melhor integração energética da planta.

DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Uma parte da unidade de craqueamento catalítico da refinaria de Paulínia, dispõem de uma bateria de trocadores de calor para o aquecimento da carga de gás-óleo, afim de que esta alcance a temperatura requerida (273 °C), para entrar no reator catalítico. Para a etapa de aquecimento, são utilizadas 5 correntes quentes de produtos, provenientes de várias partes da refinaria, que necessitam transferir energia afim de reduzirem suas temperaturas finais, e para isso transferem energia ao gás-óleo. Um forno está colocado antes do reator catalítico, para fornecer à carga de gás-óleo, um complemento energético no caso de a troca de energia com as 5 correntes não levá-la à temperatura pré-reator desejada. Uma representação esquemática da unidade é apresentada na Fig. 1.

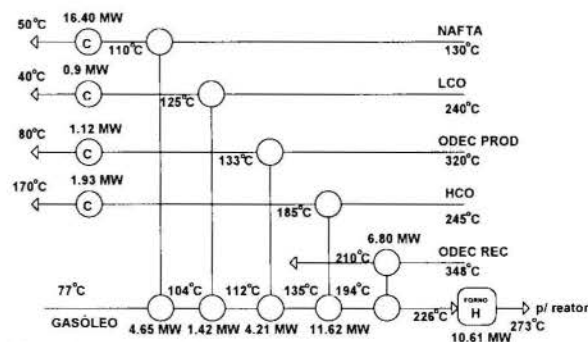


Fig. 1 Esquema da bateria de pré-aquecimento, na Unidade de craqueamento catalítico da REPLAN.

Na unidade real, descrita pela Fig.1, percebe-se que a necessidade de intervenção do forno é de 10,61 MW. Além disto, a carga térmica envolvida com as utilidades de resfriamento, é de 20,35 MW.

É exatamente esta troca térmica entre as 5 correntes quentes e a corrente de gás-óleo, que se procurará otimizar para reduzir o consumo energético da Unidade.

Os dados térmicos para todas as correntes de processo, encontram-se na Tabela 1, onde Cp representa a capacidade calorífica média da fração do petróleo, em sua faixa de temperaturas.

O MÉTODO DOS INTERVALOS DE TEMPERATURA

A Metodologia "Pinch" de recuperação de energia em redes (Linnhoff and Flower, 1978) tem como base, descrever o problema térmico através de intervalos de temperaturas, entre os quais poderá haver transferência de energia entre as correntes de processo quentes e frias. Porém, deverá ser assegurado que a transferência ocorra, sempre em obediência ao Segundo Princípio da Termodinâmica, ou seja, uma corrente de processo quente que esteja em um intervalo de temperaturas inferior ao de uma corrente fria, nunca poderá transferir energia àquela, por ferir ao Segundo Princípio.

Tabela 1. Dados Térmicos para o aquecimento da Carga do reator catalítico, na REPLAN.

Correntes	T _i (°C)	T _f (°C)	C _p ($\frac{kW}{^{\circ}C}$)	d ($\frac{20^{\circ}C}{4^{\circ}C}$)	Q ($\frac{m^3}{dia}$)
Gasóleo	77.	273.	204,4	0,93	7800
Nafta	130.	50.	274,1	0,75	13680
LCO	240.	40.	11,7	0,97	520
Odec Prod	320.	80.	22,3	1,10	950
HCO	245.	170.	183,1	1,00	5200
Odec Rec	348.	210.	50,1	1,10	1800

Essa obediência é conseguida, introduzindo-se um parâmetro denominado ΔT mín representando a menor diferença de temperaturas da rede. Tomando-se as temperaturas terminais das correntes quentes, subtrai-se o valor de ΔT mín. Às temperaturas terminais das correntes frias adiciona-se o valor de ΔT mín. Todas as temperaturas são então ordenadas, eliminando-se repetições. Esse procedimento é conhecido como o Método dos Intervalos de Temperatura (Linnhoff and Flower, 1978), e representa uma maneira simples de se considerar a Segunda Lei da Termodinâmica, no problema da análise da integração energética.

Em cada intervalo de temperatura, pode-se transferir energia de correntes quentes para correntes frias, uma vez que garante-se, com a disposição em intervalos (ver Fig. 2, onde i representaria uma corrente de processo fria e j uma corrente quente), a existência de uma adequada força motriz para o processo de transferência de energia, sempre satisfazendo à Segunda Lei da Termodinâmica.

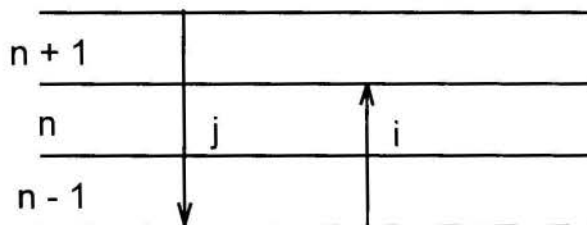


Fig. 2 Representação dos Intervalos de Temperatura, da Metodologia "Pinch".

A OTIMIZAÇÃO ENERGÉTICA E A PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA - O ALGORITMO DO TRANSPORTE

O problema do pré-aquecimento da carga de gasóleo, pode ser formulado, também, como um problema de Programação

Matemática. Para tanto, deve-se perceber que as transferências de energia dentro do processo, podem ser similares ao transporte de uma certa atividade, de um centro fornecedor, até um centro consumidor. Essa atividade a ser "transportada" no problema em questão, é a energia. Os "centros fornecedores" dessa atividade serão as correntes de processo quentes, que têm possibilidade de transferir energia para reduzirem suas temperaturas finais. De forma semelhante, o "centro consumidor" de energia será a corrente de gasóleo que precisará alcançar uma temperatura especificada, para entrar no reator catalítico.

Assim, o processo de pré-aquecimento do gasóleo, será transformado num problema de transporte de uma atividade, que neste caso é a energia. E isto permitirá caracterizá-lo como um problema de Programação Linear, adequado à Formulação do Transporte.

Deve-se agora, tentar quantificar a capacidade de transferência de energia entre as correntes de processo, para cada intervalo de temperatura. Pode-se imaginar que as correntes de processo foram subdivididas em n partes, onde n é igual ao número de intervalos de temperatura, obtidos. Dessa forma, cada sub-corrente é caracterizada por dois sub-índices sendo o primeiro, o que identifica a corrente de origem e o segundo o intervalo de temperatura analisado. Assim, pode-se escrever para o cálculo das necessidades de aquecimento da corrente fria i , no intervalo de temperatura k , $a_{i,k}$:

$$a_{i,k} = C_{p,i,k} (T_{i+1} - T_i) \quad (1)$$

onde $C_{p,i,k}$ representa a capacidade calorífica média da corrente fria i , no intervalo k ($kW \cdot ^{\circ}C^{-1}$). De um modo semelhante, o cálculo das necessidades térmicas das correntes quentes j , no intervalo de temperatura l , $b_{j,l}$ pode ser calculado por:

$$b_{j,l} = C_{p,j,l} (T_{j+1} - T_j) \quad (2)$$

onde $C_{p,j,l}$ representa a capacidade calorífica média da corrente quente j , no intervalo de temperatura l . Cada sub-corrente fria $c_{i,k}$ deverá satisfazer sua necessidade energética, trocando energia com sub-correntes quentes $h_{j,l}$ situadas em intervalos de temperatura não inferiores ao seu ($k \leq l$) ou trocando energia diretamente com as utilidades quentes (no caso, recebendo energia do forno). Analogamente, cada sub-corrente quente $h_{j,l}$ deverá transferir energia para sub-correntes frias situadas em intervalos de temperatura inferiores ou iguais ao seu, ou transferir energia diretamente para as utilidades frias (para tanto, dispõem-se de água de resfriamento à pressão e temperatura ambiente).

A formulação do problema do transporte, quando aplicada ao processo de pré-aquecimento do gasóleo, seguirá a mesma notação empregada na literatura (Cerdeira et alii, 1983). No modelo do transporte, o objetivo é minimizar o uso da energia proveniente das utilidades de processo (no caso, água de resfriamento e energia para aquecimento, proveniente da intervenção do forno), uma vez que deveremos necessariamente incorrer em custos. Desta forma, a função objetivo representativa do problema do pré-aquecimento do gasóleo pode ser escrita como:

$$\text{Minimizar } \sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^H \sum_{k=1}^L \sum_{l=1}^L C_{i,k,j,l} q_{i,k,j,l} \quad (3)$$

Sujeito às seguintes restrições:

$$\sum_{j=1}^H \sum_{l=1}^L q_{ik,jl} = a_{i,k} \quad , \quad i=1,\dots,C \quad ; \quad k=1,\dots,L \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^C \sum_{k=1}^L q_{ik,jl} = b_{j,l} \quad , \quad j=1,\dots,H \quad ; \quad l=1,\dots,L \quad (5)$$

onde:

$$q_{ik,jl} \geq 0 \quad , \quad \forall (i, j, k, l) \quad (6)$$

e,

$$C_{ik,jl} = \begin{cases} M, & \text{para } k > l \\ 1, & \text{para } j = H \text{ e } i \neq C \\ 1, & \text{para } j \neq H \text{ e } i = C \\ 0, & \text{em todos os outros casos} \end{cases} \quad (7)$$

A função objetivo do problema da REPLAN é representada por (3), e direciona o processo de otimização no sentido de minimizar a transferência de energia, entre correntes de processo (quentes ou frias) e utilidades (água de resfriamento ou a intervenção do forno). A equação (4), significa que a corrente de processo fria i , no intervalo de temperatura k , requer uma demanda energética ($a_{i,k}$), que deve ser suprida pela transferência de energia das correntes quentes j , ($j=1,\dots,H$) nos intervalos de temperatura l , tais que $l \geq k$.

A equação (5), refere-se à capacidade da corrente quente j , no intervalo de temperatura l , em transferir energia para as correntes frias i , ($i=1,\dots,C$) nos intervalos de temperatura k , tais que $k \leq l$. A equação (6) refere-se a não negatividade das variáveis de decisão (no caso, o fluxo de calor transferido entre correntes). Por fim, a equação (7) refere-se aos coeficientes de custo da função objetivo. O fato de se desejar priorizar as trocas de energia entre as correntes de processo se faz notar, pela escolha de um custo unitário nulo quando se prioriza a troca térmica entre correntes de processo.

Como os somatórios em (3), estendem-se a todas as correntes e todos os intervalos de temperatura, torna-se necessário precaver-se contra a possibilidade de se tentar transferir energia entre uma corrente quente e uma corrente fria, estando a primeira em um intervalo de temperatura inferior ao da segunda (o que fere a Segunda Lei da Termodinâmica). Isto é feito pela imposição ao modelo, de um custo extremamente elevado (M). Em outras palavras, com esse valor de M , para as associações (ou "matches") proibidos, força-se o modelo a procurar uma solução que evite esses "caminhos" extremamente custosas.

A partir da definição do modelo, e de seu domínio (as equações de restrição), busca-se a solução do problema. O algoritmo Simplex é empregado nessa tarefa. Entretanto, esse procedimento requer uma solução básica inicial factível para iniciar a busca da solução ótima. Os problemas energéticos, quando tratados através da formulação do transporte, e respeitando ao Segundo Princípio da Termodinâmica, apresentam a solução básica inicial factível já sendo a solução ótima (ou muito próxima à ela) (Cerdeira *et alii*, 1983). Utilizou-se nesta análise a Regra do Canto Noroeste [6], para a obtenção da solução básica inicial factível.

A solução ótima para o processo de aquecimento da carga de gasóleo, foi encontrada como sendo de 5,9 MW térmicos, para a intervenção necessária do forno, além da redução na necessidade de resfriamento, para 16,55 MW, quando $\Delta T_{\min} = 12^\circ\text{C}$.

Conhecendo-se os valores mínimos para a energia a ser suprida à unidade, parte-se para a obtenção do menor número de equipamentos térmicos (no caso trocadores de calor ou "coolers") que atenda a esse mínimo energético.

O NÚMERO MÍNIMO DE EQUIPAMENTOS TÉRMICOS QUE REALIZA A MÁXIMA RECUPERAÇÃO ENERGÉTICA - O PROBLEMA LINEAR INTEIRO.

A função objetivo neste caso, deve focar a minimização das associações possíveis entre as correntes de processo (alocação de equipamentos térmicos: permutadores ou coolers). Cada associação será representada pela variável $y_{i,j}$, onde i é representativo das correntes frias ($i = 1,\dots,C$, onde C indica as utilidades de processo para resfriamento); e j é representativo das correntes quentes de processo, ($j = 1,\dots,H$, onde H indica utilidades de processo para aquecimento).

A variável $y_{i,j}$ é uma variável inteira do tipo binário, assumindo o valor unitário quando uma associação puder ser efetuada (ou seja, quando puder ser colocado um trocador de calor realizando a troca térmica entre uma corrente quente j e uma corrente fria i), e o valor nulo quando a associação é infactível.

Logo, pode-se escrever o novo modelo de otimização, como:

$$\text{Minimizar} \quad \sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^H y_{i,j} \quad (8)$$

Sujeito a:

$$\sum_{j=1}^H \sum_{l=1}^L q_{ik,jl} = a_{i,k} \quad , \quad i = 1,\dots,C \quad ; \quad k = 1,\dots,L \quad (9)$$

$$\sum_{i=1}^C \sum_{k=1}^L q_{ik,jl} = b_{j,l} \quad , \quad j = 1,\dots,H \quad ; \quad l = 1,\dots,L \quad (10)$$

com:

$$q_{ik,jl} \geq 0 \quad , \quad \forall (i, j, k, l) \quad (11)$$

$$\sum_{l=1}^L b_{H,l} = (b_H)_{\min} \quad (12)$$

$$\sum_{k=1}^L a_{C,k} = (a_C)_{\min}$$

onde $(b_H)_{\min}$ representará a mínima quantidade de energia transferida pela utilidade quente às correntes frias do processo, a qual é obtida quando da resolução do P.L. correspondente à máxima recuperação energética ($b_H = 5,9$ MW, no caso); da mesma forma, $(a_C)_{\min}$ representará a mínima energia transferida

das correntes quentes à utilidade fria, também obtida na etapa da otimização da recuperação energética ($a_C = 16,6$ MW, no caso); e ainda:

$$\sum_{k=1}^L \sum_{l=k}^L q_{ik,jl} \leq U_{i,j} y_{i,j} \quad \text{para} \begin{cases} i = 1, 2, \dots, C \\ j = 1, 2, \dots, H \end{cases} \quad (13)$$

e com

$$y_{i,j} = 0 \text{ ou } 1 \quad \text{para} \begin{cases} i = 1, 2, \dots, C \\ j = 1, 2, \dots, H \end{cases} \quad (14)$$

onde $U_{i,j}$ representará a máxima quantidade de energia possível de ser transferida entre uma corrente quente h_j e uma corrente fria c_i ;

$U_{i,j}$ pode ser obtido através da aplicação da *regra do canto noroeste* (Luenberger, 1984) a um "tableau" de um problema de transporte padrão e que inclui apenas as "sub-correntes" quentes ($h_{j,l}$ que representa as contribuições de energia, da corrente h_j , nos intervalos de temperatura $l = 1, \dots, L$) e as "sub-correntes" frias ($c_{i,k}$ que representa as demandas de energia, da corrente c_i , nos intervalos de temperatura $k = 1, \dots, L$) (Cerdea *et alii*, 1983).

A RELAXAÇÃO DO PROBLEMA LINEAR INTEIRO

A solução para o problema da rede de trocadores de calor como estabelecido anteriormente, não é tão simples de ser efetuada sem um procedimento computacional especial. Entretanto, pode-se mostrar que existe a possibilidade de se transformar, sob certas condições, o P.L.I. em um P.L.I. relaxado, ou seja abrindo-se mão da integralidade das variáveis y , uma vez tendo um limitante para a transferência de calor entre as correntes de processo (Cerdea *et alii*, 1983). Dessa forma, toda solução para o P.L.I. será também uma solução para o P.L.I. relaxado, mas o contrário não necessariamente é verdadeiro. Em outras palavras, a relaxação do P.L.I. proporciona um limitante inferior para o problema considerando a integralidade. Este procedimento também gera um problema bem mais simples de ser resolvido.

Da literatura (Cerdea *et alii*, 1983), adota-se que $(q_{ik,jl}, \bar{y}_{i,j})$ é uma solução ótima para o problema estabelecido, apenas se:

$$\sum_{k=1}^L \sum_{l=k}^L q_{ik,jl} = U_{i,j} \bar{y}_{i,j} \quad \text{para} \begin{cases} i = 1, 2, \dots, C \\ j = 1, 2, \dots, H \end{cases} \quad (15)$$

Se $y_{i,j} = 0$ todos os $q_{ik,jl}$ para $k = 1, \dots, L$ e $l = k, \dots, L$ são nulos, e a expressão acima permanece válida. Por outro lado, se $y_{i,j} > 0$ e

$$\sum_{k=1}^L \sum_{l=k}^L q_{ik,jl} < U_{i,j} \bar{y}_{i,j} \quad (16)$$

então, como a restrição de integralidade foi retirada, $\bar{y}_{i,j} = y_{i,j}$. Desta maneira, o valor da função objetivo do problema relaxado é também diminuído. O valor ótimo então, ocorre quando o problema linear inteiro não relaxado tem como restrições, um conjunto de igualdades estritas. Este teorema foi proposto por Balinski em 1961 para o chamado Problema de Transporte de custos fixos, do qual o modelo de P.L.I. do mínimo número de equipamentos é um caso especial (Cerdea *et alii*, 1983). Então:

$$\bar{y}_{i,j} = \frac{1}{U_{i,j}} \sum_{k=1}^L \sum_{l=k}^L q_{ik,jl} \quad \text{para} \begin{cases} i = 1, 2, \dots, C \\ j = 1, 2, \dots, H \end{cases} \quad (17)$$

Essa expressão assegura que os valores de $\bar{y}_{i,j}$ serão nulos quando o "match" (c_i, h_j) não é implementado pela rede de trocadores. Substituindo $\bar{y}_{i,j}$ pela expressão (17), a função objetivo do problema linear inteiro relaxado pode ser escrita como:

$$\text{Minimizar} \sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^H \frac{1}{U_{i,j}} \sum_{k=1}^L \sum_{l=k}^L q_{ik,jl} \quad (18)$$

Adotando valores muito elevados para os coeficientes de custo da função objetivo (para se evitar associações proibidas do ponto de vista termodinâmico), o somatório pode ser estendido à todas as rotas possíveis.

Agora, o problema linear inteiro relaxado pode ser escrito como um problema de transporte passível de ser resolvido pelos métodos da Programação Linear, como o método Simplex:

$$\text{Minimizar} \sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^H \sum_{k=1}^L \sum_{l=1}^L C_{ik,jl} q_{ik,jl} \quad (19)$$

Sujeito a:

$$\sum_{j=1}^H \sum_{l=1}^L q_{ik,jl} = a_{i,k} \quad , \quad i = 1, \dots, C \quad ; \quad k = 1, \dots, L \quad (20)$$

$$\sum_{i=1}^C \sum_{k=1}^L q_{ik,jl} = b_{j,l} \quad , \quad j = 1, \dots, H \quad ; \quad k = 1, \dots, L \quad (21)$$

com:

$$q_{ik,jl} \geq 0 \quad , \quad \forall (i, j, k, l) \quad (22)$$

e onde

$$C_{ik,jl} = \begin{cases} M, & \text{se } i = C \text{ e } j = H \text{ ou se } k > l \\ \frac{1}{U_{i,j}}, & \text{em todos os outros casos} \end{cases} \quad (23)$$

De acordo com a literatura (Cerdea *et alii*, 1983), Tiplitz, em 1973, sugeriu que uma solução muito satisfatória para o problema P.L.I. relaxado, pode ser derivada da solução ótima obtida do problema de transporte fazendo-se:

$$\begin{aligned} y_{i,j} &= 1, & \text{se} & \sum_{k=1}^L \sum_{l=1}^L q_{ik,jl} > 0 \\ \text{ou} & & & \\ y_{i,j} &= 0, & \text{se} & \sum_{k=1}^L \sum_{l=1}^L q_{ik,jl} = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

No problema analisado, foram encontrados nove equipamentos térmicos, como o mínimo número para o processo. Destes, cinco fazem a transferência de energia entre correntes de processo (são permutadores), três são resfriadores ("coolers"), para resfriar as correntes de processo quentes e 1 associação refere-se à carga térmica fornecida pelo forno, à corrente de gásóleo.

Em seguida, arbitrou-se um conjunto de valores de ΔT_{\min} para avaliar-se o comportamento do consumo energético da rede. Para cada valor de ΔT_{\min} proposto, a solução foi encontrada através da formulação do Transporte. Os valores obtidos encontram-se na Tabela 2, onde Q_H e Q_C representam respectivamente, a intervenção energética do forno, para aquecer a carga de gásóleo, e o consumo energético em termos de água de resfriamento.

Tabela 2 - Utilidades consumidas pela rede, para valores de ΔT_{\min} arbitrados

ΔT_{\min} ($^{\circ}C$)	Q_H (MW)	Q_C (MW)
8	5,0	15,8
12	5,9	16,6
16	6,9	17,3
20	7,8	18,0
24	8,7	18,8
28	9,6	19,5
32	10,6	20,2
36	11,4	20,9
40	12,3	21,6

O objetivo de se propor diferentes valores de ΔT_{\min} , é o de se conhecer, em outras condições de operação da rede (Rossi e Bannwart, 1994), quais as necessidades energéticas envolvidas.

Para cada valor de ΔT_{\min} proposto, formulou-se novamente um modelo visando ao menor número de equipamentos térmicos. Sempre acoplando Q_H e Q_C , ao conjunto de restrições do modelo linear inteiro (posteriormente relaxado) obteve-se, sempre, um conjunto solução de 9 associações factíveis para a rede (5 permutadores de calor, 3 resfriadores e 1 associação representativa da intervenção do forno).

CONCLUSÕES

Em comparação com a unidade real, o número de resfriadores ("coolers") foi reduzido de quatro para três. Pode-se notar que a metodologia envolvida na resolução desse problema específico, pode ser de grande auxílio e estímulo para o pessoal envolvido com a reestruturação da unidade ou mesmo, com o projeto de uma nova.

Comparando-se a intervenção energética do forno, para o aquecimento final da carga de gásóleo, obtido através da Formulação do Transporte e o valor real observado na planta, percebe-se uma substancial redução na forma de energia de aquecimento, da ordem de 44% (Rossi, 1995).

O processo de aquecimento da carga de gásóleo, mostrou-se adequado ao tratamento do problema através da formulação do Transporte. Uma vez estando o problema termodinamicamente bem posto (respeitando-se à Segunda Lei da Termodinâmica), a Regra do Canto Noroeste pode ser empregada para fornecer uma solução básica inicial factível, que pode ser tomada como a própria (ou muito próxima dela) solução ótima, tanto no caso da máxima recuperação energética, quanto no caso da minimização do número de equipamentos térmicos.

BIBLIOGRAFIA

Bannwart, A. C. and Rossi, L. F. S.; 1994 "Maximum Heat Recovery in a Brazilian Oil Refinery Using a Transportation Problem Formulation". *Proceedings of the Florence World Energy Research Symposium*, presented at Florence, Italy, 6-8 July, pp. 1017-1024.

Cerda, J., Westerburg, A. W., Mason, D. and Linnhoff, B. ; 1983 "Minimum Utility Usage in Heat Exchanger Network Synthesis - A Transportation Problem". *Chemical Engineering Science*, vol. 38, n. 3.

Linnhoff, B. and Flower, J. R. ; 1978 "Synthesis of Heat Exchanger Networks: I. Systematic Generation of Energy Optimal Networks". *AIChE Journal*, vol. 24, n. 4, July.

Luenberger, D.G.; 1984 "Linear and Nonlinear Programming", 2nd edition, Addison-Wesley Publ. Co.

Rossi, L. F. S. e Bannwart, A. C.; 1994 "Otimização Econômico-Energética no Processo de Craqueamento Catalítico de uma Refinaria através do Método do Pinch Point". *V Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, São Paulo, SP, Dezembro, pp. 73-76.

Rossi, L. F. S., 1995 Otimização Energética de Redes de Trocadores de Calor - Aplicações em Engenharia de Petróleo, Alimentos e Química. - Tese de Doutorado, DE / FEM / Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP.

ABSTRACT

This work analyses the utilisation of the Transportation Problem Formulation, in Linear Programming, to a heating section of the catalytic cracking of an oil refinery (REPLAN). The task is to find the minimum energetic consumption and the minimum number of thermal equipments to carry out the task. To claim these objectives, it is also used concepts from the "Pinch-Point" methodology of heat exchanger networks.



MODELADO DE REACTORES TANQUE AGITADO PARA LA BIODEGRADACION ANAEROBIA DE RESIDUOS ORGANICOS SOLIDOS



Enrique D. Negri

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

INTEC - (UNL - CONICET)

Güemes 3450 - (3000) Santa Fe - Argentina

RESUMEN

Se desarrolló un modelo de reactor tanque agitado, heterogéneo, isotérmico, para la biodegradación anaerobia de materia orgánica en fase sólida. Este tipo de reactor es típico en el tratamiento de residuos sólidos urbanos. El modelo se construyó en base a las ecuaciones de balance promediadas en el volumen de reacción. Se analiza el caso de alimentación periódica, y se estudian las distribuciones características que se generan en la fase sólida.

INTRODUCCION

Se desarrolló un modelo de reactor tanque agitado, heterogéneo, isotérmico, para la biodegradación anaerobia de materia orgánica en fase sólida.

Suponiendo un reactor con mezcla perfecta, que los sustratos solubles intermedios no son volátiles, que no hay efectos difusivos importantes en las partículas, y que no hay reacciones de degradación en la fase fluida se obtuvo un modelo general utilizando promediación volumétrica para cada una de las fases y especies involucradas (Whitaker, 1986). La fase sólida se supuso compuesta de partículas esféricas que conservan su diámetro, con la reacción de hidrólisis heterogénea ocurriendo en un frente de reacción móvil, y que la biomasa en general se deposita y desarrolla sobre estas partículas (Negri y otros, 1993). En base a este esquema se construyó un modelo genérico que permite analizar distintas variantes y simplificaciones (por ejemplo estado estacionario o transiente), además de individualizar los términos de flujo interfacial a tener en cuenta en el modelado propiamente dicho.

En particular se consideró un caso típico de este tipo de reactores ya sea a escala laboratorio, banco o piloto, como es el de alimentación periódica del sustrato sólido. Esto da lugar a la aparición de una distribución de tiempos de residencia dentro de la fase sólida (en cualquier instante coexistirán en el reactor sólidos con distintos tiempo de permanencia). Se analizaron las distribuciones de tiempos de residencia y su influencia en los parámetros volumétricos que caracterizan el sistema heterogéneo. En especial se analiza la distribución de un caso de interés experimental (con el objetivo puesto en la obtención de datos cinéticos y de transporte), como es el de un reactor batch con extracciones periódicas de producto.

degradar y el grueso de la biomasa activa depositada) y una fase gaseosa (biogas generado en la degradación anaerobia). Se consideró un esquema cinético simplificado a tres grandes reacciones (y consecuentemente a tres tipos de microorganismos): hidrólisis, producción de ácido acético (acidogénesis) y producción de biogas (metanogénesis) a partir del ácido acético (Negri y otros, 1993). Para la etapa de hidrólisis se consideró además de la etapa heterogénea, la existencia de una fase homogénea, en la que los sólidos volátiles solubles de alto peso molecular se degradan a monómeros de bajo peso molecular factibles de ser metabolizados por las bacterias acidogénicas. Se supone entonces una cinética globalmente secuencial con una reacción heterogénea y otra homogénea iniciales (hidrólisis), y dos reacciones con sustratos en la fase continua (acidogénesis y metanogénesis).

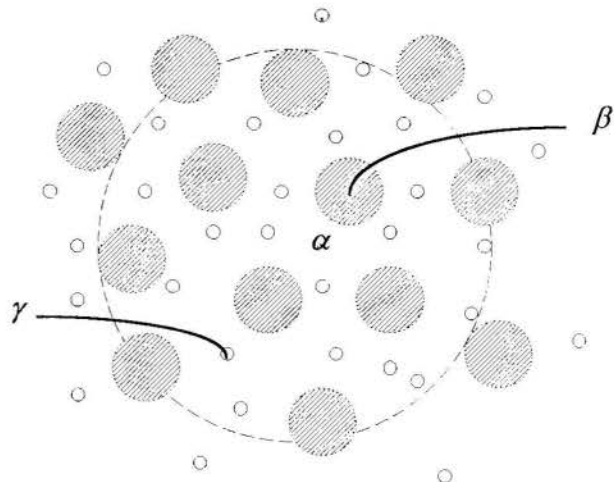
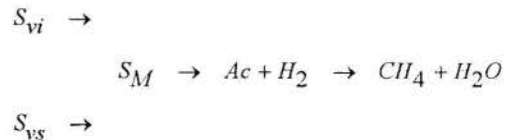


Figura 1 - Representación del sistema

SISTEMA REACCIONANTE

El sistema reaccionante consiste de tres fases: una fase continua líquida (contiene compuestos volátiles intermedios y microorganismos libres), una fase sólida (el material orgánico a

Se desprecian los efectos difusivos en las partículas, por lo que la fase sólida no presentará gradientes de concentración.

MODELADO DEL REACTOR

Se modeló el reactor en base a una representación en promedios volumétricos teniendo en consideración tres fases distintas: una continua (α) constituida por el líquido y dos fases discontinuas: una sólida (β) y otra gaseosa (γ) (Fig. 1). La formulación general para una especie (i) en la fase α se puede representar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_{\alpha} \langle \rho_{i\alpha} \rangle^{\alpha}) + \nabla \cdot (\langle v_{\alpha} \rangle \langle \rho_{i\alpha} \rangle^{\alpha}) + \nabla \cdot \langle \tilde{\rho}_{i\alpha} \tilde{v}_{\alpha} \rangle = \\ = -\nabla \cdot \langle j_{i\alpha} \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \rho_{i\alpha} (v_{i\alpha} - w_{\alpha\beta}) n_{\alpha\beta} dA + \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\gamma}} \rho_{i\alpha} (v_{i\alpha} - w_{\alpha\gamma}) n_{\alpha\gamma} dA \end{aligned} \quad (1)$$

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 j representa el flujo difusivo de una especie.

Por último el supraíndice \sim representa la perturbación espacial de una variable promediada (Whitaker, 1986).

Con las hipótesis de: i) mezcla perfecta en el reactor; ii) el esquema cinético presentado más arriba, con tres tipos de bacterias: hidrolíticas (h) para la etapa paralela inicial, acidogénicas (a) y metanogénicas; iii) reacciones despreciables en la fase fluida (no hay reproducción de bacterias en la fase continua); iv) sólo el gas es volátil; v) se desprecian efectos difusivos en la partícula; vi) no se considera la muerte de bacterias; vii) la fase sólida está constituida de partículas esféricas que conservan su diámetro; se puede obtener el siguiente sistema de ecuaciones para las distintas especies consideradas en las distintas fases.

En la fase continua (α), las especies (i) consideradas son: sólidos volátiles solubles (S_{vs}), monómeros solubles (S_M), ácidos orgánicos (S_A), gas disuelto (C_G'), bacterias hidrolíticas libres (X_h'), bacterias acidogénicas libres (X_a') y bacterias metanogénicas libres (X_m'):

$$\frac{d(\varepsilon_{\alpha} S_{vs})}{dt} = -k_{ho} S_{vs} \bar{X}_h \quad (2)$$

$$\frac{d(\varepsilon_{\alpha} X_h')}{dt} = F_{X_h}^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d(\varepsilon_{\alpha} S_M)}{dt} = -\mu_a \frac{S_M \bar{X}_a}{K_a + S_M} + (1 - Y_h) \\ (k_{ho} S_{vs} \bar{X}_h + 3\varphi S_{vi}^0 \bar{X}_h) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\frac{d(\varepsilon_{\alpha} X_a')}{dt} = F_{X_a}^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} \quad (5)$$

$$\frac{d(\varepsilon_{\alpha} S_A)}{dt} = -\mu_m \frac{S_A \bar{X}_m}{K_m + S_A} + (1 - Y_a) \mu_a \frac{S_M \bar{X}_a}{K_a + S_M} \quad (6)$$

$$\frac{d(\varepsilon_{\alpha} X_m')}{dt} = F_{X_m}^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} \quad (7)$$

$$\frac{d(\varepsilon_{\alpha} C_G')}{dt} = (1 - Y_m) \mu_m \frac{S_A \bar{X}_m}{K_m + S_A} - G \quad (8)$$

Se ha considerado una cinética de primer orden en la concentración de bacterias soportadas hidrolíticas para la etapa de hidrólisis homogénea y cinéticas de tipo Monod para las demás reacciones consideradas. $F_{X_m}^{\alpha\beta}$ representa el flujo interfacial de biomasa que pasa del estado libre al soportado y viceversa, y $a_{\alpha\beta}$ es el área interfacial entre las fases α y β . G representa el flujo interfacial de biogas.

En la fase sólida (β) las especies (i) consideradas son: sólidos volátiles insolubles (S_{vi}), bacterias hidrolíticas soportadas (X_h), bacterias acidogénicas soportadas (X_a), y bacterias metanogénicas soportadas (X_m). Un punto importante en el comportamiento del sólido es que en realidad se tiene en todo momento en el reactor la coexistencia de distintas fases sólidas con distintos tiempos de permanencia. Esto se contempla en el desarrollo presente con la consideración de distintas fases sólidas para cada período de alimentación ($j\Delta T$)

$$\frac{d\xi_j}{dt} = -\varphi X_{hj} \quad (9)$$

$$\frac{d\bar{X}_h}{dt} = -F_{X_h}^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} + Y_h (k_{ho} S_{vs} \bar{X}_h + 3\varphi S_{vi}^0 \bar{X}_h) \quad (10)$$

$$\frac{d\bar{X}_a}{dt} = -F_{X_a}^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} + Y_a \mu_a \frac{S_M \bar{X}_a}{K_a + S_M} \quad (11)$$

$$\frac{d\bar{X}_m}{dt} = -F_{X_m}^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} + Y_m \mu_m \frac{S_A \bar{X}_m}{K_m + S_A} \quad (12)$$

Aquí nuevamente se ha supuesto una cinética de primer orden en la concentración de bacterias soportadas hidrolíticas para la etapa de hidrólisis heterogénea, en la que se sigue su evolución con una representación de frente móvil. Las concentraciones de microorganismos en la fase sólida resultan de una promediación

según el tiempo de residencia que caracteriza a cada fracción de sólido presente:

$$\bar{X}_l = \sum_{j=1}^n \varepsilon_{\beta}^j X_{lj}, \quad l = h, a, m \quad (13)$$

$$\bar{X}_h = \sum_{j=1}^n \varepsilon_{\beta}^j \xi_j^2 X_{hj} \quad (14)$$

donde el supraíndice en la fracción volumétrica de la fase sólida indica el intervalo del tiempo a que pertenece (no es un exponente). Las distribuciones temporales de cada fase se discuten en el punto siguiente.

En la fase gaseosa (γ) se considera sólo la existencia de biogas (C_G):

$$\frac{d(\varepsilon_{\gamma} C_G)}{dt} = \dot{G} \quad (15)$$

Este sistema de ecuaciones define al modelo presentado en forma adecuada. Un concepto importante que se desprende de esta formulación, es el hecho de la existencia de distintas fases sólidas caracterizadas por su tiempo de permanencia en el reactor y que deben ser caracterizadas en forma adecuada.

DISTRIBUCIONES DE SOLIDO

Dada una alimentación periódica, en cualquier instante se tendrá una distribución de partículas de distinto tiempo de residencia (t_R). Definido un factor de dilución $\delta = Q/V$, donde Q es el volumen de recambio y V el volumen del reactor, y el período de alimentación (ΔT), la fracción de partículas (ϕ) con un tiempo de retención $t_R = j \Delta T$ queda definida como sigue:

$$\phi_j = \delta (1 - \delta)^j, \quad j = 0, 1, 2, n-1 \quad (16)$$

y la fracción de partículas con un tiempo de residencia $t_R \geq n \Delta T$ resulta:

$$\phi_n = (1 - \delta)^n \quad (17)$$

Basados en la hipótesis de volumen de partículas conservado, se puede obtener la fracción volumétrica de partículas con distintos t_R :

$$\varepsilon_{\beta}^j = \varepsilon_{\beta} \phi_j, \quad j = 0, 1, 2, n \quad (18)$$

Con la suposición hecha de partículas esféricas de igual diámetro, el área interfacial para cada fase se puede obtener según la expresión:

$$a_{\alpha\beta} = 3 \varepsilon_{\beta}^j / r_p \quad (19)$$

En base a estas distribuciones se puede obtener la evolución de cada una de las fases en el reactor.

APLICACION DEL MODELO

Una posible aplicación del modelo, permitiría analizar un caso muy sencillo de digestión anaerobia de materia orgánica compuesta fundamentalmente de residuos vegetales (Viturria, 1989, Viturtia y otros, 1992). Se analizó en este trabajo una serie de reactores batch con una única alimentación inicial, trabajando a pH y temperatura constantes, con extracción periódica de parte del material, para realizar los análisis

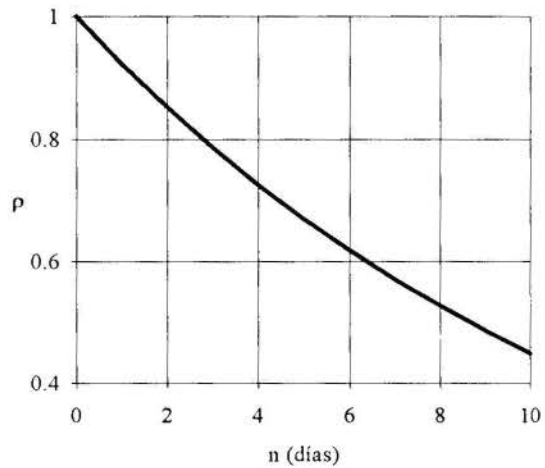


Figura 2 - Variación temporal de la fracción volumétrica de sólidos en relación a su valor inicial

correspondientes, reemplazando el volumen extraído con soluciones "buffer". Esta forma de trabajo se encuadra perfectamente en el planteo propuesto, a la vez que lo simplifica considerablemente, ya que hay una sola fase sólida que ingresa al reactor en el instante inicial, y las extracciones posteriores modifican su fracción volumétrica pero su evolución es única. Los reactores tienen un volumen unitario de 130 cm³ y en cada uno de ellos se reemplazan diariamente 10 cm³ de material, lo que da un factor de dilución $\delta = 1/13$. Con esta información se puede analizar la evolución temporal de la fracción volumétrica de sólido ($\rho = \varepsilon_{\beta} / \varepsilon_{\beta}^0$), sabiendo que ϕ_n es la única fracción existente. Esta evolución puede verse en la Figura 2, donde se presenta en abscisas la evolución temporal, representada por el parámetro n , ya que ΔT es unitario. Esto afecta por un lado las composiciones de la fase sólida, que resultan simplificadas grandemente (en las ecuaciones 13 y 14, la sumatoria no existe), y paralelamente, habiendo supuesto despreciable la fracción gaseosa, se puede seguir igualmente la evolución de la fracción volumétrica de líquido que va aumentando en el tiempo.

CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo de reactor heterogéneo para la digestión anaerobia de materia orgánica en fase sólida. Se utilizó un esquema cinético que incluye las etapas de hidrólisis, acidogénesis y metanogénesis.

Sobre la base de promedios volumétricos se han identificado las hipótesis y simplificaciones hechas. Se obtuvo un modelo general que si bien puede ser matemáticamente complicado es resoluble con métodos disponibles. Esencialmente queda destacado el carácter heterogéneo del sistema y la posibilidad de identificar expresiones cinéticas de una calidad más intrínseca.

Analizando el caso de alimentación periódica, se analizaron las distribuciones temporales y sus efectos en los parámetros característicos del sistema heterogéneo (fracciones volumétricas y áreas superficiales).

Se analizó la aplicación del modelo a un experimento sencillo de un reactor batch con alimentación inicial y extracciones periódicas. Un emprendimiento experimental en esta dirección debería permitir la identificación de parámetros "intrínsecos" para un sistema heterogéneo de las características de un biodigestor anaerobio.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue financiado parcialmente con fondos de CONICET, PID-BID 3-0201-1006/92, y de UNL CAI+D 33-178.

REFERENCIAS

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.

Viturtia A.Mtz., 1989, "Estudio de la Digestión Anaerobia en Dos Fases de Residuos de Frutas y Verduras", Tesis Doctoral, Department D'Enginyeria Química y Metallúrgia, Facultat de Química, Universitat de Barcelona, España.

Viturtia A.Mtz., Mata-Alvarez J., Sans C., Costa J. y Cecchi F., 1992, "Chemical Production from Wastes", *Env. Technol.*, Vol 13, pp. 1033-1041.

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 STIRRED TANK REACTORS FOR THE ANAEROBIC BIODEGRADATION OF ORGANIC SOLID WASTE.

A heterogeneous stirred tank reactor model for the anaerobic degradation of solid organic matter is presented. This kind of reactor is often used for the treatment of municipal solid waste. The development of the equations based on the volume averaging of the balance equations is presented and discussed for a reaction scheme that includes the heterogeneous hydrolysis reaction, besides the acidogenic and methanogenic steps. The case of a periodic reactor feed is analysed and the characteristics distributions of the solid phase present in the reactor are identified.



**METHANE PHOTO-POLYCHLORINATION IN THE NON-ISOTHERMAL
TUBULAR REACTOR IN LAMINAR FLOW REGIME.
I. APPLICABILITY OF STEADY-STATE APPROXIMATION vs. SCALE-UP**



Ricardo J. Grau, Maria I. Cabrera and Alberto E. Cassano
Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC)
Güemes 3450 (3000) Santa Fe - Fax: 54-42-550944 - Argentina

ABSTRACT

The regime of applicability of quasi-steady state approximation and the error resulting from its utilization are considered for divers photo-reactor scales. Formal integral equations are used to clarify, in more mathematically consistent manner, the nature of estimated concentrations deviations. For laboratory scales, the MSSA application must be carefully analyzed for the substituted mono- and di-chloride products predictions and probably it not could be acceptable for substituted tri- and tetra-chlorine ones. For industrial scale the deviations are sufficiently lessened so that the MSSA should be certainly applied, yet for poly-chlorine products prediction under an extensive range of operational conditions.

INTRODUCTION

Conventional processes for producing chloromethane derivatives are the thermal or photochemical reaction of methane and chlorine in the gas phase, normally at atmospheric pressure. Thermal reactions are conducted at high temperatures (between 700 and 750 K). The photochemical reaction is carried out at low temperatures (below 400 K) to minimize undesired by-products and tar formation, but it seems economically feasible for medium- or small-scale production. Qualitatively, the photo chlorinating has the following characteristics:

- i. It has many steps, some of them ranging from low to intermediate rate of reactions while others are extremely fast. The reactivity of the involved chemical species varies in a wide range of values.
- ii. The reaction proceeds through a chain mechanism involving atomic and free-radical species. These intermediate species undergo homogeneous termination steps -in the bulk of the fluid- and heterogeneous termination reactions by interaction with the reactor wall.
- iii. The heat of reaction is high and the reactor may require cooling to avoid undesirable side reactions. Thus, both in the thermal energy and in the species mass balances, non-homogeneous boundary conditions are present. Moreover, the inclusion of the radiation (photon) balance generates a system of coupled partial integer-differential equations.

Thus, a photo-chemical reaction is indirectly affected by the type and scale in a way that is usually unpredictable *a priori*. At the moment of making a satisfactory scale-up, the need of keeping the process under given conditions (*e. g.* flux regime) frequently becomes a factor that limits the variation field of some operative variables (*e. g.* velocities) and consequently turns unpractical, if not impossible, to have complete similitude in some relation among diffusion, convection and chemical reaction characteristic times, already established in the reference situation (usually, laboratory and/or pilot-plant data). Particularly, in the case of a photo-reactor, and added to this mother, there is the fact that dimension changes may also modify the radiation field distribution and, thus, the characteristic photo reaction time, even in thermal control absence, if there is any. So

the validity of the extrapolation of the MSSA from the reference situation is, *a priori*, not obvious.

Various studies on photopolychlorination [De Bernardez and Cassano, 1986; Clariá *et al.*, 1988; Cabrera *et al.*, 1991.a] have demonstrated the MSSA validity when: (i) the residence time is high, (ii) the molecular chlorine concentration is low, and (iii) the initial velocity is high. The effects of these variables have been resumed to a simple variable, the initial velocity dimensional expression [Cabrera *et al.*, 1991.b]. In the mentioned works, these conclusions together with a first interpretation of the velocities field effect were obtained by computational experimentation by comparing the exact solution values with to the MSSA corresponding ones applied to the full reactor and to all free radicals.

In this paper, a comprehensive MSSA validity vs. reactor scale analysis is made using the formal integral equations, put forward by us in a recent work [Cabrera *et al.*, 1996], that describe the deviation field associated to differences between the exact and approximate solutions. A comparative analysis for both typical scales, industrial and laboratory ones, is done focusing the attention on scale-up purposes.

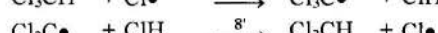
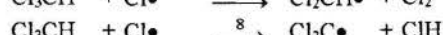
KINETIC MODEL

The reaction proceed by photochemical dissociation of molecular chlorine producing two atomic activated species (initiation step); atomic chlorine initiates a chain mechanism involving methane, different free radicals with one, two and three substituted chlorine, hydrochloric acid, methyl and methylene chloride, chloroform and carbon tetrachloride (propagation steps); atomic and free radical species can stop the chain reaction (termination steps) by two different mechanism: homogeneous (in the fluid phase) recombination between any two of them (sometimes a third body is required to provide for energy dissipation) and heterogeneous deactivation by collision with the reactor walls. Termination reactions that lead to the formation of chloroethane derivatives are of negligible significance in the photochemical route [De Bernardez and Cassano, 1986]. The reaction mechanism can be represented as follow:

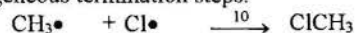
Initiation step:



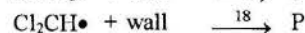
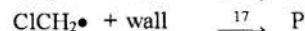
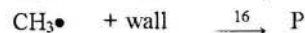
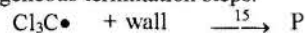
Propagation steps:



Homogeneous termination steps:

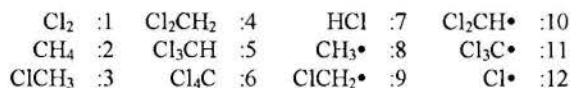


Heterogeneous termination steps:



The kinetic constants for the mechanistic sequence corresponding to the production of mono, di, tri and tetrachloromethane have been verified experimentally with an acceptable degree of accuracy by Cabrera *et al.* (1991.a). A value for the thermal initiation has been taken from the literature [Pratt, 1969].

Let us simplify the notation by setting:



Rate of Initiation

According to Irazoqui *et al.* (1976) the rate of chlorine dissociation into atomic species, R_1 , can be written as follows:

$$R_1 = \int_0^\infty d\nu \Phi_\nu e_\nu^a \quad (1)$$

For the photochemical chlorination of low molecular weight hydrocarbons the primary quantum yield (Φ_ν) may be assumed equal to 1 for all wavelengths [Clariá *et al.*, 1988]. The Local Volumetric Rate of Energy Absorption (e_ν^a) is the distinct variable and the most characteristic property of photochemical systems, it depends upon the optical and geometrical

characteristics of the lamp, reactor and reflector (if used), the energetic characteristics (output power and its spectral distribution) of the lamp, and the radiation absorption characteristics of reactants, inert and products. Details of the Emission - Reception Radiation Models for different photoreactors can be found in the monographic work of Cassano and Alfano (1989). The particular details for the cylindrical reactor inside the elliptical reflector are summarized in the works of Clariá *et al.* (1988) and Cabrera *et al.* (1991.a). Furthermore, LVREA is a function of the chlorine concentration. In its turn, this concentration depends upon the stable, atomic and free radical species reaction rates and, obviously, temperature. Hence this rate of initiation alone is the resulting of three overlapping fields: a radiation field, a concentration field and a temperature field.

Homogeneous Propagation and Termination Reactions

The type kinetic equations for describing the homogeneous propagation and termination reaction rates (steps 2 to 9 and 2' to 9', and steps 10 to 14, respectively) is given by:

$$\Omega_i(\rho, \xi) = P_i(\rho, \xi) \psi_i(\rho, \xi) + Q_i(\rho, \xi) \quad (2)$$

where $P_i(\rho, \xi)$ and $Q_i(\rho, \xi)$ depend on the atomic chlorine concentration and the some reactive species. Consequently, analytical solutions for the reactive intermediate concentrations are cumbersome to the point of the impracticable for a rigorous approach.

We will apply the local or micro steady-state approximation to the reactions involving atomic and free radical species. Thus, by setting $\Omega_i = 0$ ($i = 8, 9, \dots, 12$), algebraic equation for the local concentration of atomic chlorine and the free radicals may be obtained. A simple iteration procedure by successive approximations allows to obtain the concentrations of these intermediate species. Once they are obtained the stable species local reaction rates can be estimated more easily. Unfortunately, as it will be analyzed throughout the paper, the validity and exactitude of this approximation depends upon the characteristics of the photoreactor (mainly reactor length and radiation source power output), the operating conditions (mainly chlorine initial concentration, flow rates and temperature) and the reactivity levels of the involved free-radicals. In view of this complexity, it is certainly a prerequisite for any progress when understanding the influence of the MSSA approximation on predictions for scale-up purpose, to perform a rigorous comparison between exact and approximate prediction of the model. Hence one can applied the concepts developed in a recent work [Cabrera *et al.*, 1996] to make more efficient the numerical solution of the problem.

Heterogeneous Termination Reactions (at the reactor walls)

It has been always considered that under normal operating conditions the heterogeneous termination reactions (steps 15 to 19) do not affect sensibly the exit product concentration [De Bernardez and Cassano, 1986; Clariá *et al.*, 1988]. A complete evaluation of their significance, particularly regarding the potential effect of changes in the collision efficiency of these processes has been made in a recent work [Cabrera *et al.*, 1996]. However, an insight in the relevance of these heterogeneous reactions into the scale-up process has not been made yet; they will be analyzed in a follow-up paper.

REACTOR MODEL

The photoreactor here analyzed is a cylindrical tube located in one of the focus of a cylindrical reflector of elliptical cross section. The tubular lamp is in the other focus. The steady state operation has been modeled with a two-dimensional homogeneous model considering: (i) Incompressible flow of a Newtonian fluid, (ii) Azimuthal symmetry inside the reactor, (iii) Fully developed laminar flow, (iv) Constant physical properties, (v) Velocity profile independent of the mass transfer rates, (vi) Negligible thermal effects of the employed radiation (valid for the employed wavelengths and considering proper cooling of the infrared radiation produced by the lamp), (vii) Negligible viscous dissipation, (viii) Negligible axial conduction when as compared with convective flow, (ix) Axial diffusion negligible as compared with the convective flow, (x) Fickian forms may be used for the diffusion coefficients of the multicomponent mixture [Stefan - Maxwell forms can also be used as it was done by De Bernardes and Cassano, 1986], (xi) Non-adiabatic reactor walls.

The corresponding mathematical model, formulated from first principles, was presented by De Bernardes and Cassano (1986) for an annular reactor and by Clariá *et al.* (1988) for a cylindrical reactor irradiated from outside. The radiation emission-absorption photon balance, N species mass balances and the thermal energy balance, must be solved simultaneously. The radiation balance can be incorporated into the mass balances, this operation turns the resulting system of N+1 equations into a new one of integro-differential nature. In a recent paper [Grau *et al.*, 1996], the mathematical aspects of transforming the system of P.D.E. with non-homogeneous boundary conditions representing the model into an equivalent system of integral equations was described. Several additional transformations were developed to obtain the formal integral solutions for predicting radial and axial concentration and temperature profiles for reaction regimes of very different reactivities (slow, intermediate and very fast reactions). The solutions showed convenient features for the iteration procedure required by numerical solution using the necessary successive approximations.

BREAKDOWN OF THE EXACT SOLUTION

In order to analyze the validity of MSSA for divers photoreactor scales we focused on the use of decomposition of the local concentration, $\psi_i(\rho, \xi)$, in terms of the local concentration corresponding to MSSA, $\psi_i^{ss}(\rho, \xi)$, and the *intrinsic local deviation*, $\tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)$, in the form:

$$\psi_i(\rho, \xi) = \psi_i^{ss}(\rho, \xi) + \tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) \quad (3)$$

In addition to this, on the basis of the idea that for practical purpose, it frequently results convenient to apply the MSSA to the whole reactor, we introduce a new decomposition as follow:

$$\psi_i(\rho, \xi) = \hat{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) + \bar{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) \quad (4)$$

in which $\bar{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)$ is referred to as a *local deviation* relative to composition resulting of the assumption that the MSSA reach full validity on whole reactor $\hat{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)$.

Use of these decomposition allows us to relate both deviations as:

$$\bar{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) = [\psi_i^{ss}(\rho, \xi) - \hat{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)] + \tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) \quad (5)$$

FORMAL INTEGRAL EXPRESSIONS FOR DEVIATIONS

For intermediate highly reactive species, an approximate expression that describes the $\tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)$ -field have the following form [Cabrera *et al.*, 1996]:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) \approx & \frac{D_{im} \tau_i}{R^2 [\Omega_{Hi}^d / C_i](\rho, \xi)} \int_0^\xi d\bar{\xi} e^{-\frac{\tau_i}{\alpha_i}(\xi-\bar{\xi})} \times \\ & \times \left\{ \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} \left[\frac{R^2 [\Omega_{Hi}^d / C_i](\rho, \bar{\xi})}{D_{im} \tau_i} - 1 + \rho^2 \right] \tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \bar{\xi}) \right. \\ & \left. - (1 - \rho^2) \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} \psi_i^{ss}(\rho, \bar{\xi}) \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

In view of Eq. (2) a convenient definition of the τ_i parameter (diffusion mass transfer-to-homogeneous reaction characteristic times ratio) is given by:

$$\tau_i \approx \frac{R^2 P_i(\tau, \kappa)}{D_{im}} \quad (7)$$

where τ and κ are positive parameters less than 1.

Use of this definition in Eq.(6) yields:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) \approx & \frac{P_i(\tau, \kappa)}{P_i(\rho, \xi)} \int_0^\xi d\bar{\xi} e^{-\frac{\tau_i}{\alpha_i}(\xi-\bar{\xi})} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} \left[\frac{P_i(\rho, \bar{\xi})}{P_i(\tau, \kappa)} - 1 + \rho^2 \right] \tilde{\psi}_i^{ss}(\rho, \bar{\xi}) \\ & - (1 - \rho^2) \frac{P_i(\tau, \kappa)}{P_i(\rho, \xi)} \int_0^\xi d\bar{\xi} e^{-\frac{\tau_i}{\alpha_i}(\xi-\bar{\xi})} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} \psi_i^{ss}(\rho, \bar{\xi}) \quad (8) \end{aligned}$$

By virtue of Eqs (3) and (8), the $\bar{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)$ -field can be described reasonably well by:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi) \approx & [\psi_i^{ss}(\rho, \xi) - \hat{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)] \\ & - (1 - \rho^2) \int_0^\xi d\bar{\xi} e^{-\frac{\tau_i}{\alpha_i}(\xi-\bar{\xi})} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} [\psi_i^{ss}(\rho, \bar{\xi})] \\ & + \rho^2 \int_0^\xi d\bar{\xi} e^{-\frac{\tau_i}{\alpha_i}(\xi-\bar{\xi})} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} [\hat{\psi}_i^{ss}(\rho, \bar{\xi})] \quad (9) \end{aligned}$$

when $P_i(\tau, \kappa) / P_i(\rho, \xi)$ is approximately equal to 1. It is rigorously true for first order kinetic.

In Eq.(9), the first term is the contribution associated to the fact that, rigorously, the steady state approximation has only local validity but not in the reactor as a whole. The second and third terms are related to the intrinsic local deviation which may

change to be null as from a certain entrance length depending on the velocity parabolic profile ($1-\rho^2$) and the homogeneous reaction-to-convective characteristic times ratio. Nevertheless, even when the *intrinsic local deviation* be null from the position where the MSSA starts to have full validity, the first term contribution makes the *local deviation* not become null necessarily. In other words, the fact that the *intrinsic local deviation* be null does not imply the *local deviation* be null too, and so the calculated local values are the correct ones, through the entrance induction length is overcome. As mentioned before, it is due to the fact that an integral reactor counts with what happens upstream where the MSSA may not reach full validity.

Moreover, the local chemical reaction rate may be influenced by physical processes, e.g., mass transfer, heat transfer and radiation field distribution which are usually controlled by the size and structure of the reactor, as well as of the other physical and geometrical parameters of the source-reactor system. These effects may result in changes of the local behaviour of reacting chemical species and the MSSA could become a non-valid hypothesis. To deal with a complex relation between the regime of applicability of the MSSA and the photoreactor scale the behaviour of local deviations, $\bar{\Psi}_i^{ss}(\rho, \xi)$, will be analyzed now for scale-up purposes.

SETTING UP THE PHOTOREACTOR SCALES

For bringing out the essential features of the approach a representative set of photoreactor design parameters was taken (shown in Table) and the effects of the main process variables, e.g., power lamp, temperature and pressure, were analyzed for two typical scales on a wide range of operative conditions.

Table - Geometrical Characteristics of Source-Reactor Systems

Geometrical Characteristic of Reactor, Reflector and Lamp	Industrial Reactor Scale	Laboratory Reactor Scale
Reactor length (mm)	1200	200
Reactor diameter (mm)	25	4
Lamp ¹	TL40 W/09N	TL29 D16/09N
Lamp nominal length (mm)	1200	200
Lamp diameter (mm)	38	16
Output power/Length (W/mm)	7.08×10^{-3}	7.24×10^{-3}
Lamp ²	TL 100 W/09N	TLK 40 W/09N
Lamp nominal length (mm)	1200	200
Lamp diameter (mm)	38	38
Reflector length (mm)	1200	200
Ellipse semimajor axis (mm)	1070	535
Ellipse eccentricity	0.4	0.4
Output power/Length (W/mm)	12.78×10^{-3}	10.83×10^{-3}

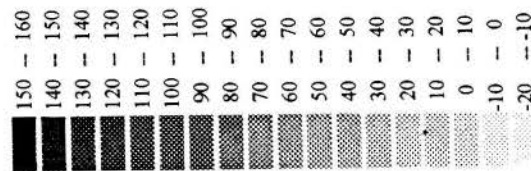
¹ Philips Actinic Lamp used for low power analysis

² Philips Actinic Lamp used for high power analysis

RESULTS AND DISCUSSION

The discussion is made easier by showing only the local deviation of the species that has major incidence on all steps of the chain reactions sequence, i.e., the atomic chlorine (Cl•). Thus, each set of figures shows the $\bar{\Psi}_{12}^{ss}(\rho, \xi)$ -map for laboratory and industrial scales, under similar operative conditions.

Regions have been delimited in accord with deviation levels established by following scale:



Reference Case: As reference operative conditions were assigned the following values. Temperature: 298 K, Pressure: 760 mmHg, Reynolds number: 1500, Chlorine-to-methane feed molar ratio: 9.5, Initial chlorine molar fraction: 0.15.

Figures 1.a-b show the $\bar{\Psi}_{12}^{ss}(\rho, \xi)$ -map for both photoreactor scales and the reference conditions put forward above.

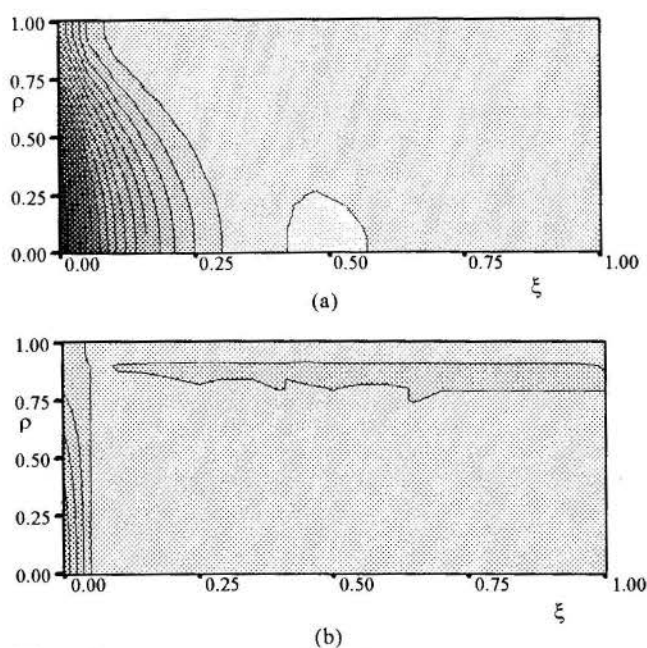


Figure 1 - Reference situation. Deviation levels of the atomic chlorine with radial and axial photoreactor positions for: (a.) Laboratory scale and (b.) Industrial scale

As it can be observed, high deviations occur at the entrance region where MSSA starts to be not valid. It is evident that in a significant part of the laboratory reactor the effects due to the velocity profile non uniformity, have strong influence. The velocity parabolic profile causes the occurrence of minimum residence times in the proximity of reactor axis and great ones near the wall. The functional relationship between velocity profile and the deviations indicated on the R.H.S. of Eqs (8) and (9) may become extremely dependent upon the exponential factor, the more so if the parameter τ_i/α_i (convective-to-homogeneous reaction times ratio) takes larger values. For industrial scale the convective mean characteristic time is typically greater than laboratory scale (for this study case, 37.5 times greater). Then, the exponential parameter produces an attenuation effect much more localized at the entrance region. Consequently, the deviations are narrowed down to the proximity of this region.

Additionally, the velocity parabolic profile determines that the average concentration estimation must be done with a weight function ($1-\rho^2$). Therefore the combination, deviation profiles and weight function growing coincidentally toward the reactor

axis, contributes to make the average deviation more evident. So, though the deviations are important in a reduced region at the entrance, their incidence over predictions of the average conversions and compositions of stable species may lead to significant errors.

Computational experimentation makes it evident. For laboratory scale, the errors involved in estimation of the reactant conversions (Cl_2 : 7.65%, CH_4 : 7.09%) and product compositions (ClCH_3 : 6.46%, Cl_2CH_2 : 12.05%, Cl_3CH : 16.32%, Cl_4C : 27.58%) are high especially as the polychlorine substitution level increases. For industrial scale, the prediction errors of both performance indicators, reactant conversions (Cl_2 : 0.38%, CH_4 : 0.26%) and product compositions (ClCH_3 : 0.07%, Cl_2CH_2 : 0.41%, Cl_3CH : 0.66%, Cl_4C : 1.14%), are sufficiently lessened so that the steady state approximation should be applied certainly. In a laboratory scale, the MSSA application must be carefully analyzed for the substituted mono- and di-chlorine products prediction, and probably it could not be acceptable for substituted tri- and tetra-chlorine ones.

Power Lamp Effects: Figures 2.a-b show how the $\bar{\psi}_{12}^{ss}(\rho, \xi)$ deviation level evolves in the photoreactor for output power-to-length lamp ratios greater than the setting values for the reference case, 50% and 80% for laboratory and industrial scales, respectively. These percentages of increments are no arbitrary, they solely respond to available commercial lamps. Computational experimentation with virtual highly powered lamps confirms the observable trend to a more wide range of the power-to-length lamp ratios.

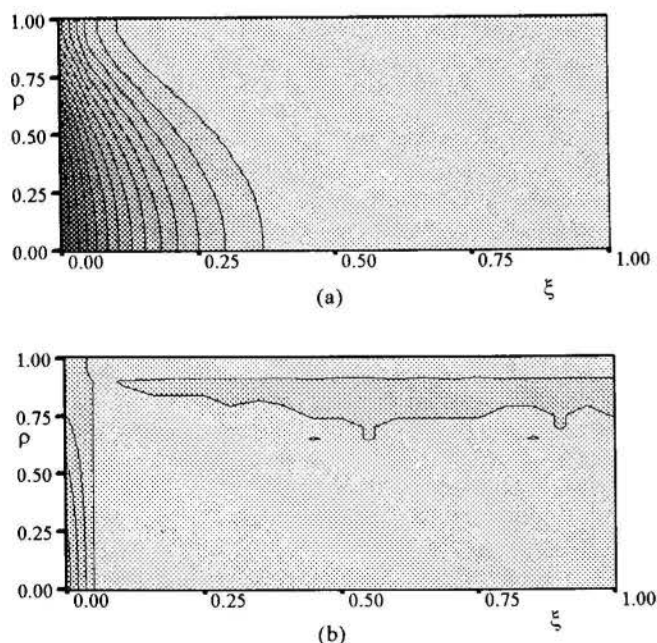


Figure 2 - Effects of the lamp power. Deviation levels of the atomic chlorine with radial and axial photoreactor positions for: (a.) Laboratory scale and (b.) Industrial scale

A power-to-length lamp increase produces a decrease in the production-to-consumption process characteristic times ratio for the atomic chlorine ($\text{Cl}\bullet$), thus reducing consequently the entrance length at which concentration reaches a relatively low level of the intrinsic deviations. But even though the intrinsic local deviation contribution may be smaller, the opposed effect of the lamp power on the contribution of first term on the R.H.S. of Eqs (8) and (9), $[\psi_i^{ss}(\rho, \xi) - \hat{\psi}_i^{ss}(\rho, \xi)]$, may invalidate any

straight association between local validity of the MSSA and their application to the whole reactor. Only when the contribution of this term is so small in relation with the contributions corresponding to other terms on R.H.S. of Eqs (8) and (9), this straight association is an acceptable simplification for practical purposes. As the corrective term diminishes when the power-to-length lamp ratio decreases and the chlorine concentration increases, the MSSA holds better for the lowly powered lamps.

The above argument was corroborated by computational experimentation. For laboratory scale reactor the prediction errors of the reactants conversions (Cl_2 : 9.74%, CH_4 : 9.49%) and products compositions (ClCH_3 : 8.77%, Cl_2CH_2 : 16.32%, Cl_3CH : 22.12%, Cl_4C : 35.85%) increase in relation to the case of lower power-to-length lamp. A similar behavior was observed for industrial scale reactor since the reactants conversions (Cl_2 : 0.28%, CH_4 : 0.19%) and products compositions (ClCH_3 : 0.00%, Cl_2CH_2 : 0.21%, Cl_3CH : 0.48%, Cl_4C : 0.87%) increase too. A special remark must be made for laboratory scale. The predictions based upon the MSSA applied to whole reactor can not yields to satisfactory values in general. It was found that the satisfactory predictions resulting from the straightforward extrapolation to the whole reactor may be fortuitous and that an adequate evaluation of the first term on the R.H.S. of Eqs (8) and (9) may be necessary.

Temperature Effects: In a chemical reactor, the length required to reach an almost stationary value of the atomic and free radical species depends upon many parameters and particularly upon the temperature if the values of the relative activation energies acquires significance. Then, a temperature increase reduces the entrance length where the MSSA is not valid. In a photochemical reactor this tendency is less evident since increment of the temperature does not influence substantially on production rate of the atomic chlorine ($\text{Cl}\bullet$) which takes place mainly by photochemical *via*. Figures 3.a-b show the $\bar{\psi}_{12}^{ss}$ -map at 400 K.

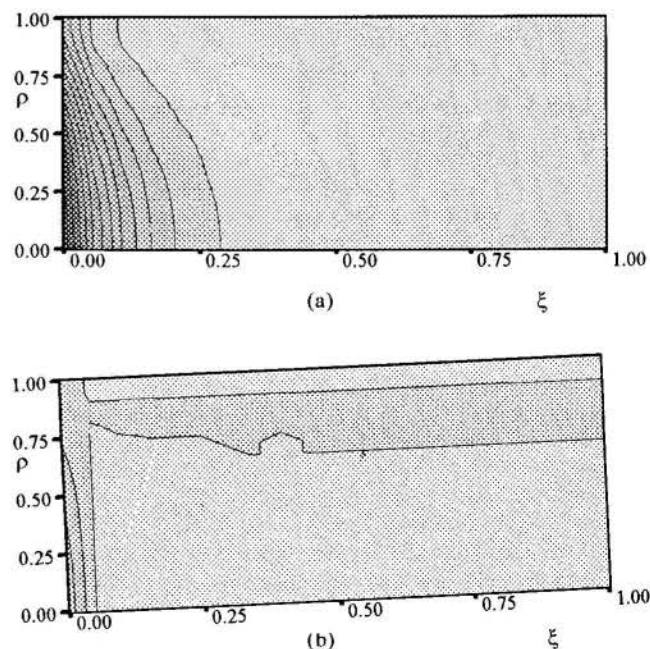


Figure 3 - Effects of reactor temperature. Deviation levels of the atomic chlorine with radial and axial photoreactor positions for: (a.) Laboratory scale and (b.) Industrial scale

By comparing the maps illustrated in Figure 3 with those shown in Figure 1, it can be concluded that high temperatures improve slightly the conditions for a better application of MSSA in both reactor scales. There is no doubt about this when the reactant conversion and the products compositions errors predictions are analyzed. For laboratory scale the reactant conversion (Cl_2 : 8.79% and CH_4 : 7.53%) and product compositions (ClCH_3 : 6.00%, Cl_2CH_2 : 13.18%, Cl_3CH : 19.92%, Cl_4C : 27.29%) are similar to reference case. Even the differences in the substituted poli-chlorine products predictions are of little importance. A similar behavior can be observed if one carries out the same comparison for industrial scale (Cl_2 : 0.50%, CH_4 : 0.28%, and, ClCH_3 : 0.50%, Cl_2CH_2 : 0.04%, Cl_3CH : 0.60%, Cl_4C : 1.20%).

Pressure Effects: Figure 4 illustrate the $\bar{\Psi}_{12}^{ss}$ -map under equivalent conditions to the ones in Figure 1, excepts that the pressure was setting ten times lower (76 mmHg).

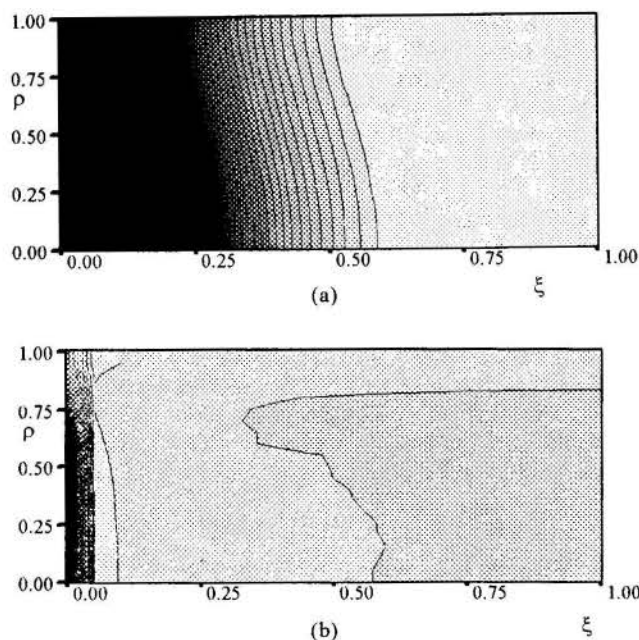


Figure 4 - Effects of the reactor pressure. Deviation levels of the atomic chlorine with radial and axial photoreactor positions for: (a.) Laboratory scale and (b.) Industrial scale

Again one obtains some unexpected changes. It is evident that the deviation level increases practically one order of magnitude and the radial gradients are nearly equalized. A pressure diminution involves two effects: an increase of diffusion coefficient and a decrease of species concentrations. A comprehensive computational experimentation reveals that the former effect impacts less than the latest. It is due to the methane photo-polichlorination involves first-order bimolecular reactors. For laboratory scale at low pressure, the deviations are very high even for mono-chlorine substituted products. Clearly, the reactant conversions (Cl_2 : 33.59%, CH_4 : 31.99%) and product compositions (ClCH_3 : 30.19%, Cl_2CH_2 : 73.29%, Cl_3CH : 141.29%, Cl_4C : 424.25%) error predictions become excessively greater. In spite of this, for industrial scale reactors the deviations are found within the practical acceptability limits (Cl_2 : 0.51%, CH_4 : 0.39%, and, ClCH_3 : 0.22%, Cl_2CH_2 : 0.61%, Cl_3CH : 1.05%, Cl_4C : 3.23%).

CONCLUSIONS

In integral reactors as the one here analyzed, the integral equations that describe the intrinsic local deviation and local deviation fields, Eqs (8) and (9) respectively, constitute a valuable tool to provide a qualitative and quantitative analysis of the regime of application of the MSSA for divers photoreactor scales. These integral equations can give an easy insight to the magnitude of the error that could be introduced in the reactor simulation for scale-up purposes.

Particularly, from the photochlorination system analyzed it can be concluded that: *i*): For laboratory scale still under the more favorable conditions, *i.e.*, lowly powered lamps, high temperatures and/or high pressures, the application of the MSSA must be carefully analyzed for an acceptable prediction of the substituted mono- and di-chlorine product, and probably it could not be acceptable for substituted tri and tetra chlorine ones. *ii*): For industrial scale still under more unfavorable conditions, the prediction errors introduced by application of MSSA are sufficiently lessened so that the steady state approximation should be applied with certainty in general. *iii*): The MSSA becomes a valid hypothesis just as much as the reactor scale increases.

REFERENCES

- Cabrera, M. I., Alfano, O. M. and Cassano, A. E., 1991a, "Selectivity Studies in the Photochlorination of Methane I: Reactor Model and Kinetic Studies in a Non-Isothermal, Polychromatic Environment", *Chem. Eng. Comm.*, 107, pp. 95-122.
- Cabrera, M. I., Alfano, O. M. and Cassano, A. E., 1991b, "Selectivity Studies in the Photochlorination of Methane II: Effect of the Radiation Source Output Power and Output Spectral Distribution", *Chem. Eng. Comm.*, 107, pp. 123-150.
- Cabrera, M. I., Grau, R. J. and Cassano, A. E., 1996, "The Tubular Reactor in Laminar Flow Regime: An Integral Equation Approach - III. Application to Reactor Modeling Involving Free-Radical Reactions", to be published.
- Cassano, A. E. and Alfano, O. M., 1989, "Photoreactor Design", in *Handbook of Heat and Mass Transfer*, vol. 3: "Catalysis, Kinetics and Reactor Design", Chermisinoff N. P. E ed.; Gulf Publishing Co., Houston, Ch. 16, pp. 583-670.
- Clariá, M. A., Irazoqui, H. A. and Cassano, A. E., 1988, "A Priori Design of a Photoreactor for the Chlorination of Ethane", *AIChE J.*, 34, pp. 366-382.
- De Bernardez, E. R. and Cassano, A. E., 1986, "Methodology for an Optimal Design of a Photoreactor. Application to Methane Chloroderivatives Production", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 25, pp. 601-612.
- Grau, R. J., Cabrera, M. I. and Cassano, A. E., 1996, "The Tubular Reactor in Laminar Flow Regime: An Integral Equation Approach - II. Non- Isothermal System with Complex, Arbitrary, Homogeneous and Heterogeneous -at the Wall- Reactions", to be published.
- Irazoqui, H. A., Cerdá, J. and Cassano, A. E., 1976, "The Radiation Field for the Point and Line Source Approximations and the Three- Dimensional Source Models: Applications to Photoreactions", *Chem. Eng. J.*, 11, pp. 27-37.
- Pratt, G., 1969, *Gas Kinetics*, John Wiley & Sons.



**METHANE PHOTO-POLYCHLORINATION IN THE NON-ISOTHERMAL
TUBULAR REACTOR IN LAMINAR FLOW REGIME.
II. WALL REACTIONS INFLUENCE vs. SCALE-UP**



María I. Cabrera, Ricardo J. Grau and Alberto E. Cassano
Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC)
Güemes 3450 (3000) Santa Fe - Fax: 54-42-550944 - Argentina

ABSTRACT

A comprehensive analysis of nonpermeable (nonreactive) vs. permeable (reactive) wall reactor is made to analyze the wall reactions influence in the photo-reactor modeling with scale-up purposes. Starting from the formal integral equations for deviation fields introduced by this simplification, put forward by us in a recent work, the effects of the molecule-wall collision efficiencies, pressure and wall specific surface are carefully analyzed. The uncertainty of the knowledge of precise values of collision efficiencies have no significant effect on the modeling of industrial reactors, but it should deserve some attention in laboratory ones. The simplification should be reasonable for the cases where diffusion is a partially controlling regime such as industrial scale, or laboratory scale at normal or high pressure.

INTRODUCTION

In order to achieve a simpler mathematical modeling of photoreactors, the microsteady-state approximation has generally led to essential simplifications in the differential equations which describe the local behavior of reacting chemical species. In part I of this work [Grau *et al.*, 1996.a], we used formal integral equations to clarify, in more mathematically consistent manner, the regime of applicability of this approximation for scale-up purposes. Another frequent simplification is based on the assumption that wall reactions have no influence on the modeling. To achieve a similar scope to development for MSSA, and now, to analyze this additional simplification, we propose here an entirely similar procedure to deal with the more important features of wall reaction effects.

In reactive systems, like the ones involved in pyrolytic and photochemical processes, kinetics studies of the wall reactions are complicated due to the fact that, as soon as quite small amounts of products are formed, these react in turn and interfere with the course of the over-all reaction including the homogeneous ones. This difficulty is further increased by the necessary conditioning the wall. For the photochlorination process here analyzed, a considerable fraction of the chain reactions could be given by the heterogeneous ones if the free radicals collision efficiency against the wall would be of the order of unity. Studies confronted against the problems mentioned and the exactness related to the quantification of these complex phenomena, concluding that the contribution of the heterogeneous reactions represent less than 2%, suggested collision efficiency values of the order of 10^{-5} [Chiltz *et al.*, 1963]. Even though the uncertainty, this sufficiently low values indicated that there is a very low probability for a free radical to be captured by molecule-wall collisions.

So, for practical purposes it is frequent that the heterogeneous -at the wall- reactions could be negligible relative to homogeneous one. Various photo-polychlorination studies [De Bernardes and Cassano, 1986; Clariá *et al.*, 1988; Cabrera *et al.*, 1991] have shown this to be an acceptable simplification in most practical situations. In the referenced works, this conclusion has been obtained by computational experimentation comparing the

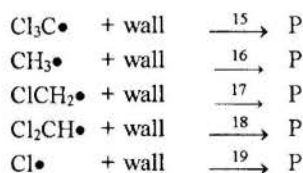
exact solution values with the ones corresponding to the no inclusion of the wall reactions in the kinetic scheme and using the collision efficiencies reported by others.

Under normal conditions these reactions should not be very important; but when high radiation intensities combined with low operating pressures are used, and reactors having a high wall surface-to-volume reactor ratio are present, they can not be neglected without a rigorous simulation using for instance, computation experiments. To this purpose, the solution method proposed in this paper will be very useful.

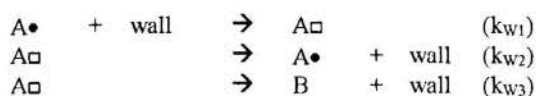
In what follows, the analysis is extended supporting it on the appropriate analytical expressions for the concentration deviations introduced by the wall reactions, obtaining them from integral equations put forward by us in a recent work [Cabrera *et al.*, 1996]. The usefulness of this general approach is illustrated by analyzing the wall reaction influences on the cylindrical tube photoreactor modeling with scale-up purposes.

KINETIC AND REACTOR MODEL

The kinetic sequence describing the initiation, propagation and homogeneous termination reaction rates was described elsewhere [Cabrera *et al.*, 1996 and references therein]. Here we focus on discussing the mechanistic aspects and reaction rates of heterogeneous (at the wall) reactions:



The reaction rate at the wall is usually described in the following form [Noyes and Leighton, 1941]:

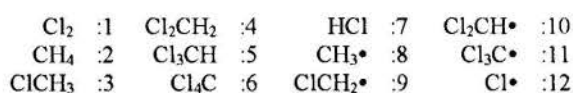


Here A^\bullet is, in generic notation, an intermediate species and $A\blacksquare$ a wall adsorbed species. Applying simple adsorption-desorption theory, the steady-state approximation for the $A\blacksquare$ species and assuming low concentration of the intermediate species A^\bullet (a valid assumption for free-radicals and atomic species) the following equation is obtained:

$$\text{Rate of heterogeneous termination} = k_w [A^\bullet] \quad (1)$$

where $[A^\bullet]$ represents the generic intermediate species concentration.

Following the notation setting in Part I:



in our problem of multiple wall reactions we can express in a more general way the heterogeneous reactions kinetic constants as:

$$k_{w_j} = k_{c,j} \sigma_i \quad i = 8, \dots, 12 \quad j = i + 7 \quad (2)$$

where $k_{c,j}$ is the rate of collisions (number of collisions per unit time) of the intermediate species with the reactor wall and σ_i is a collision efficiency. The value of $k_{c,j}$ is obtained from the kinetic theory of gases (wall reactions are always negligible in liquid systems due to the intermediate species slow diffusion process towards the reactor walls). The collision efficiency for free radicals is generally considered equal to 10^{-5} or lower [Noyes, 1951; Chiltz *et al.*, 1963] while for atomic chlorine a value of 10^{-4} is recommended [Noyes, 1951]. Substituting the values of $k_{c,j}$ and σ_i in Eq. (2), one gets:

$$k_{w_j} = N_i T^{1/2} \quad i = 8, \dots, 12 \quad j = i + 7 \quad (3)$$

Values for N_i were given elsewhere [Cabrera *et al.*, 1996]. Further ahead in this paper a parametric study of the effect of this adoption on the reactor performance will be reported.

With this background the reaction rates for the heterogeneous reactions are described by:

$$\Omega_{w_i}(\xi) = k_{w_j} \psi_i(\xi) \quad i = 8, \dots, 12 \quad j = i + 7 \quad (4)$$

where ξ is the dimensionless axial coordinate.

As we indicated above, the photoreactor here analyzed is a cylindrical tube located in one of the focus of a cylindrical reflector of elliptical cross section. The tubular lamp is in the other focus. The mathematical model corresponds to a fairly comprehensive case for which the following consideration apply [Cabrera *et al.*, 1996]: (i) Steady-state operation and incompressible flow of a Newtonian fluid, (ii) Azimuthal symmetry inside the reactor, (iii) Fully developed laminar flow, (iv) Constant physical properties, (v) Velocity profile independent of the mass transfer rates, (vi) Negligible thermal effects of the employed radiation (valid for the employed wavelengths and considering proper cooling of the infrared radiation produced by the lamp), (vii) Negligible viscous dissipation, (viii) Negligible axial conduction when as compared with convective flow, (ix) Axial diffusion negligible as

compared with the convective flow, (x) Fickian forms may be used for the diffusion coefficients of the multicomponent mixture [Stefan - Maxwell forms can also be used as it was done by De Bernardes and Cassano, 1986], (xi) Non-adiabatic reactor walls.

A system of coupled integro-differential equations results from writing in dimensionless form the mass, thermal and radiation balances. From the mathematical point of view, consideration of the heterogeneous termination reactions leads to a problem of non-homogeneous boundary conditions which appear as such in the species mass balances. We have recently developed a set of integral equation, expressed in terms of Green's functions, which are formally obtained from the original set of differential equations of the model [Grau *et al.*, 1996.b]. The solutions showed convenient features for the iteration procedure required by numerical solution using the necessary successive approximations. These equations will be used now to study the regimen of applicability of the simplification introduced by solving the equations without considering heterogeneous reactions.

LOCAL DEVIATIONS AND INTEGRAL EQUATIONS

The local contribution of heterogeneous -at the wall- reactions is given by the difference between the composition local value, ψ_i , and the contribution due to the homogeneous ones, ψ_i^H . On the basis of this argument, we make use of the following decomposition:

$$\psi_i(\rho, \xi) = \psi_i^H(\rho, \xi) + \tilde{\psi}_i^w(\rho, \xi) \quad (5)$$

where $\tilde{\psi}_i^w$ is an intrinsic local deviation.

The equation that describes exactly the $\tilde{\psi}_i^w(\rho, \xi)$ - field is given by [Cabrera *et al.*, 1996]:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_i^w(\rho, \xi) = & - \left\{ \sum_1^\infty \frac{\phi_n(1) \phi_n(\rho)}{A_n^2 \lambda_n^2} - \left(\rho^2 - \frac{\rho^4}{4} - \frac{7}{24} \right) \right\} \\ & \times \text{Sh}w_i \psi_i(1, \xi) \\ & + \frac{1}{\alpha_i} \int_0^\xi d\bar{\xi} G_i(\rho, \xi/1, \bar{\xi}) \text{Sh}w_i \psi_i(1, \bar{\xi}) \end{aligned} \quad (6)$$

for $i = 8, 9, \dots, 12$

where the kernel $G_i(\rho, \xi/1, \bar{\xi})$ in terms of a complete set of orthonormal eigenfunctions $\phi_n(\rho)$ was presented elsewhere [Grau *et al.*, 1996.b]. For this case, the Sherwood number can be written in an appropriate form as:

$$\text{Sh}w_i / \alpha_i = (N_i T^{1/2} / 4) (v / Z) a_R / 4 \quad (7)$$

here, v is the mean fluid velocity, Z is the reactor length, and a_R is the reactor wall surface-to-reactor volume ratio.

However, for practical purposes it is more easy to compare the exact values ψ_i with the one resulting from the assumption that the wall reactions have a null effect in the whole reactor,

$\hat{\psi}_i^H$. Then, it is more convenient to define a local deviation, $\bar{\psi}_i^W$, using the following decomposition:

$$\psi_i(\rho, \xi) = \hat{\psi}_i^H(\rho, \xi) + \bar{\psi}_i^W(\rho, \xi) \quad (8)$$

Eqs (5) and (8) allows us to write the following relationship between both deviations:

$$\bar{\psi}_i^W(\rho, \xi) = [\psi_i^H(\rho, \xi) - \hat{\psi}_i^H(\rho, \xi)] + \tilde{\psi}_i^W(\rho, \xi) \quad (9)$$

A replacement the Eq. (6) into Eq. (9) results in:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_i^W(\rho, \xi) = & [\psi_i^H(\rho, \xi) - \hat{\psi}_i^H(\rho, \xi)] \\ & - \left\{ \sum_1^{\infty} \frac{\phi_n(1) \phi_n(\rho)}{A_n^2 \lambda_n^2} - \left(\rho^2 - \frac{\rho^4}{4} - \frac{7}{24} \right) \right\} \text{Sh}w_i \psi_i(1, \xi) \\ & + \frac{1}{\alpha_i} \int_0^{\xi} d\bar{\xi} G_i(\rho, \xi / 1, \bar{\xi}) \text{Sh}w_i \psi_i(1, \bar{\xi}) \quad (10) \end{aligned}$$

The first term takes care of the local homogeneous contribution, ψ_i^H , it differs from the one estimated under the assumption that the wall reactions have a null effect in the whole reactor, $\hat{\psi}_i^H$. The second term is a formal one which accounts for the non-zero gradient at the wall imposed by non-homogeneous boundary condition at the wall, rigorously its contribution is null except in $\rho=1$. The third one incorporates the cause-effect relation that the wall reactions have on the deviations into the whole reactor, incorporating the tubular reactor integral nature.

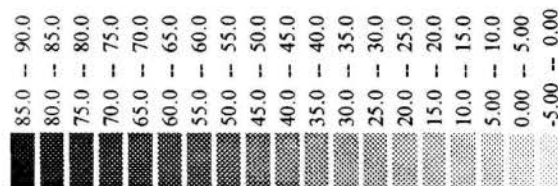
Taking into account the Sherwood number definition given by Eq. (9) an increase of collision efficiency (contained in N_i) and the reactor wall surface-to-reactor volume ratio (a_R) increase proportionally to $\text{Sh}w_i/\alpha_i$ parameter, while temperature has similar effect but with a potential attenuation of the order of 0.5. The fluidodynamic condition effects can be inferred from the presence of the convective and diffusional characteristic times in the α_i parameter (diffusive-to-convective characteristic times ratio) contained implicitly in Green's functions. A decrease of the characteristic diffusion time do not fall on $\text{Sh}w_i/\alpha_i$ but it diminishes proportionally the value of α_i factor contained in the exponential term of Green's functions, thus rising exponentially the influence level of reactions on the wall toward the whole reactor. However, the convection characteristic time effect (residence time) is slighter due to opposed influence to $\text{Sh}w_i/\alpha_i$ and α_i is the one that leads to a partial compensation of opposite effects.

RESULTS AND DISCUSSION

In order to perform the computational experimentation we used the same set of geometrical characteristics of source-reactor systems and reference operative conditions set in Part I of this paper. Computational results confirm that the temperature and residence time have a relatively low influence on the deviations introduced by the wall reactions. However they are sensitively affected by the collision efficiencies, the molecular diffusion coefficients and the reactor wall surface-to-reactor volume ratio. Consequently, the features of the approach put forward above will be applied to a study case, but only focus on discussing the

system response to changes of these more sensitive operative variables.

As we mentioned in Part I, the discussion is made easier by showing only the local deviation concentration of the atomic chlorine. Each set of figures shows the $\bar{\psi}_i^W(\rho, \xi)$ -map for laboratory and industrial scales, under similar operative conditions. Regions have been delimited in accordance with following deviation ranges:



Reference Case: The collision efficiencies for $\text{CH}_3\bullet$, $\text{ClCH}_2\bullet$, $\text{Cl}_2\text{CH}\bullet$ and $\text{Cl}_3\text{C}\bullet$ free radicals were assumed to have the same order of magnitude equal to 10^{-5} . Instead, for atomic chlorine $\text{Cl}\bullet$ we adopted 10^{-4} . The other kinetic parameters were taken from well-established published data [Cabrera *et al.*, 1996].

Figure 1 shows the $\bar{\psi}_{12}^W(\rho, \xi)$ -maps for laboratory and industrial photoreactors operating at process conditions taken as reference, *i.e.*, temperature: 298 K, pressure: 760 mmHg, Reynolds number: 1500, chlorine-to-methane feed molar ratio: 9.5, and initial chlorine molar fraction: 0.15.

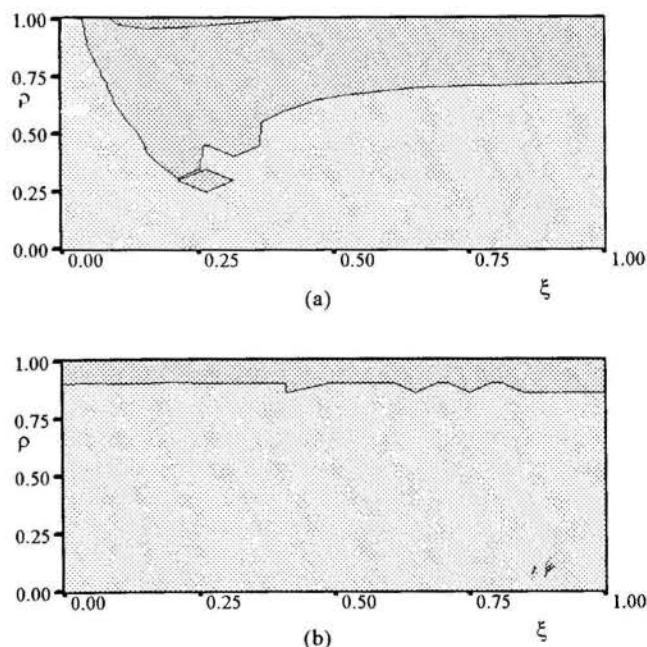


Figure 1 - Reference case. Deviation levels of the atomic chlorine with radial and axial photoreactor positions for: (a.) Laboratory scale and (b.) Industrial scale

In both cases, it is seen that close to the reactor wall there is a greater deviation level, relatively much more narrowed for industrial scale. The form of Eqs (6) and (10) provides, through their relationships indicated on the R.H.S., a substantial insight regarding these observable effects. Since for industrial scale the wall surface-to-reactor volume ratios are smaller than the laboratory ones ($\text{Sh}w_i$ is 6.25 times smaller) and conversely

the diffusion characteristic times are rather largess ($1/\alpha_i$ is 30 times greater), the wall reactions affect moderately the deviations in a small region close to them and just tenuously for point located far away from them due to a smaller Sherwood number and a slow transfer process in radial direction as consequence of partially controlling diffusion regime.

However, even if the wall reactions may introduce deviations either moderate or great significance within a very narrow region close to the wall, such distribution lost its impact at the moment of calculating the average concentrations which are definitely important for practical applications. This comes evident when the definition of average concentration for a tubular reactor with laminar flow regime is inspected:

$$\langle \psi_i(\xi) \rangle = 4 \int_0^1 d\bar{\rho} (1 - \bar{\rho}^2) \psi_i(\bar{\rho}, \xi) \quad (11)$$

Note that the local contributions of the concentration, $\psi_i(\rho, \xi)$, to the average value, $\langle \psi_i(\xi) \rangle$, are attenuated with a weight function given by $(1 - \rho^2)$, so that the local contributions within $0.7 < \rho < 1.0$ have an attenuated incidence by a factor between 0.51 at $\rho = 0.7$, to 0.00 at $\rho = 1.0$.

Computational experimentation reveals that for laboratory reactor scale in spite of the moderate deviation levels, the prediction errors of the average reactant conversions (Cl_2 : 0.68%, CH_4 : 0.58%) and product compositions (ClCH_3 : 0.48 %, Cl_2CH_2 : 1.36 %, Cl_3CH : 2.66%, Cl_4C : 4.20 %) are close to the acceptability limit within the range of admissible experimental errors. For industrial reactor scale, not only the prediction errors of average reactant conversions (Cl_2 : 0.02%, CH_4 : 0.01%) but also the average product compositions ones (ClCH_3 : 0.00 %, Cl_2CH_2 : 0.00 %, Cl_3CH : 0.06%, Cl_4C : 0.14 %) are very low.

Clearly, under these conditions (low collision efficiency) and for practical purposes, the effect of reactions on the wall is of difficult observance because it is in the order of the experimental errors.

Collision efficiency effects: In order to analyze the effects of the eventual uncertainty as regards the knowledge of the values of collision efficiencies, a representative range of values of them was taken and the equations that describe the deviation fields were solved within this range. Figure 2 shows the $\bar{\psi}_{12}^w(\rho, \xi)$ -maps for laboratory and industrial photoreactors using extreme values of the collision efficiencies, *i.e.*, $\sigma = 10^0$ for atomic chlorine ($\text{Cl}\bullet$), and $\sigma = 10^{-1}$ for other free radicals ($\text{CH}_3\bullet$, $\text{ClCH}_2\bullet$, $\text{Cl}_2\text{CH}\bullet$ and $\text{Cl}_3\text{C}\bullet$).

On Figure 2, it can be observed the deviation levels as well as the regions influenced by the wall reaction increase in relation to case the smaller efficiencies collision values (see Figure 1). In spite of these changes, the impact of all them on the average reactant conversions and product compositions prediction errors (Cl_2 : 0.95%, CH_4 : 0.56%, and, ClCH_3 : 0.07%, Cl_2CH_2 : 0.50%, Cl_3CH : 1.94%, Cl_4C : 4.70%, respectively) is minimal for industrial scale. While, the error levels turn down the validity of this conclusion for a laboratory scale (Cl_2 : 14.47%, CH_4 : 12.82%, and, ClCH_3 : 10.97%, Cl_2CH_2 : 26.89%, Cl_3CH : 44.72%, Cl_4C : 64.23%).

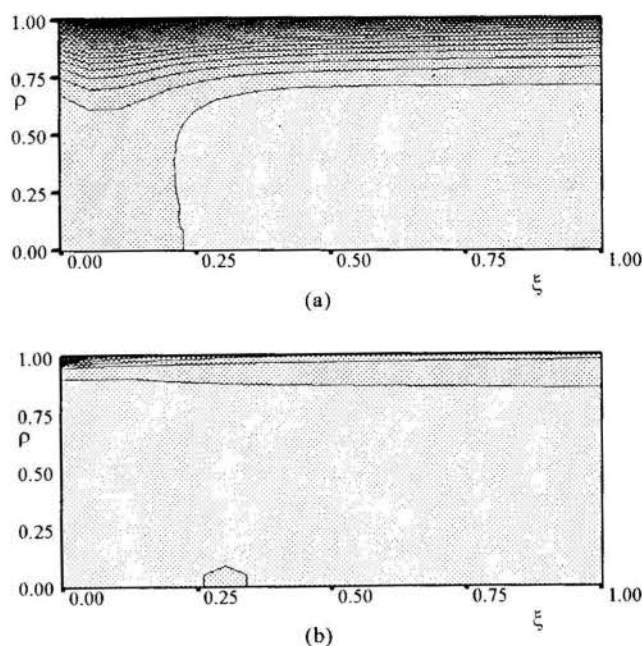


Figure 2 - Collision efficiencies effects. Deviation levels of the atomic chlorine with radial and axial photoreactor positions for: (a.) Laboratory scale and (b.) Industrial scale

It should be remarked that the above conclusion corresponds to an extreme values of collision efficiencies. In rigor, the existing uncertainty as regards the knowledge of them -in relation to one or two magnitudes orders- is irrelevant for practical purposes when free radicals diffusion process is controlling as it happens at industrial scale, even at low pressures operations (of the order of 76 mmHg). The diffusive limitation makes the deviations acquire local significance, and be highly concentrated in a very narrow region adjacent to the wall. Opposite to what happens with the MSSA, this type of distribution influence the average concentrations value slightly for a velocity parabolic profile reactor. Consequently, variations in the collision efficiency value magnitude order to $(10^{-4}$ to 10^{-3} for $\text{Cl}\bullet$, 10^{-5} to 10^{-4} for other free radicals) established significant local deviations near the wall, but they have a very low effect on the reaction products conversions. This conclusion lost its validity when diffusion is no the limiting one like the case of laboratory reactors because a higher velocity transport in radical direction equalizes the concentration gradients thus leading to major deviation levels in the reactor center proximity. Thus, changes of magnitude order in the collision efficiency values have significant effects on the product distributions. The situation is more critical when they are operated at low pressures. Only for industrial scale the wall reactions can safely be neglected in most practical situations. Hence, a feasible simplification, when the reactor scale increases, will be to disregard the heterogeneous termination step in the kinetic mechanism, thus, for all chemical species the reactor wall is nonpermeable.

Pressure effects: A controlling diffusive regime attenuates the heterogeneous reactions effects on the wall proximities. A pressure increase (or decrease) has an opposite effect on the diffusion process rate, decrease (or increase). Then, the influence of wall reactions may becomes dependent upon the pressure, the more if the photoreactor is operated at greatly low or high pressures. Figure 3 shows the $\bar{\psi}_{12}^w(\rho, \xi)$ -maps for

laboratory and industrial photoreactors at low pressure (76 mmHg).

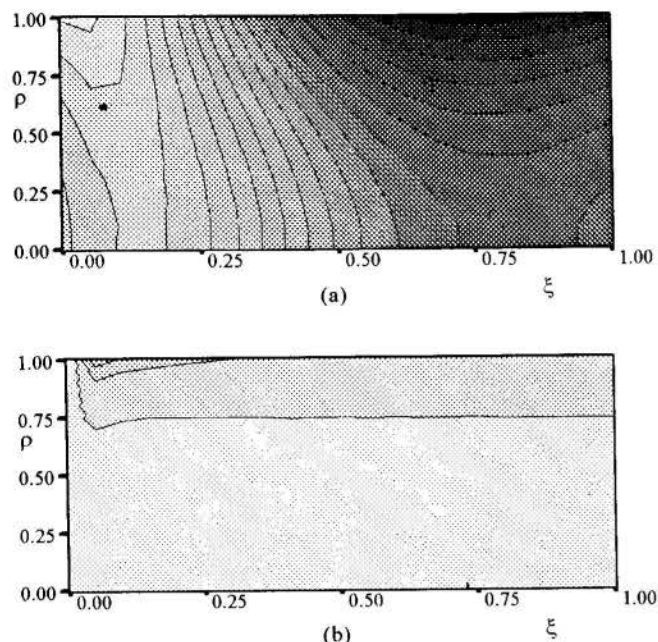


Figure 3 - Pressure effects. Deviation levels of the atomic chlorine with radial and axial photoreactor positions for: (a.) Laboratory scale and (b.) Industrial scale

Clearly, when the diffusion regime is very fast (10 times greater than in Figure 1) the wall reactions have a more elongated region of influence. A greater mobility of radicals leads to a net increase of radial fluxes which increase the effectiveness of reactions on the wall and equalizes upward the radial gradients with the consequent increase of the deviation level on all the transversal sections. For these conditions the consideration of nonpermeable wall is not a simplification reasonably acceptable. Eq.(10) accounts to this through the functional relationships with α_4 parameter.

For laboratory scale the reactant conversion (Cl_2 : 3.96%, CH_4 : 3.80%) and product concentrations (ClCH_3 : 3.68%, Cl_2CH_2 : 7.44%, Cl_3CH : 10.93%, Cl_4C : 11.93%) prediction errors increase in relation to reference case in which the pressure was ten times greater. Again, for industrial scale the error are extremely low (Cl_2 : 0.42%, CH_4 : 0.31%, and, ClCH_3 : 0.14%, Cl_2CH_2 : 0.48%, Cl_3CH : 1.00%, Cl_4C : 1.74%). Then, the consideration of nonpermeable wall is an acceptable simplification for industrial reactors. But, the situation established for laboratory reactors is different even at low operation pressures (e. g. of the order of 76 mmHg) owing to less controlling diffusive regimen.

Wall surface-to-reactor volume ratio effects: A decrease in the wall surface to reactor volume ratio increases the characteristic time of heterogeneous reaction but also increases the diffusion characteristic time very much. The local deviations near the wall are slighter but radial profiles are more pronounced. Then, the lower wall surface-to-reactor volume ratio the smaller deviations is. For practical purposes, the consideration of nonpermeable wall could be a good simplification for lower reactor surface/volume ratios, i.e., for industrial scale reactors.

CONCLUSIONS

Particularly, for the photochlorination system analyzed, these results confirm that the uncertainty of the knowledge of precise and exact values of collision efficiencies, which could be in the range of one or two magnitude orders, have no significant effect on the prediction error of the average conversions or product composition in a industrial scale photo-reactor, but it should deserve some attention in a laboratory reactors.

Moreover, the consideration of nonpermeable (non reactive) wall reactor should be reasonable for the cases where diffusion is a partially controlling regime of the transport rate of the species such as industrial scale, or laboratory scale at normal or high pressures. For these cases, although significant deviations in the region close to the wall occurs their influence is lessened when average concentrations are calculating for practical purposes.

Although this treatment has been applied to photo-reactor modeling with scale-up purposes, it is generally valid for the study of heterogeneous reaction effects in catalytic wall reactors.

REFERENCES

- Cabrera, M. I., Alfano, O. M. and Cassano, A. E., 1991, "Selectivity Studies in the Photochlorination of Methane I: Reactor Model and Kinetic Studies in a non-Isothermal, Polychromatic Environment", *Chem. Eng. Comm.*, 107, pp. 95-122.
- Cabrera, M. I., Grau, R. J. and Cassano, A. E., 1996, "The Tubular Reactor in Laminar Flow Regime: An Integral Equation Approach - III. Application to Reactor Modeling Involving Free-Radical Reactions", to be published.
- Chiltz, G., Goldfinger, P., Huybrechts, G., Martens, G. and Verbeke, G., 1963, "Atomic Chlorination of Simple Hydrocarbon Derivatives in the Gas Phase", *Chem. Rev.*, 63, pp. 355-372.
- Clariá, M. A., Irazoqui, H. A. and Cassano, A. E., 1988, "A Priori Design of a Photoreactor for the Chlorination of Ethane", *AIChE J.*, 34, pp. 366-382.
- De Bernardes, E. R. and Cassano, A. E., 1986, "Methodology for an Optimal Design of a Photoreactor. Application to Methane Chloroderivatives Production", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 25, pp. 601-612.
- Grau, R. J., Cabrera, M. I. and Cassano, A. E., 1996a, "Methane Photo-Polychlorination in the the Non-Isothermal Tubular Reactor in Laminar Flow Regime. I. Regime of Applicability of Steady-State Approximation vs. Scale-up", *VI Congreso Latinoamericano de Transferencia de Calor y Materia*, Florianópolis, Brasil.
- Grau, R. J., Cabrera, M. I. and Cassano, A. E., 1996b, "The Tubular Reactor in Laminar Flow Regime: An Integral Equation Approach - II. Non- Isothermal System with Complex, Arbitrary, Homogeneous and Heterogeneous -at the wall- Reactions", to be published.
- Noyes, W. A. and Leighton, P. A., 1941, *The Photochemistry of Gases*, Reinhold: New York.
- Noyes, R. M., 1951, *J. Am. Chem. Soc.*, 73, pp. 3039.

TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO

PARTE I

CARACTERIZACION, ECUACIONES FUNDAMENTALES DEL MODELADO Y CLASIFICACION

ABCN

Oscar D. Quiroga^(*), Jorge R. Avanza^(**), Angel J. Fusco^(**) y Luis T. Villa^(*)^(*) INIQUI - Facultad de Ingeniería

Universidad Nacional de Salta

Buenos Aires 177 - 4400 Salta - Argentina

^(**) Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura

Universidad Nacional del Nordeste

9 de Julio 1449 - 3400 Corrientes - Argentina

RESUMEN

En esta comunicación se analizan, caracterizan y clasifican las transformaciones fluido-sólido reactivo, tales como: disolución de sólidos en líquidos, vaporización de sólidos en gases y reacciones heterogéneas sólido-fluido no catalíticas. Se formulan las ecuaciones fundamentales para su modelado.

INTRODUCCION

Con el término generalizado transformaciones fluido-sólido reactivo nos estamos refiriendo a las reacciones sólido-fluido no catalíticas, a las disoluciones de sólidos en líquidos y a las vaporizaciones de sólidos en gases - conocidas también como sublimaciones. Todas ellas tienen en común los mismos procedimientos básicos de modelado, y en sus correspondientes procesos suelen emplearse equipos similares. Estas transformaciones juegan un rol importante en la tecnología de muchos procesos industriales, lo cual justifica el interés que ha despertado su modelado por parte de numerosos investigadores, destacándose entre los pioneros: Shchukarev (1896); Noyes y Whitney (1897). Ejemplos de ellas se encuentran en los procesos de: combustión de combustibles sólidos; gasificación de carbón; combustión de desechos sólidos, y en muchas industrias de procesamiento de minerales.

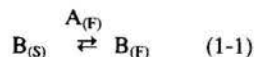
La información básica necesaria en análisis de proceso se obtiene mediante "experimentación" y "tratamiento cinético", lo cual involucra un conjunto de tareas, tales como: caracterización del reactivo sólido y elección del reactivo fluido; selección del reactor experimental; programación y ejecución de los experimentos; estima de las variables estadísticas adjuntas a los datos experimentales; selección y desarrollo de modelos, estima de sus coeficientes y de sus variables estadísticas adjuntas; discriminación de modelos; etc.

De los diferentes problemas que se presentan y deben resolverse durante el tratamiento cinético, aquí nos interesa analizar el que atañe a la selección y desarrollo de modelos para los diferentes casos que pueden observarse, respecto de la naturaleza de la transformación, del comportamiento de la superficie interfacial, y de los cambios estructurales que experimenta la partícula reactante. Para ello comenzaremos analizando las características generales y particulares que presentan las transformaciones fluido-sólido reactivo, y continuaremos con la formulación de las ecuaciones fundamentales del modelado. Concluiremos con una clasificación general de las transformaciones fluido-sólido reactivo, mediante la cual puede especificarse fácilmente para que caso es válido cada uno de los modelos que han sido desarrollados.

CARACTERIZACION DE LAS TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVOTransformaciones por Interacciones Físicas

En estas transformaciones las especies químicas pasan de una fase a la otra sin que sus estructuras químicas se vean alte-

radas. Como ejemplos tenemos las disoluciones de sólidos en líquidos y las vaporizaciones de sólidos en gases. Ambas pueden ser formuladas como:



Es común observar que estas transformaciones son reversibles; que su velocidad puede ser controlada por la velocidad de transferencia de masa del soluto, o por la velocidad de disociación de los iones o de las moléculas sólidas; y puede ser poco sensible a las variaciones de la temperatura. En relación a su modelado cinético, debemos destacar los trabajos de: Shchukarev (1896); Noyes y Whitney (1897); Hixson y Crowell (1931); y Wilhelm et al. (1941).

Transformaciones por Interacciones Químicas

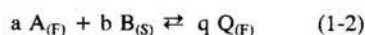
Estas transformaciones se caracterizan porque: no todas las especies químicas presentes en las fases fluida y sólida conservan sus estructuras químicas; generalmente, el calor de la transformación (calor de reacción) es alto, y; no siempre son reversibles. Respecto de su velocidad cabe señalar: 1º) puede ser controlada por la velocidad de transferencia de masa, o por la de difusión del reactivo fluido a través de regiones sólidas porosas, o por la velocidad de las etapas de adsorción-reacción-desorción, o por la velocidad de formación de la interfase reaccional; 2º) no siempre es controlada por el equilibrio químico, y; 3º) dependiendo de las etapas que la controlan, puede ser muy, mediana o poco sensible a las variaciones de la temperatura.

Tomando en cuenta el estado de agregación de los productos formados, la presencia de reacciones homogéneas acopladas y el número de reactivos sólidos, distinguimos diferentes tipos de reacciones fluido-sólido reactivo. A saber:

- i) Reacciones fluido-sólido reactivo simples

Se caracterizan por el hecho de que las especies químicas participan en una única reacción química independiente. Por ej.:

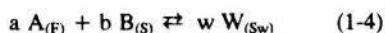
a) Reacciones con fluidificación - gasificación o licuefacción - del reactivo sólido



b) Reacciones con formación simultánea de un producto sólido y otro fluido



c) Reacciones con formación de un producto sólido

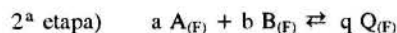


donde: a, b, q y w, son coeficientes estequiométricos. Una introducción al modelado de estas reacciones, puede verse en la mayoría de los libros de texto que se utilizan en "Ingeniería de las Reacciones Químicas y Diseño de Reactores", por ej.: Levenspiel (1964) y (1988); Petersen (1965); Smith (1970); Froment y Bischoff (1990); Carberry (1980); Farina et al. (1986). En términos específicos, el tema ha sido tratado por: Delmon (1969); Szekely et al. (1976); Habashi (1980), y; Doraiswamy y Sharma (1984). También debemos mencionar las monografías de Szekely (1977) y de Gavalas (1986), y las revisiones que realizaron: Ramachandran y Doraiswamy (1982); Alfano y Arce (1982); Sahimi et al. (1990).

- ii) Reacciones fluido-sólido reactivo mixtas

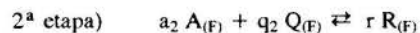
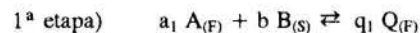
Estas reacciones se realizan en dos etapas sucesivas. La segunda es siempre una *reacción química homogénea*, mientras que la primera puede ser: a) una disolución o vaporización del reactivo sólido; b) una reacción fluido-sólido reactivo química simple del tipo (1-2) o (1-3). Por ej.:

- a) primera etapa por disolución o vaporización



el modelado de esta transformación puede verse en Baldi y Specchia (1976).

- b) primera etapa por reacción simple



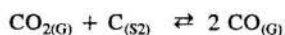
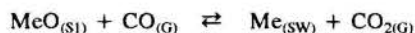
de acuerdo con Alfano y Arce (1982), esta transformación se presenta en la combustión de carbón.

- iii) Reacciones fluido-sólido reactivo complejas

En estas reacciones se hallan involucrados dos o más reactivos sólidos, y uno o más reactivos fluidos. Como ejemplo importante de estas reacciones tenemos la reducción de óxidos metálicos con carbón:



donde: Me es un metal. Aunque aparentemente esta ecuación indica que se trata de una reacción sólido-sólido, el mecanismo actual pasa a través de intermediarios gaseosos:



El modelado de estas reacciones ha sido tratado por Szekely et al. (1976).

CARACTERÍSTICAS GENERALES DE LAS REACCIONES FLUIDO-SÓLIDO REACTIVO

Las reacciones homogéneas se nos presentan con una imagen relativamente clara, según la cual la reacción se inicia cuando las especies químicas reaccionantes se encuentran en un punto del espacio con la orientación adecuada. Si las condiciones de reacción son apropiadas, entonces una cierta proporción de estos eventos reactivos dará como resultado nuevas especies químicas,

a las que llamaremos productos. La velocidad de estas reacciones es determinada por la composición de la mezcla reaccionante, la temperatura, y la presión.

En cambio, las reacciones fluido-sólido reactivo presentan una situación completamente distinta, ya que al ser sólido uno de los reactivos entonces necesariamente la reacción debe tener lugar en la zona de su superficie que se halla en contacto con el reactivo fluido, a la que denominaremos *superficie interfacial*. A esta zona debe arribar el reactivo fluido, producirse la reacción y desde allí deben emigrar los productos fluidos.

Se ha observado experimentalmente que no todas las superficies interfaciales de los sólidos reactivos se comportan del mismo modo. En algunos sólidos lo hacen como si, desde el momento que los reactivos se ponen en contacto, toda la superficie interfacial tuviera un grado de reactividad independiente del tiempo y de las coordenadas de la superficie. Es decir que se comportan como si la superficie interfacial fuera *uniformemente reactiva*. A las reacciones fluido-sólido reactivo que exhiben este comportamiento las denominaremos *transformaciones por ataque uniforme*.

En otros reactivos sólidos se ha observado que la superficie interfacial no es uniformemente reactiva, sino que su grado de reactividad es función del tiempo y/o de las coordenadas de la superficie. Es decir que dentro de la zona que ocupa la superficie interfacial debemos distinguir una subzona, a la que denominaremos *interfase reaccional*, donde tiene lugar la reacción. En estas transformaciones, la formación de la interfase reaccional no es instantánea, sino que se forma luego que ha transcurrido un cierto tiempo de contacto entre los reactivos, denominado periodo de *latencia* o de *incubación*, o tiempo de *inducción*. A las reacciones fluido-sólido reactivo que se comportan de este modo las denominaremos *transformaciones con reactividad no uniforme*. En algunos casos se ha observado que la superficie interfacial presenta diferentes grados de reactividad, siendo los puntos de mayor reactividad donde inicia su ataque el reactivo fluido. Algunos autores, por ej. Boldyrev et al. (1979), denominan a esta clase de reacciones *topoquímicas* o *autolocalizadas*. En otros casos, se ha observado que la superficie interfacial inicial se halla parcial o totalmente desactivada, o bien en ella se encuentran adsorbidas especies químicas diferentes de las del reactivo fluido. Estos casos, como ha sido señalado por Shieh y Lee (1992), se caracterizan por el hecho de que la interfase reaccional se forma a medida que la superficie interfacial se activa o se eliminan las impurezas adsorbidas.

El cambio que experimenta una partícula esférica no porosa que se transforma por *ataque uniforme* y otra que lo hace siguiendo un comportamiento *topoquímico*, puede verse en las Figs. 1-1 y 1-2, respectivamente.

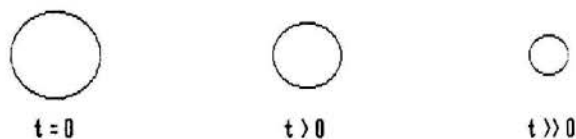


Figura 1-1. Transformación por ataque uniforme.

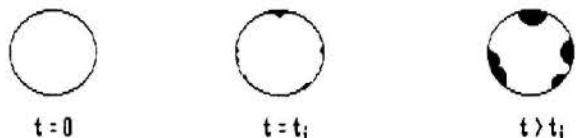


Figura 1-2. Transformación por ataque no uniforme de tipo autolocalizada.

Además de los comportamientos diferentes que puede exhi-

bir la superficie interfacial, también debemos mencionar los cambios estructurales que experimenta la partícula reactante - como por ej., los que se muestran en las Figs. 1-3 y 1-4. Estos cambios tienen incidencia directa sobre el régimen de velocidad que gobierna la reacción, y a través de ellos pueden ocurrir variaciones graduales de regímenes o pueden dar lugar a la aparición de regímenes metaestables. La naturaleza de estos cambios depende de las especies químicas reactantes, de la formación o no de productos sólidos que permanezcan adheridos a la partícula reactante, y de diversos factores, como por ej.: la presión, la temperatura y la concentración del reactivo fluido; el grado de pureza del reactivo sólido, su porosidad, los tratamientos físicos y químicos a los que fue sometido previamente; etc.

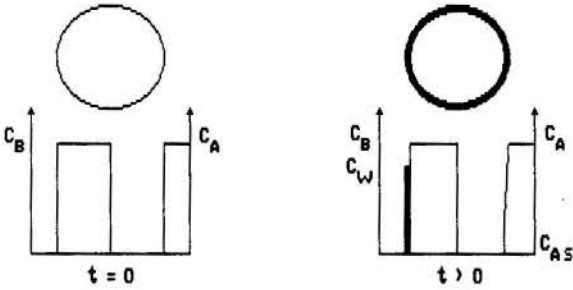


Figura 1-3. Partícula reactante no porosa que da un producto sólido no poroso que permanece adherido a la partícula.

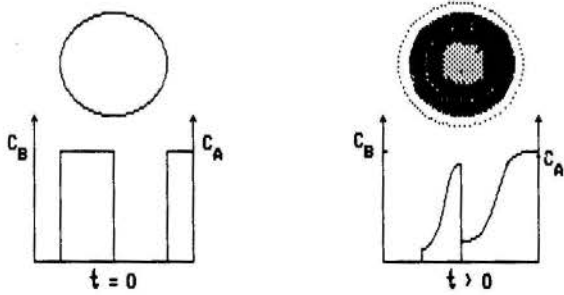


Figura 1-4. Partícula reactante porosa que da un producto fluido y otro sólido poroso que permanece adherido a la partícula.

ETAPAS INVOLUCRADAS EN LAS REACCIONES FLUIDO-SÓLIDO REACTIVO

En la Fig. 1-5 presentamos un esquema de las etapas de transporte y de reacción química involucradas en una reacción fluido sólido-reactivo, de tipo generalizada. Este esquema está basado sobre los que se utilizan tradicionalmente en el estudio de reacciones heterogéneas sólido-fluido catalíticas - ver por ej.: Levenspiel (1962), Froment y Bischoff (1990) y Szekely et al. (1976). Se diferencia de éstos en que aquí hacemos una distinción entre las etapas involucradas en la fase fluida de las que lo están en las fases sólidas, y de las que lo están en la interfase. También presentamos a la *formación de la interfase reaccional* como una de las posibles etapas controlantes de la velocidad inicial de la transformación, hecho que ha sido observado experimentalmente en numerosas transformaciones fluido-sólido reactivo; y se indica expresamente la participación activa de la interfase reaccional en las etapas secuenciales adsorción-reacción-desorción, a través de las cuales pueden justificarse cambios de mecanismos cinéticos que han sido observados en muchas reacciones heterogéneas, cuyo sólido reactivo ha sido sometido previamente a diferentes tratamientos físicos y/o químicos.

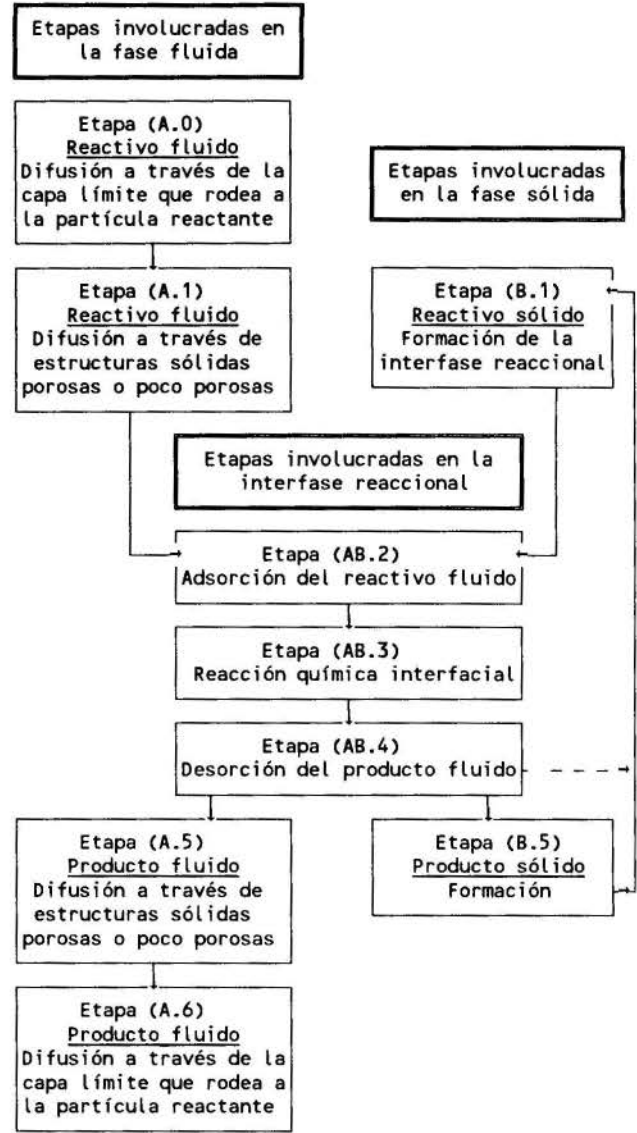


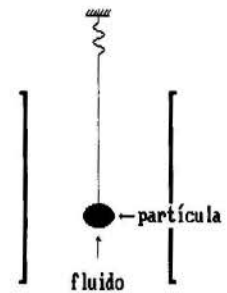
Figura 1-5. Etapas involucradas en las reacciones fluido-sólido reactivo.

ECUACIONES FUNDAMENTALES

Consideremos el caso de una partícula sólida que se halla en contacto con un fluido - como por ej. el de la figura adjunta -. Si ambos se encuentran en condiciones de no equilibrio termodinámico, entonces la variación que experimenta la masa de la partícula, debida a la interacción fisicoquímica mutua, puede ser expresada como

$$\frac{dM_p}{dt} = \int_{\Omega} (-\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_F) dS = -n_F \Omega \quad (1-5)$$

donde: M_p y Ω , son la masa y la superficie externa de la partícula, respectivamente; t , tiempo; \mathbf{n} , vector normal a Ω ; \mathbf{n}_F , vector densidad de flujo de masa total de las especies químicas fluidas; n_F , flujo másico medio total de las especies químicas fluidas, evaluado en Ω y calculado como



$$n_F = \sum_{i=1}^I n_i = - \int_{\Omega} \sum_{i=1}^I (-n_i \cdot n_i) dS \quad (1-6)$$

sujeto a la siguiente restricción:

(HG1) "en Ω no hay acumulación de materia de las especies químicas fluidas."

Muchos de los modelos que han sido desarrollados para interpretar los cambios que tienen lugar en las transformaciones fluido-sólido reactivo, se basan, implícita o explícitamente, sobre la ecuación de balance de masa macroscópico (1-5). En esta ecuación no se contemplan otros fenómenos que también pueden modificar la masa de la partícula, los cuales se explicitan en la siguiente hipótesis:

(HG2) "la variación de la masa de la partícula reactante se debe únicamente a la interacción fisicoquímica que experimenta con el fluido que la rodea, quedando excluidos los fenómenos de disgregación o rotura de la partícula, y de aglomeración o sinterización con otras partículas."

La formulación de n_F en función de los flujos másicos de las especies químicas fluidas, n_i , se basa sobre las ecuaciones estequiométricas de cada transformación, tal como veremos a continuación.

Caso 1: Transformaciones por Interacciones Físicas

De la ec.(1-1), tomando en cuenta que la única especie química fluida que puede difundir desde Ω hacia la fase fluida - y viceversa - es el soluto B, obtenemos

$$n_F = n_B = m_B N_B \quad (1-7)$$

cuya sustitución en la ec.(1-5) nos da

$$\frac{dM_p}{dt} = - m_B N_B \Omega \quad (1-8)$$

o bien, en función de la masa del sólido reactivo B,

$$\frac{dM}{dt} = - m_B N_B \Omega \quad (1-9)$$

donde: M , es la masa de reactivo sólido B asociada a la partícula reactante; m_B , peso molecular de B; n_B y N_B , son el flujo másico medio y el flujo molar medio del soluto, respectivamente, evaluados en Ω .

La (1-9) es la ecuación fundamental del modelado de transformaciones fluido-sólido reactivo por interacciones físicas que satisfacen la hipótesis (HG2). Es considerada fundamental por el hecho de que ha sido deducida independientemente de las características estructurales de la partícula, de la naturaleza de la interfase reaccional y de los mecanismos cinéticos involucrados. Esta ecuación puede emplearse tanto en el modelado de partículas reactantes formadas por un reactivo sólido puro, como así también en el modelado de partículas constituidas por un sólido inerte poroso no disgregable, cuyos poros se hallan ocupados total o parcialmente por un único reactivo sólido B. El flujo molar medio N_B es calculado comúnmente mediante la "ley de la transferencia de masa de Newton":

$$N_B = k_c(C_{B\Omega} - C_B) \quad (1-10)$$

donde: k_c , es el coeficiente de transferencia de masa; $C_{B\Omega}$, concentración molar del soluto evaluada en Ω ; C_B , concentración molar del soluto en el seno de la fase fluida

En los casos de disoluciones o vaporizaciones de partículas no porosas, para evaluar $C_{B\Omega}$ suele adoptarse frecuentemente el criterio que utilizaron Noyes y Whitney (1897), generalizado posteriormente por Bird y col. (1964). Este criterio consiste en

suponer que $C_{B\Omega}$ es igual al valor que tiene la concentración de saturación del soluto B en el solvente A, cuando se trata de disoluciones de sólidos en líquidos; y $C_{B\Omega} = p_v/R T$, en los casos de vaporizaciones, donde p_v es la presión de vapor del sólido B. Para el tratamiento de ambos casos adoptaremos $C_{B\Omega} = C_B^*$, y

$$N_B = k_c(C_B^* - C_B) \quad (1-11)$$

La ec.(1-11) con C_B^* constante, ha sido empleada en numerosas investigaciones relativas a la disolución y a la vaporización de sólidos no porosos, pero debe tenerse en mente que es válida sólo cuando la formación de C_B^* resulte instantánea, e independiente de las coordenadas internas de Ω .

Caso 2: Reacciones Químicas Simples

Para formular n_F nos basamos sobre las reacciones (1-2) y (1-3), en las que observamos que hay sólo dos especies químicas fluidas: el reactivo A y el producto Q. Por lo tanto,

$$n_F = n_A + n_Q \quad (1-12)$$

Para vincular n_A y n_Q con la velocidad de la reacción, debemos tomar en cuenta, en primer lugar, que las ecs.(1-2) y (1-3) deben satisfacer la siguiente restricción

$$\sum_{i=A}^W m_i v_i = 0 \quad (1-13)$$

y, en segundo lugar debemos formular la hipótesis (HG1), la cual más que una hipótesis es una restricción impuesta por el principio de conservación de la masa del sistema. Esta restricción puede expresarse aproximadamente como:

$$n_i \Omega = v_i m_i r_S \Omega_r \quad (1-14)$$

donde: m_i , es el peso molecular de la i -ésima especie química; v_i , coeficiente estequiométrico ($v_i > 0$, para los productos; y $v_i < 0$, para los reactivos); Ω_r , interfase reaccional; r_S , velocidad de reacción química heterogénea, específica media por unidad de interfase reaccional.

La ec.(1-14) es exacta si y solo si la partícula reactante no es porosa, y resulta una buena aproximación cuando la partícula reactante es porosa, las especies químicas fluidas son gaseosas y en el interior de los poros no hay reacciones homogéneas. También debemos hacer notar que a través de esta ecuación quedan diferenciados los roles que juegan la superficie externa de la partícula, Ω , y la interfase reaccional, Ω_r , y deberíamos esperar que ambas resulten iguales sólo en algunos casos particulares, como por ej.: partícula no porosa, constituida por un reactivo sólido puro que se transforma por ataque uniforme en una reacción del tipo (1-2).

Multiplicando la ec.(1-12) por Ω , y teniendo presente la restricción (1-14), nos da

$$n_F \Omega = (q m_B - a m_A) r_S \Omega_r \quad (1-15)$$

y aplicando la restricción (1-13) a la ec.(1-2), obtenemos

$$q m_Q - a m_A = b m_B$$

cuya combinación con las ecs.(1-5) y (1-15) nos da

$$\frac{dM_p}{dt} = - b m_B r_S \Omega_r \quad (1-16)$$

o bien, en función de la masa de reactivo sólido B asociada a la partícula,

$$\frac{dM}{dt} = - b m_B r_S \Omega_r \quad (1-17)$$

En cambio, al aplicar la restricción (1-13) a la ec.(1-3), obtenemos

$$q m_Q - a m_A = b m_B - w m_W$$

cuya combinación con las ecs.(1-5) y (1-15) nos da

$$\frac{dM_p}{dt} = (w m_W - b m_B) r_S \Omega_r \quad (1-18)$$

Finalmente, combinando la ec.(1-18) con las relaciones de vínculo siguientes

$$M_p = M + M_W \quad (1-19)$$

$$\frac{M^o - M}{b m_B} = \frac{M_W - M_W^o}{w m_W} \quad (1-20)$$

obtenemos nuevamente la ec.(1-17), y además la siguiente ecuación de balance de masa para el producto sólido

$$\frac{dM_W}{dt} = w m_W r_S \Omega_r \quad (1-21)$$

donde: M y M_W , son las masas del reactivo sólido B y del producto sólido W, asociadas a la partícula reactante.

Como bien podemos apreciar, el modelado de reacciones del tipo (1-3), puede basarse sobre la ec.(1-17) o la (1-21). Aquí adoptaremos la (1-17), y la consideraremos ecuación fundamental ya que también ha sido obtenida independientemente de los cambios estructurales de la partícula, de la naturaleza de su interfase reaccional y de los mecanismos cinéticos involucrados en r_S .

Si en una reacción se halla involucrada la *Etapa (A.0)*, entonces N_A y r_S quedan vinculados entre sí a través de la (1-14),

$$N_A \Omega = - a r_S \Omega_r \quad (1-22)$$

con N_A calculado por una ecuación similar a la (1-10)

$$N_A = k_c(C_{A0} - C_A) \quad (1-23)$$

donde: C_{A0} y N_A , son la concentración molar y el flujo molar medio del reactivo fluido A, respectivamente, evaluados en Ω ; C_A , concentración molar del reactivo fluido A en el seno de la fase fluida.

Ecuaciones Fundamentales en Función del Grado de Transformación del Reactivo Sólido

Por definición del grado de transformación del reactivo sólido,

$$X = \frac{M^o - M}{M^o} \quad (1-24)$$

y combinación con las ecs.(1-9) y (1-17) obtenemos las siguientes ecuaciones fundamentales:

- para disoluciones y vaporizaciones de sólidos

$$\frac{dX}{dt} = \frac{m_B N_B \Omega}{M^o} \quad (1-25)$$

- para reacciones fluido-sólido reactivo

$$\frac{dX}{dt} = \frac{b m_B r_S \Omega_r}{M^o} \quad (1-26)$$

Ambas ecuaciones fundamentales contienen implícitamente adjuntas las hipótesis (HG1) y (HG2).

ASPECTOS GENERALES DEL MODELADO DE LAS TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO

Al analizar los diferentes criterios que se han utilizado en el modelado de las transformaciones fluido-sólido reactivo, se concluye que el modelado de las disoluciones y vaporizaciones de

sólidos se basa sobre la ec.(1-25), mientras que el de las reacciones fluido-sólido reactivo sobre la ec.(1-26); y, en esencia, el problema de modelado consiste en resolver estas ecuaciones combinadas con: modelos de N_B , N_A , r_S , Ω y Ω_r ; ecuaciones de continuidad de las especies químicas fluidas; y relaciones de vínculo, respetando restricciones propias para cada sistema. También se observa que en la mayoría de las publicaciones se ha utilizado la siguiente hipótesis:

(HG4) "la transformación se realiza a temperatura constante"

Si bien es cierto que la adopción de esta hipótesis reduce considerablemente el grado de dificultad que suele presentar el modelado de las transformaciones fluido-sólido reactivo, debe tenerse presente que su cumplimiento depende de diversos factores, cuyos efectos deberían ser analizados cuidadosamente.

En relación a los modelos de r_S , cabe decir que en muchos casos se han utilizado los mismos que se emplean en el tratamiento cinético de reacciones homogéneas, siendo de uso frecuente el modelo del tipo ley de la potencia:

$$r_S = k C_{As}^n \quad (1-27)$$

siendo k el coeficiente cinético; C_{As} la concentración molar de A evaluada en Ω_r , y n el orden de reacción con respecto de A.

Con menor frecuencia se han empleado modelos del tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson, siendo el más común

$$r_S = \frac{k C_{As}}{1 + k_1 C_{As}} \quad (1-28)$$

Al respecto, cabe destacar que Hougen y Watson (1962), al referirse a las reacciones sólido-gas no catalíticas, sugieren para su tratamiento utilizar modelos similares a los que se emplean en la catálisis heterogénea sólido-gas. Szekely et al. (1976), refirieron esta sugerencia. También es importante señalar aquí los modelos desarrollados por Habashi (1965) y (1980), sobre la base de la teoría electroquímica de la corrosión.

El conjunto de relaciones de vínculo está constituido, generalmente, por: ecuaciones fenomenológicas que vinculan a los coeficientes de transporte, de transferencia y cinéticos con las variables del proceso; ecuaciones de estado. La formulación de restricciones se realiza tomando en cuenta las ecuaciones estequiométricas de la transformación y el tipo de contactor en el que tiene lugar la transformación.

El modelado de Ω depende principalmente de la forma de la partícula, de la rugosidad de su superficie, del tipo de ataque que experimenta, y de la formación o no de un producto sólido que permanezca adherido a ella. En cambio, el modelado de Ω_r , requiere que se modele primero la superficie interfacial, Ω_i , para lo cual deben tomarse en cuenta las características estructurales iniciales de la partícula reactante, los cambios que experimenta durante la transformación, y el régimen que gobierna la velocidad de la transformación. En el modelado de Ω_r , interesa conocer el tipo de ataque que experimenta la superficie interfacial, por parte del reactivo fluido. Únicamente en los casos de transformaciones por *ataque uniforme*, podemos esperar que Ω_r resulte igual a Ω_i . Analizando los procedimientos de modelado de Ω , de Ω_i y de Ω_r , es posible especificar para que caso es válido cada uno de los métodos que han sido desarrollados para modelar a las transformaciones fluido-sólido reactivo.

CLASIFICACION DE LAS TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO

A modo de conclusión de este trabajo, presentamos una clasificación de las transformaciones fluido-sólido reactivo, en la cual hemos tomado en cuenta la estructura inicial de la partícula reactante y los cambios que experimenta durante la transforma-

ción, y la naturaleza de la superficie interfacial:

- **Transformaciones I**, cuyas características más importantes son: Ia) partícula reactante no porosa, formada por un reactivo sólido puro; Ib) superficie interfacial uniformemente reactiva y coincidente con la superficie externa de la partícula reactante; Ic) no hay formación de productos sólidos que queden adheridos a la partícula; Id) la transformación se inicia en el mismo momento que los reactivos sólido y fluido se ponen en contacto.

- **Transformaciones II**, muestran las siguientes características: IIa) la partícula reactante presenta, inicialmente o durante la transformación, una o más regiones sólidas porosas; IIb) la superficie interfacial es uniformemente reactiva; IIc) la transformación se inicia en el mismo momento que se ponen en contacto los reactivos sólido y fluido.

- **Transformaciones III**, son caracterizadas por: IIIa) una partícula reactante no porosa, formada por un reactivo sólido puro; IIIb) no hay formación de productos sólidos que permanezcan adheridos a la partícula; IIIc) una superficie interfacial coincidente con la superficie externa de la partícula reactante; IIId) la velocidad de formación de la interfase reaccional es la que controla la velocidad inicial de la transformación.

- **Transformaciones IV**, se caracterizan porque: IVa) la partícula reactante presenta, inicialmente o durante la transformación, una o más regiones sólidas porosas; IVb) la formación de la interfase reaccional es la que controla la velocidad inicial de la transformación.

Las principales diferencias que ellas presentan se sintetizan en la Tabla 1-1.

Tabla 1-1. Clasificación de las transformaciones fluido-sólido reactivo.

Partícula		Clase de Transformación
Porosidad: es $\epsilon > 0$?	Ataque: es uniforme?	
no	si	Transformación I
si	si	Transformación II
no	no	Transformación III
si	no	Transformación IV

BIBLIOGRAFIA

Alfano, O. M. and Arce, P. E., 1982, "Non catalytic gas-solid reactions and their application to combustion and gasification. A review", *Lat. Am. J. Heat Mass Transf.*, **6**, 191.

Baldi, G. and Specchia, V., 1976, *Chem. Eng. J.*, **81**, 81.

Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., 1964, "Fenómenos de Transporte", Ed. Reverté.

Boldyrev, V. V., Bulens, M. and Delmon, B., 1979, "The control of Reactivity of Solids.", Elsevier Sc. Pub., New York.

Carberry, J. J., 1980, "Ingeniería de las Reacciones Químicas y Catalíticas", Ed. Géminis, Buenos Aires.

Delmon, B., 1969, "Introduction a la Cinétique Hétérogène", Editions Technip, Paris.

Doraiswamy, L. K. and Sharma, M. M., 1984, "Heterogeneous Reactions", John Wiley and Sons.

Farina, I. H., Ferretti, O. A. y G. F. Barreto, 1986, "Introducción al Diseño de Reactores Químicos", EUDEBA.

Froment, G. F. and Bischoff, K. B., 1990, "Chemical Reactor Analysis and Design", John Wiley & Sons, New York, 2nd.

Gavalas, G., 1986, "Noncatalytic Gas-Solid Reactions with Applications to Char Combustion and Gas Desulfurization", Chapter 3 from "Concepts and Design of Chemical Reactors", S. Whitaker and A. E. Cassano (Editors), Gordon and Breach Science Publishers.

Habashi, F., 1980, "Principles of Extractive Metallurgy. Volume I. General Principles", Gordon and Breach.

Habashi, F., 1965, *J. Chem. Educ.*, **42**, 318.

Hixson and Crowell, 1931, *Ind. Eng. Chem.*, **23**, 923, 1002, 1160.

Hougen, O. A. and K. M. Watson, K. M., 1962, "Chemical Process Principles. Part Three: Kinetics and Catalysis", John Wiley & Sons.

Levenspiel, O., 1988, "El Omnilibro de los Reactores Químicos", Editorial Reverté.

Levenspiel, O., 1964, "Chemical Reaction Engineering", Wiley International Edition.

Noyes, A. A. and W. R. Whitney, W. R., 1897, *J. Am. Chem. Soc.*, **19**, 930.

Petersen, E. E., 1965, "Chemical Reaction Analysis", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

Ramachandran, P. A. and Doraiswamy, L. K., 1982, "Modeling of Noncatalytic Gas-Solid Reactions", *A. I. Ch. E. J.*, **28**(6), 881.

Sahimi, M., Gavalas, G. R. and Tsotsis, T. T., 1990, "Statistical and continuum models of fluid-solid reactions in porous media", *Chem. Eng. Sci.*, **45**(6), 1443.

Shchukarev, A. N., 1896, *J. Russ. Phys. Chem. Soc.*, **28**, 604.

Shieh, M. D. and Lee, C., 1992, *Chem. Eng. Sci.*, **47**, 4017.

Smith, J. M., 1970, "Chemical Engineering Kinetics", 2nd ed., Mc Graw Hill, New York.

Szekely, J., Evans, J. W. and Sohn, H. Y., 1976, "Gas-solid Reactions", Academic Press.

Szekely, J. 1977, "Reactions between porous solids and gases", Chapter 5 from "Chemical Reactor Theory. A Review", N. R. Admunson and L. Lapidus (Editors), Prentice Hall.

Wilhelm, R. H., Conklin, L. H. and Sauer, T. C., 1941, *Ind. Eng. Chem.*, **33**(4), 453.

ABSTRACT

Paying homage to the one hundred years of the publications about the solid dissolution models of Shchukarev (1896) and Noyes and Whitney (1897), a serie of works are presented by the authors.

Differents models which have been developed in order to interpret the changes occurring in fluid-solid reactive process, such as solid dissolution and sublimation, and non-catalytic solid-fluid reactions, are considered.

In this first paper, the fluid-solid reactive process is characterized and classified according to the initial structure of de reactant particle, its evolution along with the time and the nature of the reactional interphase. Also, the basic modeling equations based on a heterogeneous criteria are developed.

**TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO
PARTE II
MODELADO CINETICO DE TRANSFORMACIONES I Y II**



Oscar D. Quiroga(*), Jorge R. Avanza(**), Angel J. Fusco(**) y Luis T. Villa(*)

(*) INIQUI - Facultad de Ingeniería

Universidad Nacional de Salta

Buenos Aires 177 - 4400 Salta - Argentina

(**) Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura

Universidad Nacional del Nordeste

9 de Julio 1449 - 3400 Corrientes - Argentina



RESUMEN

Se analiza el modelado de partículas reactantes que se transforman por ataque uniforme, correspondientes a los casos de partículas no porosas sin formación de productos sólidos - Transformaciones I -, y de partículas porosas o no porosas con o sin formación de productos sólidos porosos - Transformaciones II.

INTRODUCCION

Aquí analizaremos el modelado de transformaciones fluido sólido reactivo, cuyas caracterizaciones, ecuaciones fundamentales del modelado, y clasificación fueron dadas previamente por Quiroga et al. (1996). Trataremos el modelado de las Transformaciones I y II, las cuales tienen en común una superficie interfacial uniformemente reactiva, y se diferencian por las características estructurales que presenta la partícula reactante. Las ecs.(1-1), (1-2), (1-3), etc., y las Figuras 1-1, 1-2, 1-3, etc., corresponden a las presentadas en Quiroga et al. (1996).

MODELADO DE TRANSFORMACIONES I

Las hipótesis para el modelado de las Transformaciones I son las siguientes:

(HGI1) "reactivo sólido puro, no poroso, sin formación de productos sólidos adheridos a la partícula";

(HGI2) "la transformación se inicia en el mismo momento que los reactivos sólido y fluido se ponen en contacto, siendo la superficie interfacial, Ω_i , coincidente con la superficie externa de la partícula reactante, Ω , y uniformemente reactiva, con un grado de reactividad independiente del tiempo y de las coordenadas de Ω ".

(HGI3) "en las disoluciones y vaporizaciones de sólidos, debe cumplirse en todo momento: $C_{B0} = C_{B^*}$ ".

El cambio que experimenta una partícula reactante esférica que satisface las hipótesis (HGI1) y (HGI2) se muestra en la Fig. 2-1. De las hipótesis (HGI1) a (HGI2) inferimos que para una reacción del tipo (1-2) debe cumplirse que: $C_{As} = C_{A0}$; $C_{Qs} = C_{Q0}$; y $\Omega = \Omega_r = \Omega_i$, siendo Ω_r la interfase reaccional.

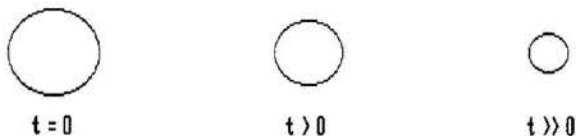


Figura 2-1. Cambios que se observan en una partícula esférica que experimenta una Transformación I.

Regímenes de Velocidad

En las Transformaciones I sólo pueden estar involucradas las Etapas (A.0), (AB.2) a (AB.4) y (A.6) - ver Fig. 1-5 -, siendo

sus velocidades, individuales o combinadas, las que gobiernan la velocidad de la transformación. A través de ellas pueden presentarse los siguientes regímenes de velocidad:

- **Régimen I-1 o régimen de control químico:** la velocidad de la transformación es controlada por la velocidad combinada de las Etapas (AB.2) a (AB.4). Para una reacción del tipo (1-2), se tiene que: $C_{As} = C_A$ y $C_{Qs} = C_Q$.

- **Régimen I-2 o régimen de control por transferencia de masa:** la velocidad de la transformación es controlada por la velocidad de la Etapa (A.0) o de la (A.6). Este régimen se presenta en algunas disoluciones y vaporizaciones de sólidos. Cuando se presenta en reacciones del tipo (1-2), se tiene que: $C_{As} = 0$, si la reacción es irreversible; C_{As} y C_{Qs} son iguales a sus respectivos valores de equilibrio, si la reacción es reversible.

- **Régimen I-3 o régimen de control mixto:** la velocidad combinada de las Etapas (AB.2) a (AB.4) son del mismo orden de magnitud que las velocidades de las Etapas (A.0) y (A.6). Para una reacción del tipo (1-2), C_{As} y C_{Qs} deben calcularse como

$$C_{As} = C_A - \frac{a r_s}{k_c} \quad C_{Qs} = C_Q + \frac{q r_s}{k_c} \quad (2-1a,b)$$

Modelado de la Superficie Externa

La extensión de la superficie externa de una partícula reactante depende de su volumen, de su figura y de la rugosidad de su superficie, los cuales cambian en el curso de la transformación. A cada figura o forma le corresponde un modelo de superficie externa, y dada la diversidad de formas que pueden presentar las partículas, deberíamos esperar infinitos modelos para Ω . Según la forma que presente la partícula reactante y la rugosidad de su superficie, el modelado de Ω puede resultar sencillo, o con una mediana o alta complejidad. Resulta sencillo cuando la partícula presenta una superficie lisa y su forma es similar a alguna de las que se muestran en la Fig. 2-2, pudiendo en tales casos, calcularse V y Ω como

$$V = \sigma_v \ell b c \quad (2-2a,b)$$

$$\Omega = \sigma_\Omega (\ell b + \ell c + b c)$$

donde: V es el volumen de la partícula, y ℓ , b y c sus longitudes características (largo, ancho, alto, diámetro); σ_v y σ_Ω , coeficientes de forma respecto de V y de Ω , respectivamente.

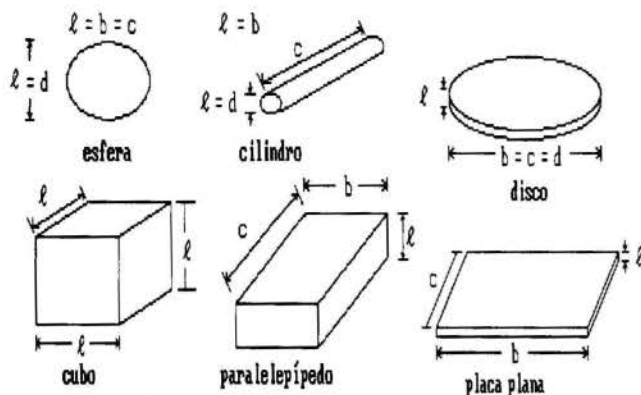


Figura 2-2. Partículas reactantes con formas modelables.

- a) Caso de partículas que se transforman manteniendo su forma inicial: $\sigma_v = \sigma_{v_0}$ y $\sigma_0 = \sigma_{0_0}$.

En este caso es válido suponer que todas las caras de la partícula se desplazan a igual velocidad, y por consiguiente cada una de ellas se habrá desplazado una longitud q desde el momento que se inició la transformación. Es decir

$$l = l^0 - 2q; \quad b = b^0 - 2q; \quad c = c^0 - 2q \quad (2-3a,b,c)$$

Si elegimos l^0 como la menor de las longitudes características iniciales de la partícula, y definimos

$$f = 2q/l^0 \quad B = l^0/b^0 \quad C = l^0/c^0 \quad (2-4a,b,c)$$

(con: $0 < B \leq 1$; $0 < C \leq 1$)

entonces al hacer las sustituciones correspondientes, obtenemos

$$V = V^0 [1 - (1 + B + C)f + (B + C + BC)f^2 - BCf^3] \quad (2-5)$$

$$\Omega = \Omega^0 \left[1 - \frac{2(B + C + BC)}{1 + B + C} f + \frac{3BC}{1 + B + C} f^2 \right] \quad (2-6)$$

con

$$\frac{dV}{df} = - \frac{l^0 \Omega}{2} \quad (2-7)$$

siendo la (2-7) una propiedad de las partículas que se transforman manteniendo su forma inicial. Las ecs.(2-5) y (2-6) son funciones continuas de f , a través de la cual se hallan acopladas, y dependen únicamente de los coeficientes geométricos B y C , cuyos valores están acotados entre 0 y 1. Para relacionar f con X , utilizamos la ec.(1-24), la relación de vínculo $M = fV$, y suponiendo que la densidad del reactivo sólido, ρ , se mantiene constante, obtenemos

$$V = V^0 (1 - X) \quad (2-8)$$

cuya combinación con la ec.(2-5) nos da

$$BCf^3 - (B + C + BC)f^2 + (1 + B + C)f = X \quad (2-9)$$

Para calcular Ω en función de X , debe resolverse la ec.(2-9) en f , y sustituir su valor en la ec.(2-6).

- b) Partículas con Formas 012

Puede demostrarse que si los valores de los coeficientes B y C resultan, simultánea o indistintamente, iguales a 1 ó tendientes asintóticamente a 0, entonces las ecs.(2-5) y (2-6) se reducen a

$$V = V^0 (1 - f)^{(1+m)} \quad (2-10)$$

$$\Omega = \Omega^0 (1 - f)^m \quad (2-11)$$

de las cuales, teniendo presente la ec.(2-8), obtenemos

$$\Omega = \Omega^0 (1 - X)^{m/(1+m)} \quad (2-12)$$

con: $m = B + C$. La ec.(2-12) es exacta únicamente para partí-

culas esféricas ($B = C = 1$; $m = 2$). Resulta una muy buena aproximación cuando los efectos de borde son despreciables, por ej.: a) cilindros alargados - agujas - ($B = 1$; $C \rightarrow 0$; $m = 1$); b) discos y placas planas ($B \rightarrow 0$; $C \rightarrow 0$; $m = 0$). A los efectos de poder identificar fácilmente las partículas que presentan alguna de estas figuras, las denominaremos **Partículas con Formas 012**, y tendremos en mente la siguiente igualdad: $l^0 \Omega^0 / V^0 = 2(1 + m)$. Cuando estas partículas se transforman por *ataque uniforme*, admiten el siguiente cambio de variable, el cual facilita su tratamiento matemático,

$$u^{(1+m)} = 1 - X \quad (2-13)$$

cuya derivada con respecto de t y combinación con la ec.(2-12) nos da

$$(1 + m) u^m \frac{du}{dt} = - \frac{dX}{dt} \quad (2-14a,b)$$

$$\Omega = \Omega^0 u^m$$

con $u = (1 - f) = l/l^0$.

- c) Partículas que no mantienen su forma inicial

En el tratamiento de estos casos se ha utilizado tradicionalmente el siguiente modelo

$$\Omega = \Omega^0 (1 - X)^p \quad (2-15)$$

con p estimado de datos experimentales, siendo sus valores esperados:

- a) transformaciones homotéticas, de acuerdo con Delmon (1969): $p = 2/3$.
- b) partículas isométricas: $p \rightarrow 2/3$, entendiéndose como tales aquellas cuya figura puede contener interiormente una esfera tangente a todas sus caras - Núñez y Spiell (1985).
- c) elipsoides de revolución: $2/3 > p > 1/2$.
- d) elipsoides aplanados: $1/2 > p > 0$.

Modelado de Transformaciones I a N_B y a r_S Constantes

Para modelar Transformaciones I a N_B y a r_S constantes, sólo se requiere combinar las ecs.(1-25) y (1-26) con la (2-12) o la (2-15), e integrarlas. Por ej., para el caso de Partículas con Formas 012, obtenemos

$$\frac{dX}{d\tau} = (1 + m)(1 - X)^{m/(1+m)} \quad (2-16)$$

en la que el tiempo adimensional τ es definido como:

$$\tau = \frac{2 m_B N_B t}{\int l^0} \quad \tau = \frac{2 b m_B r_S t}{\int l^0} \quad (2-17a,b)$$

debiendo emplearse la ec.(2-17a) para disoluciones o vaporizaciones de sólidos, y la (2-17b) para reacciones fluido-sólido reactivo. Combinando ahora la ec.(2-16) con las ecs.(2-13) y (2-14a,b), obtenemos

$$\frac{du}{d\tau} = -1 \quad (2-18)$$

cuya integración, sujeta a $u = 1$ en $\tau = 0$, nos da

$$u = 1 - \tau = (1 - X)^{1/(1+m)} \quad (2-19)$$

y su representación gráfica se muestra en la Fig. 2-3. Esta ecuación con $m = 2$, ha sido denominada, por Wilhelm et al. (1941), como: "*ley de la raíz cúbica de Hixson y Crowell*". La combinación de las ecs. (1-25) y (1-26) con la (2-15), y posterior integración, nos da como resultado una ecuación similar a

la (2-19), debiendo sustituirse $1/(1+m)$ por $(1-p)$. El modelado de Transformaciones I con N_B y r_S en función de X , puede verse en Quiroga et al. (1994).

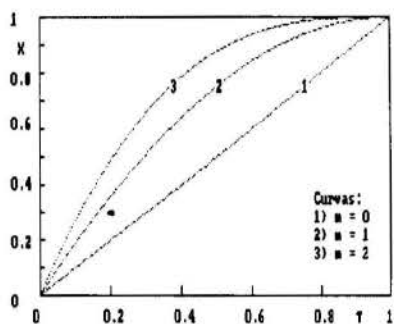


Figura 2-3. Representación gráfica de la ec.(2-19).

MODELADO DE TRANSFORMACIONES II

Caracterización y Clasificación

Las Transformaciones II se caracterizan por el hecho de que la partícula reactante presenta, al comienzo o durante la transformación, una o más regiones sólidas porosas; la superficie interfacial es uniformemente reactiva. Tomando en cuenta la porosidad inicial de la partícula reactante, ϵ^0 , la formación o no de productos porosos que permanezcan adheridos a la partícula, pueden clasificarse en tres grupos. A saber:

- **Transformaciones II-A:** partículas con $\epsilon^0 > 0$, y no hay formación de productos sólidos - disolución y vaporización de sólidos (1-1), y reacción de tipo (1-2).

- **Transformaciones II-B:** a) reacciones de partículas con $\epsilon^0 \rightarrow 0$, y formación de un producto fluido y otro sólido poroso que permanece adherido a ella; b) disoluciones o reacciones de un sólido B puro que ocupa totalmente la estructura porosa de un sólido inerte no disgregable.

- **Transformaciones II-C:** a) reacciones de partículas con $\epsilon^0 > 0$, y formación de un producto fluido y otro sólido poroso que permanece adherido a la partícula; b) disoluciones o reacciones de un sólido B puro que se halla depositado sobre la superficie interna de un sólido inerte poroso no disgregable.

Regímenes de Velocidad

En términos generales, los regímenes de velocidad que pueden presentarse en las Transformaciones II, son los siguientes:

- **régimen II-1 o régimen de control químico:** la velocidad de la transformación es controlada por la velocidad combinada de las Etapas (AB.2) a (AB.4) (ver Fig. 1-5).

- **régimen II-2:** las velocidades de las Etapas (AB.2) a (AB.4) son del mismo orden de magnitud que las de las Etapas (A.1) y (A.5).

- **régimen II-3:** las velocidades de las Etapas (A.0), (A.1), (AB.2) a (AB.4), (A.5) y (A.6), son todas del mismo orden de magnitud.

- **régimen II-4 o régimen de control por transferencia de masa:** la velocidad de la transformación es controlada por las velocidades de las Etapas (A.0) y (A.6).

Hipótesis de Modelado

Entre principales hipótesis que han sido adoptadas en el modelado de las Transformaciones II, debemos mencionar la (HG3), y

(HGII1) "la transformación se inicia en el mismo momento que los reactivos sólido y fluido se ponen en contacto, siendo la superficie interfacial uniformemente reactiva, $\Omega_1 = \Omega_r$, con un grado de reactividad independiente del tiempo"

(HGII2) "la estructura de la partícula reactante es continua, tanto en las fases sólida como en los poros".

Transformaciones II-A en Régimen II-1

Las características principales que se observan en las Transformaciones II-A que proceden en Régimen II-1, son: el volumen de la partícula reactante varía muy poco, pudiendo suponerse que es aproximadamente igual al inicial; cambian la densidad, ρ_p , y la porosidad, ϵ , de la partícula, la cual desaparece cuando $X = 1$. Entre los principales métodos de modelado que han sido propuestos para estos casos, debemos mencionar al de Petersen (1957), y al de Bhatia y Perlmutter (1980) y Gavalas (1980). Estos métodos se caracterizan por la simplicidad con que pueden formularse Ω_1 y ϵ ; y se basan, implícita o explícitamente, sobre las hipótesis (HG3), (HGII1) y (HGII2), y,

(HIIA1) "los poros están interconectados entre sí, se asemejan a cilindros alargados y su número permanece constante, siendo la superficie poral igual a Ω_1 ".

Estos métodos tienen en común:

1º) ϵ y X están vinculados por

$$1 - X = \frac{1 - \epsilon}{1 - \epsilon^0} \quad (2-20)$$

2º) para $t > 0$, el radio del poro es: $r = r^0 + q$

3º) la hipótesis de poros cilíndricos largos, permite inferir que mantiene aproximadamente su forma inicial, y por lo tanto:

$$dV_p = \Omega_p dq \quad (2-21)$$

de la que resulta, teniendo presente (HIIA1),

$$\frac{d\epsilon}{dq} = \frac{\Omega_1}{V^0} \quad (2-22)$$

donde: V_p y Ω_p , son el volumen y la superficie del poro.

4º) El modelado, para reacciones del tipo (1-2), está basado sobre la ec.(1-26), la que al ser combinada con la derivada de ϵ con respecto de t , nos da

$$\frac{dq}{dt} = \frac{b m_B r_S}{f} \quad (2-23)$$

cuya integración sujeta a $q = 0$ en $t = 0$, para el caso de r_S constante, nos da

$$q = \frac{b m_B r_S t}{f} \quad (2-24)$$

- a) **Modelo de Petersen: "poros interconectados al azar"**

Para una reacción a r_S constante, siguiendo el procedimiento de Petersen (1957), obtenemos

$$X = \frac{\epsilon^0}{(1 - \epsilon^0)} \left[(1 + \tau)^2 \frac{(G - 1 - \tau)}{(G - 1)} - 1 \right] \quad (2-25)$$

$$\Omega_1 = \Omega_1^0 (1 + \tau) \frac{[2G - 3(1 + \tau)]}{(2G - 3)} \quad (2-26)$$

con $\tau = q/r^0$, y

$$\frac{4\epsilon^0}{27} G^3 - G + 1 = 0 \quad (2-27)$$

b) Modelo de Bhatia y Perlmutter, y Gavalas: "volúmenes de poros distribuidos al azar"

En la formulación de ϵ , Bhatia y Perlmutter (1980), e, independientemente, Gavalas (1980), propusieron un modelo de poros cilíndricos cuyos volúmenes se hallan distribuidos al azar, según la distribución de Poisson - Sahimi y col. (1990) y Gavalas (1986). Es decir

$$\epsilon = 1 - \exp\left(-2\pi \sum_{i=1}^{N_p} L_i (r_i^2 + q^2)\right)$$

$$= 1 - (1 - \epsilon^0) \exp(-2\pi(2B_1q + B_0q^2)) \quad (2-28)$$

con

$$B_0 = \sum_{i=1}^{N_p} L_i \quad B_1 = \sum_{i=1}^{N_p} L_i r_i^2 \quad (2-29a,b)$$

donde: r_i y L_i , son el radio y la longitud del i -ésimo poro, respectivamente; N_p , número de poros. Combinando las ecs.(2-28) y (2-24) obtenemos

$$\chi = 1 - \exp(-\tau [1 + 0.25 \phi \tau]) \quad (2-30)$$

con

$$\tau = \frac{4\pi B_1 b m_B r_s t}{f} \quad \phi = \frac{B_0}{2\pi B_1^2} \quad (2-31a,b)$$

De la ec.(2-28), teniendo presente la (2-22), obtenemos

$$\Omega_1 = S_g^0 M^0 (1 - \chi) [1 - \phi \ln(1 - \chi)]^{1/2} \quad (2-32)$$

Las ecs.(2-30) y (2-32) son válidas únicamente para reacciones fluido-sólido reactivo a r_s constantes. Ambas tienen un único parámetro: ϕ . La representación gráfica de la primera, para $\phi > 2$, da una familia de curvas sigmoideas, cuyos puntos de inflexión se hallan ubicados en $\tau = [(2\phi)^{1/2} - 2]/\phi$.

Transformaciones II-A en Régimen II-2 y II-3

Tomando en cuenta los cambios estructurales que experimenta la partícula y las velocidades de las etapas involucradas, el modelado de Transformaciones II-A que proceden en Régimen II-2 o II-3, resulta, generalmente, una tarea compleja y difícil. En estos casos Ω_1 es función del perfil de la concentración del reactivo fluido en el interior de los poros, C_{Ap} , cuya forma depende de las velocidades de las etapas involucradas, tal como se muestra en la Fig. 2-4, para el caso de una partícula esférica. Es común asociar los perfiles de C_{Ap} , a los valores que toma el módulo de Thiele, Φ , en cada caso, debiéndose esperar $\Phi = \Phi(t)$. En el Caso A, de la Fig. 2-4, observamos que el perfil de C_{Ap} experimenta un cambio brusco, lo cual nos permite inferir que la velocidad de reacción es mucho mayor que la de difusión, y por consiguiente podemos prever que se presentará cuando los valores de Φ resulten altos. Un sistema reaccionante que se comporta de este modo, presenta las siguientes características: el cambio de tamaño de la partícula es notable, pero no así los que experimentan ϵ y f_p ; y, en su modelado, es válido suponer que la reacción tiene lugar en una "zona" comprendida entre $R(t)$ y el que le corresponde a r para $C_{Ap} = 0$ - "zona de reacción". En los Casos B y C, observamos una caída menos pronunciada de C_{Ap} que en el caso anterior, lo cual nos permite inferir que la velocidad de reacción es ligeramente mayor que la de difusión, correspondiendo entonces a valores intermedios de Φ . Tomando en cuenta que el espesor de la zona de reacción de los Casos B y C es mucho mayor que el del Caso A, podemos prever que se observarán cambios simultáneos en ϵ , f_p y el tamaño de la partícula. El Caso D se presenta cuando la velocidad de difusión del reactivo fluido es ligeramente mayor que su velocidad de reacción, es decir a valores bajos de Φ ; y pode-

mos prever que los cambios más notables estarán relacionados con los que experimenten ϵ y f_p .

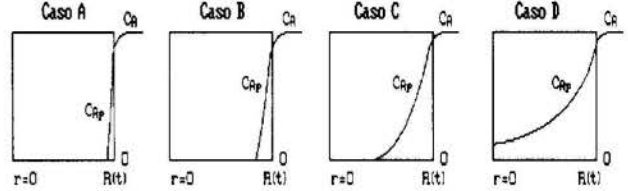


Figura 2-4 Perfiles de concentración del reactivo fluido en una partícula esférica porosa que experimenta una Transformación II-A y procede en Régimen II-3.

El modelado de cada uno de los Casos A a D se realiza en forma independiente. El Caso A puede modelarse con cierta facilidad, tal como veremos enseguida, mediante el modelo "zona de reacción". El modelado de los Casos B a D, generalmente, suele basarse sobre el modelo "homogéneo", acerca del cual nos referiremos más adelante. La formulación del problema de modelado a través del "modelo homogéneo" puede verse en Gavalas (1986).

Modelo "Zona de Reacción"

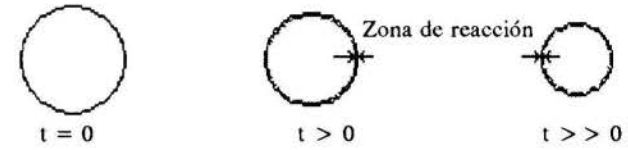


Figura 2-5. Esquema representativo del modelo "zona de reacción".

El modelo "zona de reacción" de Petersen (1965), se basa sobre las hipótesis (HG3), (HGII1), (HGII2), y las siguientes:

- (HIIA21) "la reacción tiene lugar en una zona que a modo de piel cubre uniformemente la partícula, siendo su espesor pequeño comparado con la longitud característica de la partícula";
- (HIIA22) "a medida que la transformación avanza, el tamaño de la partícula disminuye, mientras que su interior permanece esencialmente sin reaccionar, debido a que el reactivo fluido se agota en la zona de reacción";
- (HIIA23) "en la zona de reacción, la difusividad efectiva del reactivo fluido es constante".

Una representación esquematizada de las hipótesis (HIIA21) y (HIIA22) se muestra en la Fig. 2-5. El modelado de una reacción de tipo (1-2), se basa sobre la ec.(1-26) combinada con la (1-22), con N_A expresado como

$$N_A = -D_E \left. \frac{dC_{Ap}}{dy} \right|_0 \quad (2-33)$$

donde el origen de la coordenada "y" es definido sobre la superficie externa de la partícula, Ω .

A través de (HIIA21) y (HIIA22) inferimos que Ω_1 se halla ubicada en la zona de reacción, y en el caso que el espesor de ésta tienda a cero entonces $\Omega_1 \rightarrow \Omega$. Siguiendo el procedimiento de Petersen (1965), y tomando en cuenta la (HIIA21), utilizamos la siguiente ecuación de continuidad de C_{Ap} en la zona de reacción:

$$D_E \frac{d^2 C_{Ap}}{dy^2} = a \alpha_r r_s \quad (2-34)$$

sujeta a las siguientes condiciones de contorno

$$C_{Ap} = 0 \quad \frac{dC_{Ap}}{dy} = 0 \quad \text{en } y \rightarrow \infty \quad (2-35)$$

- a) Reacción en Régimen II-2

$$C_{Ap} = C_A \quad \text{en } y = 0 \quad (2-36)$$

- b) Reacción en Régimen II-3

$$\text{en } y = 0: \quad C_{Ap} = C_{A0}$$

$$N_A = - D_E \frac{dC_{Ap}}{dy} \Big|_0 = k_c (C_{A0} - C_A) \quad (2-37)$$

con $a_r = \Omega_r/V_p$. Por integración de la ec.(2-34) obtenemos

$$\frac{dC_{Ap}}{dy} \Big|_0 = \left[\frac{2 a_r k_c F[C_A]}{D_E} \right]^{1/2} \quad (2-38)$$

con $F[C_A]$ definido como

$$F[C_A] = \frac{1}{k} \int_0^{C_A} r_S dC_{Ap} \quad (2-39)$$

si la reacción procede en Régimen II-2, y

$$F[C_A] = \frac{1}{k} \int_0^{C_{A0}} r_S dC_{Ap} \quad (2-40)$$

si lo hace en Régimen II-3. En este último caso, para hallar C_{A0} debe obtenerse la solución de la ec.(2-40) con la (2-37).

Como resultado del problema de modelado, para reacciones en Régimen II-2 de Partículas con Formas 012, obtenemos nuevamente la ec.(2-19), con τ definido ahora como

$$\tau = \frac{2 b m_B t}{a \int_p \ell^0} \left[2 a S_g^0 \int_p D_E k F[C_A] \right]^{1/2} \quad (2-41)$$

y $a_r = \Omega_r/V^0$, habiendo utilizado la ec.(2-12) para Ω_r .

Modelado de Transformaciones II-B

Modelo "Frente Móvil de Reacción"

Las principales características que presentan las Transformaciones II-B, son: $\epsilon^0 \rightarrow 0$, y durante la transformación se forma un producto sólido poroso que permanece adherido al núcleo de la partícula que aún no ha reaccionado. Estas características peculiares fueron tomadas en cuenta por Yagi y Kunii (1955), quienes, para interpretar la velocidad de la transformación, propusieron el modelo "frente móvil de reacción". Este modelo, cuyo esquema representativo se muestra en la Fig. 2-6, ha sido bien descrito en la mayoría de los libros de textos de ingeniería de las reacciones químicas. En la aplicación de este modelo a Transformaciones II-B, se han adoptado, implícita o explícitamente, las hipótesis (HG3), (HGII1), (HGII2), y las siguientes

(HIIB1) " Ω_1 se halla ubicada sobre la interfase que delimita las regiones sólidas pertenecientes al reactivo no poroso y al producto poroso, y es uniformemente reactiva";

(HIIB2) "a lo largo de la región porosa del producto sólido no hay desaparición ni generación de reactivo fluido, cuya difusividad efectiva permanece constante";

y, como ecuación básica de modelado la (1-26). De (HIIB1) inferimos que en todo momento $\Omega_1 = \Omega_r$, y resulta fácil imaginarnos que el volumen del núcleo sin reaccionar se contrae de un modo similar al que lo hace el volumen de una partícula reactante en una Transformación I. Por consiguiente para Ω_1 podemos

utilizar el modelo (2-12) o el (2-15), es decir

$$\Omega_1 = \Omega^0 (1 - X)^{m/(1+m)} \quad \Omega_1 = \Omega^0 (1 - X)^p \quad (2-42a,b)$$

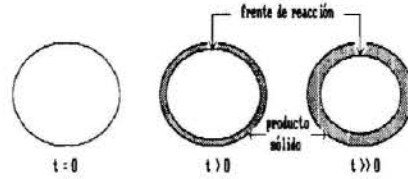
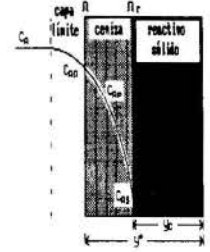


Figura 2-6. Modelo "frente móvil de reacción".

Transformaciones II-B en Régimen II-3

En una Transformación II-B que procede en Régimen II-3, se establece un perfil de concentración, del reactivo fluido, similar al de la figura adjunta, en la que los valores de C_{As} y de C_{A0} son desconocidos. Para evaluarlos debe resolverse la ecuación de continuidad de C_{Ap} , la cual, para Partículas con Formas 012 y teniendo presente (HBII2), expresaremos como



$$\frac{d}{dy} \left[y^m \frac{dC_{Ap}}{dy} \right] = 0 \quad (2-43)$$

sujeta a las siguientes condiciones de contorno - Gavalas (1986) y Villa et al. (1992) -,

$$\text{C.C.1) en } y = y^0 \quad C_{Ap} = C_{A0} \quad (2-44a,b)$$

$$D_E \frac{dC_{Ap}}{dy} \Big|_{y=y^0} = k_c (C_A - C_{A0})$$

$$\text{C.C.2) en } y = y_c \quad C_{Ap} = C_{As} \quad (2-45a,b)$$

$$D_E \frac{dC_{Ap}}{dy} \Big|_{y=y_c} = a r_S$$

donde: $y_c = \ell/2$, es la posición del frente de reacción, medida desde el centro de la partícula; $y^0 = \ell^0/2$; Ω y Ω_r , se hallan ubicadas en y^0 e y_c , respectivamente.

Para el caso de una partícula esférica y reacción de primer orden con respecto del reactivo fluido, obtenemos

$$\tau = 1 - (1 - X)^{1/3} + \frac{\alpha \beta}{2} [1 - (1 - X)^{2/3}] - \frac{\alpha(\beta - 1)}{3} X \quad (2-46)$$

con

$$\alpha = \frac{a r_S(C_A)}{k_c C_A} \quad \beta = \frac{Sh D_A}{2 D_E} \quad (2-47a,b)$$

$$\tau = \frac{2 b m_B r_S(C_A) t}{\int \ell^0} \quad (2-48)$$

Si $\beta \gg 1$, y los valores α son grandes, entonces la (2-46) se reduce a la ecuación de Ginstling y Brounstein (1950), la cual corresponde al caso de reacción controlada por la velocidad de la Etapa (A.1).

Modelado de Transformaciones II-C

En la bibliografía relativa al tratamiento cinético de reacciones gas-sólido reactivo, se observa que las que se comportan como Transformaciones II-C, han sido tratadas, en algunos casos, por modelos desarrollados para Transformaciones II-A y II-B, y, en otros, mediante el modelo "homogéneo". Para la elección del método de modelado que debe utilizarse en cada caso, resulta útil el criterio propuesto por Mantri et al. (1976), en función de los valores del módulo de Thiele, Φ , que presentamos

en la Tabla 2-1.

Tabla 2-1. Criterio ampliado de Mantri et al. (1976).

Valores de Φ	Método de modelado
$\Phi > 100$	Frente móvil de reacción
$0.5 < \Phi < 100$	Zona de reacción o zona difusa
$\Phi < 0.5$	Modelo homogéneo Petersen: ec.(2-25) Bhatia-Perlmutter-Gavalas: ec.(2-30) Bhatia-Perlmutter (1981) y (1983)

Modelo homogéneo

Este modelo, también denominado "volumen de reacción", ha sido utilizado por diversos autores, en el tratamiento de Transformaciones II-A y II-C. Las hipótesis que se adoptaron comúnmente fueron: i) (HG3); ii) partícula esférica; iii) C_{Ap} , cuasi estacionaria; iv) reacción química pseudohomogénea, con $r_A = k C_{Ap}^n C_B^p$, siendo r_A la velocidad de reacción por unidad de volumen de la partícula, C_B concentración molar del reactivo sólido, n y p orden de reacción con respecto de A y de B, respectivamente.

Tomando en cuenta las hipótesis precedentes (i) y (iii), el modelo "homogéneo" se basa sobre la resolución del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\nabla \cdot (D_E \nabla C_{Ap}) = r_A \quad (2-49)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -b r_A \quad (2-50)$$

sujo a las siguientes condiciones inicial y de contorno

$$CI) \text{ en } t = 0 \quad C_{Ap} = 0 \quad C_B = C_{B^0} \quad (2-51a,b)$$

$$CC1) \text{ en } r = 0 \quad \frac{dC_{Ap}}{dr} = 0 \quad (2-52)$$

$$CC2) \text{ en } r = R \quad C_{Ap} = C_{A0} \\ D_E \frac{dC_{Ap}}{dr} = k_c (C_{A0} - C_A) \quad (2-53a,b)$$

El análisis de resultados que se han obtenido para diferentes casos, puede verse en Ramachandran y Doraiswamy (1982). Destacamos aquí que para $\Phi < 0.2$, el problema de modelado se reduce a la sola resolución de la ec.(2-50) con $C_{Ap} = C_A$, y $X = 1 - C_B/C_{B^0}$. Es decir

$$\frac{dX}{d\tau} = (1 - X)^p \quad (2-54)$$

con $\tau = b r_A t / C_{B^0}$. Por integración de ec.(2-54), obtenemos

$$\text{- Para } p = 1: \quad X = 1 - \exp(-\tau) \quad (2-55)$$

$$\text{- Para } p = 0: \quad X = \tau \quad (2-56)$$

$$\text{- Para } p = 2: \quad X = \tau / (1 + \tau) \quad (2-57)$$

Consideraciones finales acerca de las Transformaciones II

Dadas las limitaciones que tienen los procedimientos tradicionales de modelado de Transformaciones II, basados sobre la teoría del continuo, han comenzado a utilizarse otros métodos

basados sobre la teoría de la "percolación", los cuales resultan más complejos que los primeros, pero permiten estudiar con mayor detalle cualquier reacción sólido-fluido en un medio poroso. Sahimi y col. [1], al referirse a estas reacciones, señalan que ellas están acompañadas a menudo por una alteración continua de la estructura del medio poroso y, a conversiones altas, exhiben un comportamiento tipo percolación, es decir que la matriz del medio sólido y/o de la fase fluida pierden su conexión macroscópica.

BIBLIOGRAFIA

- Bhatia, S. K., and Perlmutter, D. D., 1980, *A.I.Ch.E.J.*, **26**, 379.
- Bhatia, S. K. and Perlmutter, D. D., 1981, *A.I.Ch.E.J.*, **27**, 247.
- Bhatia, S. K. and Perlmutter, D. D., 1983, *A.I.Ch.E.J.*, **29**, 281.
- Delmon, B., 1969, "Introduction a la Cinétique Hétérogène", Editions Technip, Paris.
- Gavalas, G. R., 1980, *A.I.Ch.E.J.*, **26**, 577.
- Gavalas, G., 1986, "Noncatalytic Gas-Solid Reactions with Applications to Char Combustion and Gas Desulfurization", Chapter 3 from "Concepts and Design of Chemical Reactors", S. Whitaker and A. E. Cassano (Editors), Gordon and Breach Science Publishers.
- Ginstling, A. M. and Brounshtein, B. I., 1950, "J. Appl. Chem. USSR", **23**, 1327-38.
- Mantri, V. B., Gokarn A. N. and Doraiswamy, L. K., 1976, *Chem. Eng. Sci.*, **31**, 779.
- Núñez, C. and Spiell, F., 1985, *Metall. Tras. B*, **16B**, 449.
- Petersen, E. E., 1957, *A.I.Ch.E.J.*, **3**, 443.
- Petersen, E. E., 1965, "Chemical Reaction Analysis", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- Quiroga, O. D., Avanza, J. R., y Fusco, A. J., 1994, "Modelado Cinético de Transformaciones Fluido-Sólido Reactivo.", FACENA, Ediciones Previa.
- Quiroga, O. D., Avanza, J. R., Fusco, A. J. and Villa, L. T., 1996, "Transformaciones Fluido-Sólido Reactivo. Parte I. Caracterización, Ecuaciones Fundamentales del Modelado y Clasificación", LATCYM 96.
- Ramachandran, P. A. and Doraiswamy, L. K., 1982, "Modeling of Noncatalytic Gas-Solid Reactions", *A.I.Ch.E.J.*, **28**(6), 881.
- Sahimi, M., Gavalas, G. R., and Tsotsis, T. T., 1990, "Statistical and continuum models of fluid-solid reactions in porous media", *Chem. Eng. Sci.*, **45**(6), 1443.
- Villa, L. T., Quiroga, O. D. and Morales, G. V., 1992, *Trans. I. Chem. E.*, **70**(Part A), 276.
- Wilhelm, R. H., Conklin, L. H. and Sauer, T. C., 1941, *Ind. Eng. Chem.*, **33**(4), 453.
- Yagi, S. and Kunii, D., 1955, *5th Symposium (International) on Combustion*, Reinhold, New York, p. 231.

ABSTRACT

The goal of this paper is to analyse the kinetic modeling of fluid-solid reactive process, regarding to the cases of nonporous solids particles without formation of solids products - Transformations I - and porous solids particles with and without formation of solids porous products - Transformations II -, assuming an uniform reactive interface during the process.

**TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO
PARTE III
MODELADO CINETICO DE TRANSFORMACIONES III Y IV**

ABCm

Oscar D. Quiroga^(*), Jorge R. Avanza^(**), Angel J. Fusco^(**) y Luis T. Villa^(*)

(*) INIQUI - Facultad de Ingeniería

Universidad Nacional de Salta

Buenos Aires 177 - 4400 Salta - Argentina

(**) Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura

Universidad Nacional del Nordeste

9 de Julio 1449 - 3400 Corrientes - Argentina



RESUMEN

Se analiza el modelado de partículas reactantes que se transforman por ataque no uniforme, correspondientes a los casos de partículas no porosas sin formación de productos sólidos - Transformaciones III -, y de partículas porosas o no porosas con o sin formación de productos sólidos porosos - Transformaciones IV.

INTRODUCCION

Trataremos aquí el modelado transformaciones fluido-sólido reactivo que se comportan como Transformaciones III y IV. Ambas se caracterizan por el hecho de que la superficie interfacial exhibe un comportamiento no uniformemente reactivo, y se diferencian por las características estructurales que presenta la partícula reactante, siendo no porosas las primeras, y porosas las segundas. Las ecuaciones referenciadas en este trabajo como (1-1), (1-2), (1-3), etc., al igual que las Figuras 1-1, 1-2, 1-3, etc., corresponden a las presentadas en Quiroga et al. (1996a), mientras que las ecs.(2-1), (2-2), (2-3), etc., y las Figuras 2-1, 2-2, 2-3, etc., a las presentadas en Quiroga et al. (1996b).

TRANSFORMACIONES III

Caracterización

Estas transformaciones se presentan cuando $\epsilon^\circ \rightarrow 0$, no hay formación de productos sólidos adheridos a la partícula, y la interfase reaccional, Ω_r , es función del tiempo, t , y de las coordenadas de Ω_1 . La velocidad de formación de Ω_r y su extensión, son los objetivos principales del modelado.

Hipótesis de Modelado

Las hipótesis generales que se adoptan en su modelado, son la (HG3), y

(HGIII1) "la partícula reactante está constituida por un reactivo sólido puro, no poroso, y no hay formación de productos sólidos adheridos a ella"

de la cual resulta $\Omega_1 = \Omega$.

Regímenes de Velocidad

La velocidad inicial de la transformación es controlada por la velocidad de la *Etapas (B.1)* - ver Fig. 1-5 -, y luego, a medida que avanza el tiempo de contacto, el control puede estar dado por la velocidad de las *Etapas (A.0)*, (A.2) a (A.4) y (A.6). A través de todas ellas distinguimos cuatro regímenes de velocidad. A saber:

- **régimen III-0:** controla la velocidad de la *Etapas (B.1)*.

- **régimen III-1 o régimen de control químico:** controla la velocidad combinada de las *Etapas (A.2)* a (A.4). Para una reacción del tipo (1-2), que se desarrolla en este régimen, se tiene que: $C_{As} = C_A$ y $C_{Qs} = C_Q$.

- **régimen III-2 o régimen de control por transferencia de masa:** controla la velocidad de las *Etapas (A.0)* y (A.6). En una

reacción química del tipo (1-2), se tiene que $C_{As} = 0$, si la reacción es irreversible, o que C_{As} y C_{Qs} son iguales a sus respectivos valores de equilibrio, si la reacción es reversible.

- **régimen III-3 o régimen de control mixto:** la velocidad combinada de las *Etapas (A.2)* a (A.4) son del mismo orden de magnitud que las velocidades de las *Etapas (A.0)* y (A.6).

Clasificación

Tomando en cuenta los mecanismos involucrados en la formación de Ω_r , estas transformaciones pueden clasificarse en:

- **Transformaciones III- α** o de tipo "topoquímicas".

- **Transformaciones III- β** o de tipo "activación uniforme de Ω_1 ".

Modelado de las Transformaciones III- α

El modelado de las transformaciones topoquímicas o autolocalizadas, se basa sobre la adaptación que hizo Delmon (1969) del modelo *nucleación y crecimiento* - Johnson y Mehl (1939), Avrami (1939) a (1941) -. La descripción física de esta adaptación, puede resumirse del modo siguiente:

"a partir del momento que se ponen en contacto los reactante fluido y sólido, sobre Ω_1 se forman puntos preferenciales vulnerables al ataque del reactivo fluido, desde donde se inicia; avanza la reacción, hecho que se manifiesta por la formación de agujeros que crecen hacia el interior de la partícula."

Una representación esquematizada de estas ideas se muestra en la Fig. 3-1, para el caso de una partícula reactante esférica no porosa, sobre cuya Ω_1 se forma en $t = t_L$ un único sitio activo, desde el cual crece un "germen inmaterial".

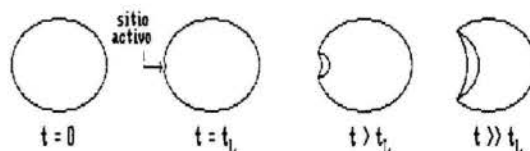


Figura 3-1. Esquema representativo del modelo "nucleación y crecimiento".

Sitios activos

Denominaremos *sitio activo* a cada uno de los "puntos preferenciales", e indicaremos con N_s al número total de ellos que pueden contabilizarse en un dado t , por unidad de superficie

inicial de la partícula, Ω^0 . Aquí admitiremos su existencia, pero no analizaremos las causas de su origen, las cuales pueden ser diversas, por ej.: heterogeneidades que suelen presentar las superficies de los sólidos, originadas por defectos cristalinos o impurezas, u otras que han sido señaladas por diferentes autores, tales como Delmon (1969) y Boldyrev et al. (1979). La aparición de los sitios activos sobre Ω_1 , se produce en el momento que se establecen condiciones favorables, y puede ser:

i) instantánea - todos aparecen en el mismo tiempo - ,

$$N_s = N_s^0 \cdot t \quad (\text{para } t \geq t_L) \quad (3-1)$$

ii) secuencial - cada sitio activo tiene su tiempo de aparición - .

Los sitios activos, según la naturaleza de su origen, se clasifican en "espontáneos" y "potenciales".

- **Sitios activos espontáneos:** aparecen independientemente de los tratamientos fisicoquímicos a los que fue sometida previamente la partícula, con una probabilidad uniforme - es decir que no está influenciada por la presencia de accidentes o de impurezas superficiales. Su velocidad de aparición secuencial suele expresarse como

$$\frac{dN_s}{dt} = r_N \quad (3-2)$$

donde: r_N , es la velocidad de aparición de sitios activos por unidad de Ω^0 . Delmon (1969) y Bamford y Tipper (1980) presentan diversos modelos para r_N , basados sobre diferentes hipótesis. A modo de ejemplo, presentamos aquí los modelos de velocidad de aparición que sigue una "ley" de aceleración,

$$r_N = k_{N_g}(t - t_L)^g \quad \text{con } g \geq 0 \quad (3-3)$$

y el de aparición secuencial de orden n debida a la presencia de una especie química "E"

- para $n = 1$

$$r_N = k_{N1} N_E \cdot \exp(-k_{N1}(t - t_L)) \quad (3-4)$$

- para $n = 2$

$$r_N = \frac{k_{N2} N_E^2}{[1 + k_{N2} N_E(t - t_L)]^2} \quad (3-5)$$

- **Sitios activos potenciales:** son los que se forman sobre Ω^0 , a través de diferentes procesos fisicoquímicos a los que fue sometida previamente la partícula, y se hallan ubicados en puntos definidos. Su activación se inicia a partir del momento que la partícula se pone en contacto con el reactivo fluido, a una velocidad secuencial que es calculada como

$$\frac{dN_s}{dt} = N_p r_p = r_N \quad (3-6)$$

También puede verse en Delmon (1969), que para r_p se han propuesto diversos modelos, de los cuales presentamos aquí el correspondiente al de velocidad de activación que sigue una "ley" de aceleración

$$r_p = k_{N(g+1)}(t - t_L)^g \quad \text{con } g \geq 0 \quad (3-7)$$

Mediante un balance de población de sitios activos potenciales, de la ec.(3-7) se obtiene

$$N_p = N_p^0 \exp \left[- \frac{k_{N(g+1)}}{1+g} (t - t_L)^{g+1} \right] \quad (3-8)$$

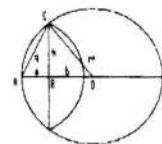
$$r_N = k_{N(g+1)} N_p^0 (t - t_L)^g \exp \left[- \frac{k_{N(g+1)}}{1+g} (t - t_L)^{g+1} \right] \quad (3-9)$$

Las ecs.(3-3) a (3-5) y (3-9), son fundamentales en el modelo de Transformaciones III- α .

Volumen del germen e interfase reaccional

Consideremos una partícula reactante esférica, constituida por un reactivo sólido puro y no poroso, en la que sobre Ω_1 aparece en $t = t_L$ un único sitio activo, a partir del cual el reactivo fluido inicia su ataque. Como consecuencia de este ataque se forma en la partícula un hueco, cuyo volumen crece uniformemente en las tres direcciones. Este hueco corresponde a un germen inmaterial de radio q , con centro donde estaba el sitio activo, siendo la interfase reaccional igual a la superficie de intersección de su volumen con el de la partícula.

Para $t > t_L$, el volumen del germen, V_g , y su interfase reaccional, Ω_g , pueden calcularse en función de q , a través de relaciones trigonométricas aplicadas a la figura adjunta, obteniéndose



$$V_g = V^0 (4f^3 - 3f^4) \quad (3-10)$$

$$\Omega_g = \Omega^0 f^2 (1 - f) \quad (3-11)$$

con f definido ahora como $f = q/d^0$ ($0 \leq f \leq 1$); y $V^0 = \pi d^0^3/6$, y $\Omega^0 = \pi d^0^2$.

La ec.(3-11) predice que Ω_g es nulo al comienzo de la transformación, debido a que $f = 0$, luego pasa por un máximo, el cual corresponde a $f = 2/3$, y se anula nuevamente en $f = 1$. Si la densidad de la partícula, ρ , se mantiene constante durante la transformación, entonces se deduce que: $x = V_g/V^0$, y

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{V^0} \frac{dV_g}{dt} \quad (3-12)$$

cuya combinación con la ec.(1-26) - teniendo presente la (3-11) y que en este caso es $\Omega_r = \Omega_g^-$, nos da

$$\frac{df}{dt} = \frac{b m_B r_S}{2 \rho d^0} \quad (3-13)$$

La integración de esta ecuación debe satisfacer la siguiente condición inicial

$$c1) \quad x = f = 0 \quad \text{en } t \leq t_L \quad (3-14)$$

y es inmediata si la transformación se realiza a r_S constante, obteniéndose entonces

$$f = \frac{b m_B r_S}{2 \rho d^0} (t - t_L) \equiv \tau \quad (3-15)$$

Por sustitución de la ec.(3-15) en la (3-10) se obtiene el modelo siguiente

$$x = 4\tau^3 - 3\tau^4 \quad (3-16)$$

cuya importancia principal se encuentra en su desarrollo teórico, por cuanto, dada la escasa probabilidad de que en una partícula se forme un único sitio activo, es de esperar que tendrá un uso práctico limitado en el tratamiento cinético de Transformaciones III- α .

Cuando aparecen sobre Ω_1 , instantánea o secuencialmente, varios sitios activos desde donde crecen los gérmenes, para calcular sus respectivos volúmenes se utiliza el siguiente modelo aproximativo

$$V_g = \sigma_g V^0 f^p \quad (3-17)$$

siendo σ_g el coeficiente de forma del germen, y p su factor de crecimiento, cuyos valores son: $p = 1$, crecimiento en una dirección; $p = 2$, crecimiento en dos direcciones, y; $p = 3$, crecimiento en tres direcciones. La ec.(3-17) ha sido empleada

tradicionalmente en el desarrollo de modelos para el tratamiento cinético de Transformaciones III- α , debido principalmente a la sencillez con que puede manejarse matemáticamente, pero debe tenerse presente que su alcance es limitado, por cuanto no toma en cuenta el hecho de que durante el crecimiento de los gérmenes se produce entre ellos un solapamiento. Por tal motivo, es lógico esperar que a través de ella se obtengan sólo modelos aproximativos, como por ejemplo los que presentamos a continuación.

Modelos aproximativos

De acuerdo con Delmon (1969), el grado de transformación que experimenta una partícula reactante en la que crecen varios gérmenes inmatiales, puede expresarse como

$$X = \frac{V_G}{V^0} \quad (3-18)$$

Para calcular el volumen total de los gérmenes, V_G , debe tomarse en cuenta el modo con que aparecen los sitios activos. A saber:

- Aparición instantánea

$$V_G = \Omega^0 N_s \cdot V_g \quad (3-19)$$

cuya combinación con las ecs.(3-15), (3-17) y (3-18), da

$$X = \beta_1 \tau^p \quad (3-20)$$

con $\beta_1 = \sigma_g \Omega^0 N_s$.

- Aparición secuencial

$$V_G = \int_0^t \Omega^0 v_g r_N dt \quad (3-21)$$

de la que resulta, teniendo presente la (3-12),

$$\frac{dX}{dt} = \frac{1}{V^0} \frac{dV_G}{dt} = \frac{\Omega^0 v_g r_N}{V^0} \quad (3-22)$$

Combinando las ecs.(3-15), (3-17) y (3-22), obtenemos finalmente

$$\frac{dX}{d\tau} = \frac{\sigma_g \Omega^0 \int d^0 r_N}{b m_B r_S} \tau^p \quad (3-23)$$

La ec.(3-23) es válida tanto para sitios activos espontáneos como potenciales. Mediante la sustitución de r_N , se obtienen diferentes modelos aproximativos, a los cuales quedan adjuntas hipótesis relativas al tipo de sitio activo y a sus mecanismos de aparición. Por ej., para el caso de aparición secuencial de sitios activos espontáneos con velocidad secuencial que sigue una ley de aceleración, ec.(3-3), obtenemos

$$X = \beta_g \tau^{(1+p+g)} \quad (3-24)$$

con β_g definido como

$$\beta_g = \frac{\sigma_g \Omega^0 k_{Ng}}{(1+p+g)} \left[\frac{\int d^0}{b m_B r_S} \right]^{(1+g)} \quad (3-25)$$

El desarrollo de modelos más exactos, que toman en cuenta el volumen real de los gérmenes, puede verse en Delmon (1969).

Modelos de Prout - Tompkins y de Avrami

Estos modelos fueron desarrollados originalmente para el tratamiento cinético de reacciones sólido-sólido, pero también han sido utilizados para correlacionar datos cinéticos de reacciones fluido-sólido reactivo del tipo Transformaciones III- α .

- Modelo de Prout-Tompkins (1944)

$$X = \frac{\exp(k_{PT} t - k_{TP})}{1 + \exp(k_{PT} t - k_{TP})} \quad (3-26)$$

cuya derivada con respecto de t ,

$$\frac{dX}{dt} = k_{PT} X (1 - X) \quad (3-27)$$

permite inferir que la ec.(3-26) representa un fenómeno de naturaleza autocatalítica. También se conoce esta ecuación como modelo de Austin-Rickett (1939).

- Modelo de Avrami (1940)

$$X = 1 - \exp(-k_A t^{p+n}) \quad (3-28)$$

en la que p es el factor de crecimiento de los gérmenes, sus valores son los que se indicaron al respecto en la ec.(3-17); el valor del coeficiente n depende del modo de aparición de los sitios activos: $n = 0$, aparición instantánea; $n = 1$, aparición secuencial a velocidad constante.

Modelado de las Transformaciones III- β

En cierto modo, las Transformaciones III- β pueden ser consideradas como casos particulares de Transformaciones I, en las que la formación de Ω_r es la etapa controlante de la velocidad inicial, pero una vez que se ha formado en Ω_i , a medida que aumenta el tiempo de contacto, Ω_i tiende a comportarse como uniformemente reactiva. El tiempo requerido para la formación de Ω_r suele denominarse "tiempo de inducción", y es un parámetro característico de estas transformaciones.

Shieh y Lee (1992), a los efectos de explicar la presencia del "tiempo de inducción", a través de fenómenos diferentes de los que comprende el modelo "nucleación y crecimiento", plantean diversas causas, a las que resumiremos aquí en las dos siguientes:

- (A). Sobre Ω^0 se hallan adsorbidas impurezas, cuya eliminación da lugar a la formación de Ω_r . En estos casos, el "tiempo de inducción" es el tiempo requerido para eliminarlas, lo cual puede realizarse por desorción térmica, o bien mediante reacción química con el reactivo fluido.

- (B). La velocidad inicial de la reacción está controlada por la velocidad de adsorción del reactivo fluido - Etapa (AB.2) - o por la velocidad de desorción del producto fluido - Etapa (AB.4) -. En estos casos el tiempo requerido para la adsorción de A o para la desorción de Q, es el "tiempo de inducción".

En ambos casos, de acuerdo con Shieh y Lee (1992), la velocidad de formación Ω_r puede expresarse como

$$\frac{d\theta}{dt} = k_r (1 - \theta) \quad \theta = \frac{\Omega_r}{\Omega_i} \quad (3-29a,b)$$

cuya integración, sujeta a la condición inicial $\theta = \theta^0$ en $t = 0$, nos da

$$\Omega_r = \Omega_i [1 - (1 - \theta^0) \exp(-t/t_{in})] \quad (3-30)$$

con $k_r = 1/t_{in}$, donde: t_{in} , es el tiempo de inducción.

Para Ω_r , sin introducir un error apreciable, pueden emplearse los modelos que se desarrollaron durante el modelado de las Transformaciones I. Por ej., para Partículas con Formas 012, combinando la ec.(3-30) con la (2-12), obtenemos

$$\Omega_r = \Omega^0 [1 - (1 - \theta^0) \exp(-t/t_{in})] (1 - X)^{m/(1+m)} \quad (3-31)$$

El procedimiento de modelado de las Transformaciones III- β consiste en combinar la ec.(3-31) con la (1-26), lo cual, teniendo presente a la ec.(2-13), nos da

$$\frac{du}{dt^*} = -h r^* [1 - (1-\theta^0)e^{-t^*}] \quad (3-32)$$

con

$$CI) \quad u = 1 \quad \text{en} \quad t^* = 0 \quad (3-33)$$

$$t^* = \frac{t}{t_{in}} \quad r^* = \frac{r_s}{r_{s^0}} \quad h = \frac{2 b m_B r_{s^0} t_{in}}{\int \ell^0} \quad (3-34a,b,c)$$

donde: h , es el módulo de reacción; r_{s^0} , es la velocidad de reacción evaluada en $t = 0$.

- Reacciones en Régimen III-1 a r_s constante

Si la reacción se realiza a r_s constante, entonces $r^* = 1$ y la integración de la ec.(3-32) es inmediata, dándonos

$$u = 1 - h[t^* - (1-\theta^0)(1 - e^{-t^*})] = (1 - X)^{1/(1+m)} \quad (3-35)$$

la cual, para $t_{in} \rightarrow 0$, se reduce a la ec.(2-19). La representación gráfica de la ec.(3-35), con $\tau = h t^*$, $m = 2$ y $\theta^0 = 0$ puede verse en la en la Fig. 3-2, junto con la de la ec.(2-19).

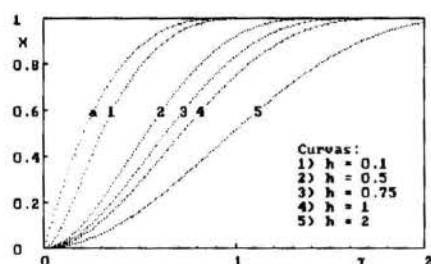


Figura 3-2. Representación gráfica de las ecs.(2-16) - curva (a)- y de la (3-35) con $\theta^0 = 0$ y diferentes valores de h - curvas 1 a 5 -, ambas con $m = 2$ y $\tau = h t^*$

Reacciones en Régimen III-3

En el modelado de reacciones fluido-sólido reactivo que se comportan como Transformaciones III- β y proceden en régimen de control mixto, deberá tenerse presente que las relaciones de vínculo (2-1a,b) no son aplicables a estos casos, dado que no cumplen la condición de Ω , igual a Ω , con que fueron formuladas. Las nuevas relaciones de vínculo para C_{As} y C_{Qs} , son ahora las siguientes

$$C_{As} = C_A - \frac{a r_s \theta}{k_c} \quad C_{Qs} = C_Q + \frac{q r_s \theta}{k_c} \quad (3-36a,b)$$

las cuales deben combinarse con las diferentes expresiones cinéticas que se adopten para r_s , y finalmente resolverse en esta variable.

- Disoluciones de sólidos en líquidos

La presencia de un tiempo de inducción en algunas disoluciones de sólidos en líquidos, puede ser explicada como: "el tiempo requerido para que el solvente disocie las moléculas sólidas ubicadas en Ω_1 , y la migración del soluto desde la zona de disociación". Según esta explicación, el tiempo de inducción está vinculado a la formación de C_{B0} , cuya velocidad puede expresarse como

$$\frac{dC_{B0}}{dt} = k_d(C_B^* - C_{B0}) \quad (3-37)$$

la que al ser integrada, sujeta a la condición inicial $C_{B0} = C_{B0^0}$ en $t = 0$, nos da

$$C_{B0} = C_B^* [1 - (1 - C^0)e^{-t^*}] \quad (3-38)$$

con $k_d = 1/t_{in}$, $C^0 = C_{B0^0}/C_B^*$ y $t^* = t/t_{in}$. Finalmente, sustituyendo la ec.(3-38) en la (1-10), obtenemos

$$N_B = k_c(C_B^* [1 - (1 - C^0)e^{-t^*}] - C_B) \quad (3-39)$$

la cual debe resolverse combinada con la ec.(1-25).

TRANSFORMACIONES IV

Caracterización y Clasificación

Las características principales que se observan en las Transformaciones IV, son: (a) la partícula reactante presenta, al comienzo o durante la transformación, una o más regiones sólidas porosas, y; (b) la velocidad de formación de la interfase reaccional es la que controla la velocidad inicial de la transformación. Estas transformaciones tienen en común la caracterización (a) con las Transformaciones II, y la (b) con las Transformaciones III. Por lo tanto, la clasificación de las Transformaciones IV se obtiene como resultado de combinar las clasificaciones de las Transformaciones II y III. Es decir:

(a) Según el modo con que se forma Ω

- (a.1) Transformaciones IV- α : la formación de la interfase reaccional es de tipo *autolocalizada* o *topoquímica*. En estos casos la formación de Ω , se realiza del modo descrito por el modelo "nucleación y crecimiento", adaptado por Delmon (1969).

- (a.2) Transformaciones IV- β : la interfase reaccional se forma a medida que la superficie interfacial se activa.

(b) Según la naturaleza de la estructura inicial de la partícula reactante y los cambios que experimenta durante la transformación

- (b.1) Transformaciones IV-A: reacciones con fluidificación de partículas reactantes porosas - de tipo (1-1) y (1-2).

- (b.2) Transformaciones IV-B: reacciones de partículas reactantes no porosas con formación de un producto fluido y otro sólido poroso que permanece adherido a la partícula.

- (b.3) Transformaciones IV-C: reacciones de partículas reactantes porosas con formación de un producto fluido y otro sólido poroso que permanece adherido a la partícula.

Para identificar la clase a la pertenece cada transformación lo haremos como: Transformación IV-i.j (con: $i = \alpha, \beta$; $j = A, B, C$).

Regímenes de Velocidad

En principio, los regímenes de velocidad que distinguimos en las Transformaciones IV son los mismos que observamos para las Transformaciones II, pero a estos debemos agregarle ahora el de la *Etapa (B.1)* (ver Fig. 1-5). Es decir:

- **régimen IV-0**: la velocidad inicial de la transformación es controlada por la velocidad de formación de Ω , - *Etapa (B.1)*.

- **régimen IV-1 o régimen de control químico**: la velocidad de la transformación es controlada por la velocidad de las *Etapas (AB.2) a (AB.4)*.

- **régimen IV-2**: las velocidades de las *Etapas (AB.2) a (AB.4)* son del mismo orden de magnitud que las de las *Etapas (A.1) y (A.5)*.

- **régimen IV-3:** las velocidades de las *Etapas* (AB.2) a (AB.4) son del mismo orden de magnitud que las de la *Etapas* (A.0), (A.1), (A.5) y (A.6).

- **régimen IV-4 o régimen de control por transferencia de masa:** la velocidad de la transformación es controlada por las velocidades de las *Etapas* (A.0) y (A.6).

Las Transformaciones IV se inician en régimen IV-0, pero luego, a medida que avanza el tiempo de reacción, pueden cambiar gradualmente a otros regímenes de velocidad.

Hipótesis Generales de Modelado

Las hipótesis que se adoptan en el modelado de reacciones fluido-sólido reactivo que se comportan como Transformaciones IV, son la (HG3) y

(HGIV1) "reactivo sólido puro";

(HGIV2) "la estructura de la partícula reactante es continua, tanto en la fase sólida como en los poros."

Transformaciones IV-α

No se han desarrollado modelos específicos para todos los casos de Transformaciones IV-α que puedan presentarse a distintos regímenes de velocidad. Sólo tenemos referencia para el caso de Transformaciones IV-α.B en régimen IV-1, el cual, de acuerdo con Delmon (1969) puede ser tratado como una Transformación III-α que procede en régimen III-1.

Transformaciones IV-β

En el modelado de estas transformaciones se utiliza el modelo "activación de la superficie interfacial" de Shieh y Lee (1992), combinado con los métodos desarrollados para el modelado de las Transformaciones II. En su presentación original, Shieh y Lee (1992) lo combinan con el modelo "frente móvil de reacción", a los efectos de tratar datos cinéticos provenientes de reacciones gas-sólido reactivo que se comportan como Transformaciones IV-β.B. El procedimiento de modelado es muy simple, sólo requiere que en el desarrollo de modelos para Transformaciones II, se reemplace la hipótesis (HGII1) $[\Omega_i = \Omega_i]$ por la ec.(3-30), es decir: $\Omega_i = \Omega_i [1 - (1-\theta^\circ)\exp(-t/t_{in})]$. Para ejemplificar este procedimiento trataremos primero el caso de Transformaciones IV-β.A en régimen VI-1, y luego el de Transformaciones IV-β.C con valores del módulo de Thiele menores que 0.2.

Transformaciones IV-β.A en régimen IV-1

El modelado de este caso puede realizarse fácilmente combinando el modelo "activación de la superficie interfacial" con los modelos de "poros cilíndricos" de Petersen (1957), de Bhatia y Perlmutter (1980) y de Gavalas (1980). El análisis de estos modelos puede verse en Quiroga et al. (1996b), sobre el cual nos basaremos aquí.

En este caso, también se cumple que para cualquier tiempo de reacción: $r = r^\circ + q$, donde r y r° son el radio actual e inicial del poro, respectivamente; y q es el desplazamiento que experimenta la superficie interfacial desde que el momento que los reactivos sólido y fluido se pusieron en contacto. Retomemos ahora las ecs.(2-20) a (2-22):

$$1 - X = \frac{1 - \epsilon}{1 - \epsilon^\circ} \quad (2-20)$$

$$dV_p = \Omega_p dq \quad (2-21)$$

$$\frac{d\epsilon}{dq} = \frac{\Omega_i}{V^\circ} \quad (2-22)$$

donde: V_p y Ω_p , son el volumen y la superficie del poro. A través de las ecs.(2-20) a (2-22), y por combinación con la (1-26), obtenemos

$$\frac{dX}{dt} = \frac{1}{(1-\epsilon^\circ)} \frac{d\epsilon}{dt} = \frac{\Omega_i}{(1-\epsilon^\circ)V^\circ} \frac{dq}{dt} = \frac{b m_B r_S \Omega_r}{M^\circ} \quad (3-40)$$

de la cual, tomando en cuenta la ec.(3-30), obtenemos

$$\frac{dq}{dt} = \frac{b m_B r_S}{f} [1 - (1-\theta^\circ)e^{-t^*}] \quad (3-41)$$

cuya integración debe satisfacer: $q = 0$ en $t = 0$.

Para el caso de una reacción del tipo (1-2) a r_S constante con $\theta^\circ = 0$, combinando la integral de la ec.(3-41) con el modelo de Petersen, obtenemos

$$X = \frac{\epsilon^\circ(1+h(t^*-1+e^{-t^*}))^2(G-1-h(t^*-1+e^{-t^*})) - G + 1}{(1-\epsilon^\circ)(G-1)} \quad (3-42)$$

con $h = b m_B r_S t_{in}/f r^\circ$ y $t^* = t/t_{in}$. Procediendo de igual modo con el modelo de Bhatia-Perlmutter-Gavalas, obtenemos ahora:

$$X = 1 - \exp(-h(t^*-1+e^{-t^*})[1 + 0.25 \phi h(t^*-1+e^{-t^*})]) \quad (3-43)$$

con ϕ definido por la ec.(2-31b) y $h = 4\pi b B_1 m_B r_S t_{in}/f$

Transformaciones IV-β.C con $\phi < 0.2$

Tomando en cuenta las ideas generales del modelo "homogéneo", podemos expresar la superficie interfacial, Ω_i , del modo siguiente

$$\Omega_i = M^\circ S_g^\circ (1 - X)^p \quad (3-44)$$

donde p representa el orden de reacción con respecto del reactivo sólido.

Combinando ahora la ec.(3-44) con las ecs.(1-26) y (3-29b), para el caso r_S constantes obtenemos

$$\frac{dX}{dt^*} = h r^* (1 - X)^p [1 - (1 - \theta^\circ)e^{-t^*}] \quad (3-45)$$

con $t^* = t/t_{in}$ y $h = b m_B r_S^\circ S_g^\circ t_{in}$.

Integrando la ec.(3-45) con diferentes valores de p obtenemos los modelos siguientes:

- para $p = 1$

$$\ln(1 - X) = -h[t^* - (1 - \theta^\circ)(1 - e^{-t^*})] \quad (3-46)$$

- para $p = 0$

$$X = h[t^* - (1 - \theta^\circ)(1 - e^{-t^*})] \quad (3-47)$$

- para $p = 2$

$$X = \frac{h[t^* - (1 - \theta^\circ)(1 - e^{-t^*})]}{1 + h[t^* - (1 - \theta^\circ)(1 - e^{-t^*})]} \quad (3-48)$$

CONSIDERACIONES FINALES

La importancia que tiene el tratamiento de datos cinéticos de transformaciones fluido-sólido reactivo, resulta evidente toda vez que pensamos que es el método apropiado que permite, a partir de datos experimentales, obtener la información básica confiable que se requiere a nivel ingenieril para diseñar y operar los equipos de proceso.

Asociados al tratamiento de datos cinéticos de transformaciones fluido-sólido reactivo, suelen presentarse diversos problemas. Uno de ellos está relacionado con la selección y el de-

sarrollo de modelos específicos para correlacionar datos cinéticos de un sistema experimental. Este problema suele presentar diferentes grados de dificultad, y muchas veces no puede solucionarse con la rapidez y facilidad que se desea, justificándose entonces el empleo de modelos empíricos.

A través del modelado teórico se procura formular, sobre la base de principios fisicoquímicos y con el mayor grado de detalle posible, los cambios asociados a la transformación que tiene lugar en el contactor experimental; y así de este modo lograr una interpretación más aproximada de las relaciones causa-efecto. Los esfuerzos realizados en el modelado teórico de transformaciones fluido-sólido reactivo han sido grandes, ello ha quedado documentado por numerosas publicaciones que han aparecido desde 1896 hasta la fecha, siendo sus pioneros Shchukarev (1896) y Noyes y Whitney (1897). Este cúmulo de información ha contribuido grandemente a cimentar la base del conocimiento científico que disponemos actualmente sobre el tema.

Tomando como objetivo principal la necesidad de facilitar la selección y el desarrollo modelos, tanto en las Partes I y II de Quiroga et al. (1996a,b), como así también en este trabajo, hemos presentado y analizado diferentes modelos basados sobre la teoría del continuo; y hemos podido comprobar que la clasificación que propusimos en la Parte I para las transformaciones fluido-sólido reactivo, resulta útil a los efectos de establecer cuales son las hipótesis adjuntas a cada modelo, y a través de ellas inferir para qué régimen, naturaleza de la interfase reaccional y características estructurales de la partícula reactante, es válido. También hemos podido comprobar que la mayoría de estos modelos tienen como base común las ecuaciones fundamentales (1-25) - disolución y vaporización de sólidos - y (1-26) - reacciones fluido-sólido reactivo -.

Finalmente, a modo de conclusión de esta serie de trabajos, podemos decir que, en cierto modo, la formulación del problema de modelado de transformaciones fluido-sólido reactivo se presenta como un gran rompecabezas, donde las ecs.(1-25) y (1-26) son piezas claves, que deben combinarse con modelos de r_s , N_A , N_B , Ω , Ω_i y Ω_r , debiendo seleccionarse cada uno de ellos a través de: la naturaleza fisicoquímica de la interacción sólido-fluido; el régimen que controla la velocidad de la transformación; la naturaleza de la superficie interfacial; y las características estructurales de la partícula reactante.

Bibliografía

- Austin, J. B. and Rickett, R. L., 1939, *Trans AIME*, **135**, 396.
- Avrami, M., 1939, *J. Chem. Phys.*, **7**, 1103.
- Avrami, M., 1940, *J. Chem. Phys.*, **8**, 212.
- Avrami, M., 1941, *J. Chem. Phys.*, **9**, 177.
- Bamford, C. H. and Tipper, C. F. H., 1980, "Comprehensive Chemical Kinetics" Vol 22, Elsevier Scientific Publishing.
- Bhatia, S. K., and Perlmutter, D. D., 1980, *A.I.Ch.E.J.*, **26**, 379.
- Boldyrev, V. V., Bulens, M. and Delmon, B., 1979, "The control of Reactivity of Solids.", Elsevier Sc. Pub., New York.
- Delmon, B., 1969, "Introduction a la Cinétique Hétérogène", Editions Technip, Paris.
- Gavalas, G. R., 1980, *A.I.Ch.E.J.*, **26**, 577.
- Johnson, W. A. and Mehl, R. F., 1939, *Trans. Amer. Inst. Mining Metall. Engrs.*, **135**, 416.
- Noyes, A. A. and W. R. Whitney, W. R., 1897, *J. Am. Chem. Soc.*, **19**, 930.
- Petersen, E. E., 1957, *A.I.Ch.E.J.*, **3**, 443.
- Prout, E. G. and Tompkins, F. C., 1944, *Trans. Faraday Soc.*, **40**, 488.
- Quiroga, O. D., Avanza, J. R., Fusco, A. J. and Villa, L. T., 1996a, "Transformaciones Fluido-Sólido Reactivo. Parte I. Caracterización, Ecuaciones Fundamentales del Modelado y Clasificación", LATCYM 96.
- Quiroga, O. D., Avanza, J. R., Fusco, A. J. and Villa, L. T., 1996b, "Transformaciones Fluido-Sólido Reactivo. Parte II. Modelado Cinético de Transformaciones I y II", LATCYM 96.
- Shchukarev, A. N., 1896, *J. Russ. Phys. Chem. Soc.*, **28**, 604.
- Shieh, M. D. and Lee, C., 1992, *Chem. Eng. Sci.*, **47**, 4017.

ABSTRACT

The kinetic modeling of reactant solids particle with nonuniform reactional interface during the process is analyzed. Different cases regarding to nonporous solids particles without formation of solids products - Transformations III - as well as porous or non porous particles with and without formation of porous solids products - Transformations IV -, are considered.



ANÁLISE DE ESCOAMENTOS VISCOSOS A BAIXAS VELOCIDADES UTILIZANDO UM MÉTODO NUMÉRICO IMPLÍCITO

MARCELLO A. S. FERRARI
Instituto de Aeronáutica e Espaço
Centro Técnico Aeroespacial
12228-904 - São José dos Campos - SP - Brasil

JOÃO L. F. AZEVEDO
Instituto de Aeronáutica e Espaço
Centro Técnico Aeroespacial
12228-904 - São José dos Campos - SP - Brasil



RESUMO

O trabalho aborda dois aspectos importantes no processo de desenvolvimento de um esquema numérico para o tratamento de escoamentos independentemente do regime de velocidade. Inicialmente, é proposto um método de aceleração de convergência para um algoritmo não-viscoso implícito anteriormente desenvolvido. Este aumento de eficiência se baseia na diagonalização do operador implícito. Posteriormente, o esquema é estendido de forma a tratar também escoamentos viscosos. Experimentos numéricos foram realizados para configurações típicas de interesse e os resultados mostram boa concordância com a literatura. Uma redução de custo computacional de mais de 50% em relação ao algoritmo original é observada.

INTRODUÇÃO

O presente trabalho é desenvolvido a partir do algoritmo implícito de fatoração aproximada de Beam & Warming (1978) escrito em forma delta, o qual tem como variáveis dependentes o vetor de variáveis conservadas. Este algoritmo apresenta bons resultados somente na faixa compressível, o que provavelmente ocorre porque a baixas velocidades, nas quais o escoamento é predominantemente incompressível, os gradientes de densidade são muito pequenos. Uma vez que o algoritmo é escrito na forma delta e a densidade é escolhida como uma das variáveis dependentes, o cálculo de sua variação pode apresentar valores numéricos da ordem de grandeza do erro do próprio método e portanto não ser fisicamente representativo. Este problema é contornado através de uma escolha apropriada das variáveis dependentes. No método proposto, assim como em Chen & Pletcher (1991), são escolhidas como variáveis dependentes as variáveis primitivas, ou seja, pressão, componentes cartesianas de velocidade e temperatura. A constatação de que a baixas velocidades os gradientes de pressão são significativos justifica a sua escolha como uma das variáveis dependentes. O método de fatoração aproximada de Beam & Warming (1978) envolve a resolução de matrizes tridiagonais de blocos cheios. O trabalho de Pulliam & Chaussee (1981) propõe uma mudança no operador implícito mostrando que é possível reduzir este problema à resolução de matrizes tridiagonais de blocos diagonais, o que significa uma redução considerável no número de operações realizadas por iteração. A resolução do algoritmo diagonal reside na possibilidade de se escrever a matriz jacobiana envolvida como um produto de matrizes que envolve uma matriz diagonal. Como para o algoritmo *all-speed* (assim será referenciado o trabalho de Martins, 1994, a partir do qual o presente trabalho é desenvolvido, neste artigo) as matrizes jacobianas são diferentes daquelas encontradas no método de Beam & Warming (1978), o algoritmo diagonal não é diretamente aplicável. No trabalho proposto é mostrado que manipulando o algoritmo *all-speed* de maneira apropriada pode-se aplicar o algoritmo diagonal de maneira bastante semelhante àquela apresentada por Pulliam & Chaussee (1981).

As equações são escritas em forma de lei de conservação com coordenadas curvilíneas generalizadas. Para marcha no

tempo, é aplicado o método de Euler implícito. Para discretização espacial são utilizados esquemas centrados de segunda ordem e instabilidades oriundas de não linearidades são controladas com a adição explícita de termos de dissipação artificial. Experimentos numéricos mostram resultados bastante semelhantes ao esquema *all-speed* no que concerne precisão e estabilidade, com custos computacionais reduzidos a até 30 % do custo com o método original. O acréscimo de termos viscosos à formulação é feito somente no lado explícito do algoritmo, dado que o fator preponderante na solução de problemas estacionários é o modo como é feita a discretização do lado direito. O lado implícito é, portanto, mantido.

FORMULAÇÃO TEÓRICA

Inicialmente, serão apresentadas apenas as equações de Euler, uma vez que a implementação computacional do operador implícito é completamente aproveitada quando são resolvidas as equações que envolvem termos viscosos. As equações de Euler bidimensionais podem ser escritas em forma de lei de conservação para um sistema de coordenadas curvilíneas generalizadas que se conforma ao corpo que se queira resolver. O sistema resultante pode ser encontrado em Azevedo (1988). Na derivação do algoritmo para todos os regimes de velocidade, densidade é substituída por pressão e temperatura com auxílio da equação de estado $p = \rho RT$. O vetor de variáveis dependentes será composto por variáveis primitivas (p, u, v, T) em vez das variáveis conservadas $(\rho, \rho u, \rho v, e)$ (Chen & Pletcher, 1991). As equações de Euler serão então escritas:

$$\frac{\partial Q(q)}{\partial \tau} + \frac{\partial E(q)}{\partial \xi} + \frac{\partial F(q)}{\partial \eta} = 0 \quad (1)$$

O vetor de variáveis primitivas é:

$$q = [p \quad u \quad v \quad T]^t$$

onde p é pressão estática, u e v são componentes cartesianas de velocidade e T é temperatura. O superscrito t significa matriz

transposta. Os vetores algébricos que aparecem na Eq. (1) podem ser escritos

$$Q = J^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \frac{p}{T} \\ \frac{pu}{T} \\ \frac{pv}{T} \\ \left[\frac{p}{(\gamma-1)} + \frac{p}{2RT} (u^2 + v^2) \right] \end{array} \right\}, \quad (2)$$

$$E = J^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \frac{pU}{T} \\ \frac{puU}{T} + Rp\xi_x \\ \frac{pvU}{T} + Rp\xi_y \\ \left[\frac{\gamma p}{(\gamma-1)} + \frac{p}{2RT} (u^2 + v^2) \right] U - p\xi_t \end{array} \right\}, \quad (3)$$

$$F = J^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \frac{pV}{T} \\ \frac{puV}{T} + Rp\eta_x \\ \frac{pvV}{T} + Rp\eta_y \\ \left[\frac{\gamma p}{(\gamma-1)} + \frac{p}{2RT} (u^2 + v^2) \right] V - p\eta_t \end{array} \right\}, \quad (4)$$

onde U e V são as componentes contravariantes de velocidade dadas por:

$$U = \xi_t + \xi_x u + \xi_y v, \quad V = \eta_t + \eta_x u + \eta_y v.$$

R é a constante dos gases perfeitos, γ é a razão de calores específicos (C_p/C_v) e J é o jacobiano da transformação. $\xi_t, \xi_x, \xi_y, \eta_t, \eta_x$ e η_y são termos de métrica. Suas expressões podem ser encontradas em Azevedo (1988). Aplicando o método de Euler implícito para marcha no tempo, obtém-se

$$Q^{n+1} = Q^n + \Delta t \left(\frac{\partial Q}{\partial t} \right)^{n+1} + \Delta t O(\Delta t). \quad (5)$$

O termo que envolve a derivada no tempo é então substituído pela expressão vinda da equação diferencial original:

$$Q^{n+1} = Q^n - \Delta t \left(\frac{\partial E}{\partial \xi} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \right)^{n+1} + \Delta t O(\Delta t). \quad (6)$$

As não linearidades são removidas através da expansão dos termos em série de Taylor em torno de Q^n :

$$\begin{aligned} Q^{n+1} &= Q^n + D^n (q^{n+1} - q^n) + O(\Delta t^2), \\ E^{n+1} &= E^n + A^n (q^{n+1} - q^n) + O(\Delta t^2), \\ F^{n+1} &= F^n + B^n (q^{n+1} - q^n) + O(\Delta t^2), \end{aligned} \quad (7. a,b,c)$$

onde D, A e B são as matrizes jacobianas:

$$D^n = \left(\frac{\partial Q}{\partial q} \right)^n, \quad A^n = \left(\frac{\partial E}{\partial q} \right)^n, \quad B^n = \left(\frac{\partial F}{\partial q} \right)^n. \quad (8)$$

Substituindo as Eqs. (6), (7) e (8) na Eq. (5), aplicando a fatoração aproximada e chamando $\Delta q^n = q^{n+1} - q^n$:

$$\begin{aligned} \left[I + \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial A^n}{\partial \xi} \right) \right] \left[I + \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial B^n}{\partial \eta} \right) \right] \Delta q^n = \\ - \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial E^n}{\partial \xi} + \frac{\partial F^n}{\partial \eta} \right) + O(\Delta t), \end{aligned} \quad (9)$$

que reproduz o algoritmo *all-speed* na sua forma original.

Na Eq. (9), a matriz jacobiana A pode ser escrita de maneira modificada, se for aplicada a regra da cadeia:

$$A = \frac{\partial E}{\partial q} = \frac{\partial E}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial q} = \hat{A} D. \quad (10)$$

Aplicando a relação obtida na Eq. (10) na Eq. (9) tem-se:

$$\begin{aligned} \left[I + \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial \hat{A} D}{\partial \xi} \right)^n \right] \left[I + \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial \hat{B} D}{\partial \eta} \right)^n \right] \Delta q^n = \\ = - \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial E^n}{\partial \xi} + \frac{\partial F^n}{\partial \eta} \right) + O(\Delta t) \end{aligned} \quad (11)$$

As matrizes jacobianas \hat{A} e \hat{B} constituem, por definição, um sistema hiperbólico, i.e., têm autovalores reais e um conjunto completo de autovetores. Este fato garante a existência de transformações similares (Pulliam & Chaussee, 1981) que podem ser utilizadas para diagonalizar \hat{A} e \hat{B} :

$$\hat{A} = T_\xi \Lambda_\xi T_\xi^{-1}, \quad \hat{B} = T_\eta \Lambda_\eta T_\eta^{-1}. \quad (12)$$

Substituindo na Eq. (11) e escrevendo as matrizes identidade de modo conveniente:

$$\left[\left(D^{-1} T_{\xi} T_{\xi}^{-1} D \right)^n + \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial T_{\xi} \Lambda_{\xi} T_{\xi}^{-1} D}{\partial \xi} \right)^n \right] \times \left[\left(D^{-1} T_{\eta} T_{\eta}^{-1} D \right)^n + \Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial T_{\eta} \Lambda_{\eta} T_{\eta}^{-1} D}{\partial \eta} \right)^n \right] \Delta q^n = -\Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial \mathcal{E}^n}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathcal{F}^n}{\partial \eta} \right) + O(\Delta t). \quad (13)$$

O operador acima pode ser escrito de forma modificada, se T_{ξ} e T_{η} forem retirados de dentro dos operadores de derivadas:

$$\left(D^{-1} T_{\xi} \right)^n \left[I + \Delta t \left(\frac{\partial \Lambda_{\xi}}{\partial \xi} \right)^n \right] \left(T_{\xi}^{-1} D D^{-1} T_{\eta} \right)^n \times \left[I + \Delta t \left(\frac{\partial \Lambda_{\eta}}{\partial \eta} \right)^n \right] \left(T_{\eta}^{-1} D \right)^n \Delta q^n = -\Delta t (D^n)^{-1} \left(\frac{\partial \mathcal{E}^n}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathcal{F}^n}{\partial \eta} \right) + O(\Delta t). \quad (14)$$

Uma vez que T_{ξ} e T_{η} são funções de ξ e η , a retirada das matrizes para a esquerda dos operadores é uma aproximação. Simplificando a expressão e chamando $T_{\xi}^{-1} T_{\eta}$ de \hat{N} obtém-se:

$$\left(T_{\xi} \right)^n \left[I + \Delta t \left(\frac{\partial \Lambda_{\xi}}{\partial \xi} \right)^n \right] \hat{N} \times \left[I + \Delta t \left(\frac{\partial \Lambda_{\eta}}{\partial \eta} \right)^n \right] \left(T_{\eta}^{-1} D \right)^n \Delta q^n = -\Delta t \left(\frac{\partial \mathcal{E}^n}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathcal{F}^n}{\partial \eta} \right) + O(\Delta t). \quad (15)$$

Esta é a forma final do algoritmo aqui proposto. A resolução do lado esquerdo deste algoritmo envolve a resolução de duas matrizes tridiagonais de blocos diagonais e três multiplicações explícitas por matrizes cheias em todo o campo. Isto requer menos esforço computacional que a inversão de duas matrizes tridiagonais de blocos cheios como no algoritmo em sua forma original (Martins, 1994). A implementação deste algoritmo segue os passos seguintes:

- 1) Cálculo explícito do lado direito em todo o campo.
- 2) Multiplicação explícita pela matriz $(T_{\xi}^{-1})^n$.

- 3) Resolução de tridiagonal de blocos diagonais em ξ .
- 4) Multiplicação explícita por \hat{N}^{-1} .
- 5) Resolução de tridiagonal de blocos diagonais em η .
- 6) Multiplicação explícita pela matriz $(D^{-1} T_{\eta})^n$.
- 7) Atualização e aplicação das condições de contorno.

Foi apresentado então o desenvolvimento para as equações de Euler. Com o acréscimo de termos viscosos, fenômenos como o estabelecimento de camada limite e formação de bolhas de recirculação secundárias podem ser capturados pela solução. Evidentemente, as equações de Euler não dão suporte para a captura de fenômenos deste tipo. No caso presente, a implementação de termos viscosos se dará somente no lado direito do algoritmo.

O lado direito (RHS) será agora escrito:

$$RHS = -h \left(\frac{\partial (E - E_v)}{\partial \xi} + \frac{\partial (F - F_v)}{\partial \eta} \right) + O(\Delta t) \quad (16)$$

Note-se que no caso das equações de Euler, tem-se $E_v = F_v = 0$. Os termos de fluxo viscosos são dados por:

$$E_v = \begin{Bmatrix} 0 \\ \xi_x \tau_{xx} + \xi_y \tau_{xy} \\ \xi_x \tau_{yx} + \xi_y \tau_{yy} \\ \xi_x \beta_x + \xi_y \beta_y \end{Bmatrix}, \quad F_v = \begin{Bmatrix} 0 \\ \eta_x \tau_{xx} + \eta_y \tau_{xy} \\ \eta_x \tau_{yx} + \eta_y \tau_{yy} \\ \eta_x \beta_x + \eta_y \beta_y \end{Bmatrix}. \quad (17)$$

As componentes do tensor de tensões viscosas podem ser escritas como:

$$\tau_{x_i x_j} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}. \quad (18)$$

Na equação anterior, a notação de Einstein para somatório onde há índices repetidos foi utilizada. δ é o delta de Kronecker e μ é o coeficiente de viscosidade dinâmica laminar. A hipótese de Stokes, $\lambda = -(2/3)\mu$, foi utilizada.

Para β_x e β_y da equação da energia, tem-se:

$$\beta_x = \tau_{xx} u + \tau_{xy} v - q_x, \quad \beta_y = \tau_{xy} u + \tau_{yy} v - q_y. \quad (19)$$

Utilizando ainda a notação de índices, as componentes de fluxo de calor podem ser escritas como:

$$q_{x_j} = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} = -\frac{\mu}{Pr} \gamma \frac{\partial e_i}{\partial x_j}, \quad (20)$$

onde κ é o coeficiente de condutividade térmica, e_i é a energia interna específica, T é a temperatura e Pr é o número de Prandtl.

Para as equações acima descritas, uma adimensionalização conveniente é adotada. Nas equações originais é feita, considerando que P é uma propriedade genérica, a substituição $P = \bar{P}P_{ref}$ nas propriedades dimensionais. Agrupando as constantes de maneira conveniente, chega-se à forma final dos novos vetores de fluxo:

$$E = J^{-1} \left\{ \begin{array}{l} \frac{puU}{T} + Rp\xi_x - \frac{pU}{Re} (\xi_x \tau_{xx} + \xi_y \tau_{xy}) \\ \frac{pvU}{T} + Rp\xi_y - \frac{pU}{Re} (\xi_x \tau_{xy} + \xi_y \tau_{yy}) \\ \left[\frac{\gamma p}{(\gamma - 1)} + \frac{p}{2RT} (u^2 + v^2) \right] U - p\xi_t - \frac{1}{Re} (\xi_x \beta_x + \xi_y \beta_y) \end{array} \right\} \quad (21)$$

$$F = J^{-1} \left\{ \begin{array}{l} \frac{puV}{T} + Rp\eta_x - \frac{pV}{Re} (\eta_x \tau_{xx} + \eta_y \tau_{xy}) \\ \frac{pvV}{T} + Rp\eta_y - \frac{pV}{Re} (\eta_x \tau_{xy} + \eta_y \tau_{yy}) \\ \left[\frac{\gamma p}{(\gamma - 1)} + \frac{p}{2RT} (u^2 + v^2) \right] V - p\eta_t - \frac{1}{Re} (\eta_x \beta_x + \eta_y \beta_y) \end{array} \right\} \quad (22)$$

sendo que:
$$Re = \frac{\rho_{ref} v_{ref} l_{ref}}{\mu_{ref}}$$

As barras foram omitidas para simplificar a notação. As equações incorporam agora alguns parâmetros novos, a saber, o número de Reynolds (Re), o número de Prandtl (Pr) e o coeficiente de viscosidade dinâmica, os quais dizem respeito à relação entre forças de inércia e forças viscosas e condução de calor. Na presente implementação, Pr é admitido como 0.72 e μ é admitido como constante. O cálculo do número de Reynolds depende da adimensionalização adotada para as variáveis e do comprimento de referência escolhido de acordo com a configuração em questão.

Na aplicação das condições de contorno, para o caso das equações de Euler, é imposta condição de não escorregamento em paredes sólidas para o cálculo das componentes cartesianas de velocidade. Para temperatura e pressão é imposto gradiente nulo na parede. Para estas equações, rigorosamente, não se pode fazer uma imposição deste tipo. Definidos os contornos, a distribuição destas propriedades é automaticamente definida. Contudo, para efetuar o cálculo numérico, alguma condição de contorno deve ser imposta. Para o presente caso, este tipo de imposição não apresentou problemas. Para as equações de Navier-Stokes, as imposições dos valores de temperatura e pressão são mais simples que no caso das equações de Euler porque há transporte de calor e poder-se-ia, por exemplo, impor parede adiabática. Mesmo que na prática possa ser difícil reproduzir esta condição, há completo sentido físico em impor gradiente de temperatura nulo na parede. Para a velocidade, na parede, faz-se $u=v=0$. Condições de contorno de entrada e saída, em ambos os casos, são implementadas com o uso de relações características unidimensionais (Martins, 1994).

RESULTADOS

Será apresentado inicialmente um resultado para as equações de Euler bidimensionais, fazendo uma sucinta comparação dos resultados obtidos em Martins (1994) e o algoritmo proposto. A Figura 1 mostra a malha usada na solução do escoamento em um bocal convergente-divergente em regime transônico.



Figura 1 - Malha computacional 49x22, para configuração do bocal.

Foi usado neste exemplo o modelo linear de dissipação artificial com $\epsilon=0.5$. Comumente, este valor é encontrado experimentalmente e deve ser grande o suficiente para controlar oscilações e pequeno a ponto de não interferir na qualidade da solução. O problema do bocal é inicializado fixando-se velocidade nula e um valor para a pressão e outro para temperatura em todo o campo. Na última linha, i.e., na seção de saída, impõe-se o valor da pressão estática como sendo um terço do valor da pressão estática no interior do bocal. Tudo se passa como se no instante inicial existissem duas porções de gás separadas por um diafragma localizado na saída do bocal que fosse subitamente retirado. Neste problema, as condições iniciais são tais que se tenha, na solução convergida, escoamento subsônico na entrada do bocal, número de Mach unitário na garganta e um choque fraco logo após a constricção. A distribuição de pressão na linha central, ou linha de simetria, é mostrada na Figura 2. Nota-se perfeita concordância com os resultados encontrados por Martins (1994). O resultado mostra que, no caso presente, a aplicação do método de aceleração de convergência em nada compromete a qualidade da solução final. Um estudo detalhado para a configuração do bocal é feito em Azevedo et al. (1992). Nesta referência, são feitos experimentos mudando-se as características geométricas do bocal, mudanças nas condições iniciais e são pesquisados valores de dissipação artificial que melhor se aplicam em cada caso.

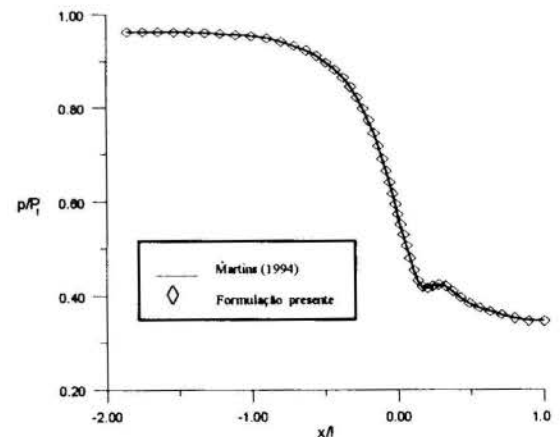


Figura 2 - Distribuição de pressão na linha de centro do bocal.

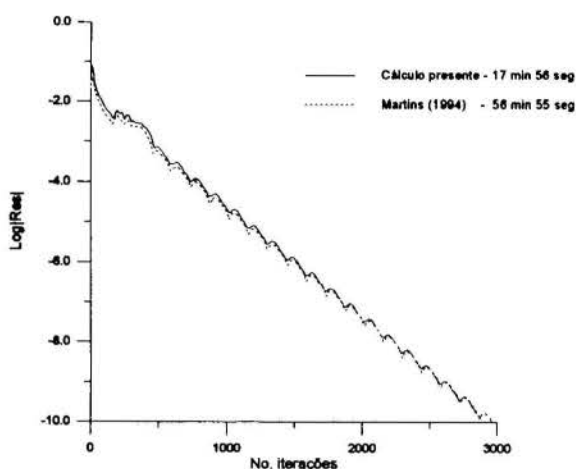


Figura 3 - Histórico de convergência para a configuração do bocal.

Verifica-se, pela Figura 3, que as características de convergência foram também mantidas. Para a formulação presente, porém, o mesmo resíduo final foi atingido em 38% do tempo necessário com a formulação de Martins (1994). Os resultados para escoamentos a baixo número de Mach, embora não apresentados aqui, demonstram muito boa concordância com os de Martins (1994), de modo semelhante ao exposto neste trabalho para o caso transônico. Um estudo bastante extenso da aplicação do algoritmo diagonal ao algoritmo para todos os regimes de velocidade é encontrado em Ferrari (1996). Neste trabalho, foram analisados escoamentos em torno de diversas configurações e regimes de voo para casos estacionários. Em todos os casos, para as equações de Euler, a qualidade da solução e as características de estabilidade e convergência do algoritmo foram mantidas, reduzindo o tempo de convergência de cerca de 70% em relação ao tempo necessário para o algoritmo *all-speed* original.

Para formulação viscosa, a primeira configuração testada foi a do degrau a jusante ou *backward-facing step*, como conhecido na literatura inglesa. Um esboço da configuração de interesse é mostrado na Figura 4.

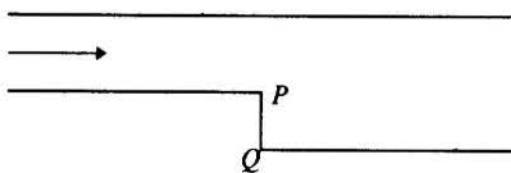


Figura 4 - Degrá a jusante ou *backward-facing step*.

Para este experimento, $M=0.1$ e o número de Reynolds, com comprimento característico com base na altura do degrau, é de 100. O ponto P da Figura 5 corresponde à quina do degrau e o ponto Q, ao canto. Nota-se, próximo à superfície, a definição da camada limite. Logo após o degrau, junto à parede vertical, vê-se definida uma bolha de recirculação. Esta solução se estabeleceu de modo semelhante ao se resolver as equações de Euler para a mesma configuração. Na solução para implementação viscosa, no entanto, nota-se o aparecimento de bolhas de recirculação secundárias, próximas ao canto, na parte inferior do degrau. O surgimento de bolhas secundárias é um fenômeno eminentemente viscoso, qual seja, a inversão de fluxo

na camada limite, que valida a formulação utilizada. Para este experimento, não foi verificada uma solução estacionária. Há constante surgimento e desaparecimento de bolhas secundárias e o ponto de recolamento da bolha maior caminha para direita a cada iteração. O campo de vetores apresentado corresponde a um estágio intermediário da solução.

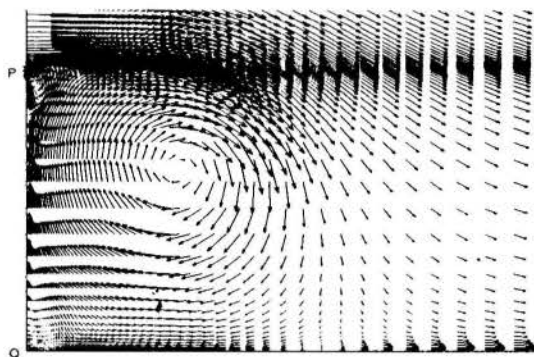


Figura 5 - Distribuição de velocidades para a configuração do degrá

A segunda configuração para a qual se aplicou o algoritmo viscoso foi a do cilindro circular a baixo Reynolds ($Re=30$). Para o caso presente foi resolvida apenas metade da configuração e para linha central aplicou-se condições de contorno de simetria. Este procedimento foi aplicado porque espera-se que, nesta faixa de Reynolds, se estabeleça a configuração estável de vórtices gêmeos, a qual é simétrica. A Figura 6 mostra o campo de velocidades para o caso do cilindro circular. Verifica-se o estabelecimento de um ponto de descolamento sobre a superfície do cilindro e a formação estável de uma bolha de recirculação. Para números de Reynolds entre 5 e 40, resultados experimentais mostram o estabelecimento da configuração estável de vórtices gêmeos. Acima de 40, há emissão alternada de vórtices. Estes valores limites variam de acordo com condições de laboratório como nível de turbulência do escoamento não perturbado e rugosidade da superfície do cilindro (Roshko, 1954).

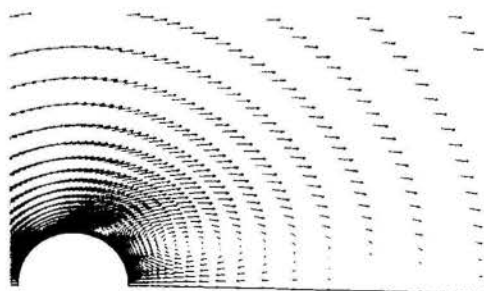


Figura 6 - Distribuição de velocidades para a configuração do cilindro, $Rey=30$.

Nos exemplos examinados no presente trabalho com a formulação viscosa, trabalhou-se numa baixa faixa de números de Reynolds. O presente método não incorpora um modelo de turbulência. Por esta razão, os casos foram testados a baixo Reynolds para garantir que o escoamento estaria inteiro numa faixa laminar. Para uma formulação mais completa, onde se

pudesse prever pontos de transição laminar turbulento e captura de camada limite turbulenta, o emprego de um modelo de turbulência seria recomendado.

COMENTÁRIOS FINAIS

Um método de diferenças finitas aplicado à solução das equações de Euler/Navier-Stokes no caso bidimensional foi apresentado. Os resultados se apresentam satisfatórios em uma ampla faixa de números de Mach e com custo computacional consideravelmente reduzido. O erro produzido pela alteração no operador implícito é largamente compensado pelo ganho no custo de cada iteração. Foi mostrado que as alterações necessárias para tornar um código *all-speed* diagonal seguem praticamente a mesma metodologia descrita por Pulliam & Chaussee (1981). A precisão e a qualidade da solução dependem apenas do modo como foi discretizado o lado direito do algoritmo, o qual foi mantido para o caso das equações de Euler. Para o caso onde foram levados em consideração termos de viscosidade e de condução de calor, manteve-se na parte implícita o mesmo algoritmo empregado para a resolução das equações de Euler. Rigorosamente, as matrizes jacobianas presentes no operador implícito deveriam ser recalculadas levando em conta termos novos na formulação. Se isto fosse feito, provavelmente obter-se-ia um código mais robusto, fisicamente mais realístico para análise transiente e com melhor razão de convergência, pois estariam sido levados em conta com maior rigor aspectos físicos envolvidos. No caso presente, contudo, a utilização das matrizes jacobianas originais mostrou-se suficiente. Levando em conta que estão sendo estudados apenas problemas de estado estacionário, verifica-se a não necessidade, para o caso presente, de mudar a forma das matrizes jacobianas. Há autores que utilizam códigos semelhantes ao apresentado para as equações de Navier-Stokes, implementando os termos viscosos só na parte explícita, para a resolução de problemas não-estacionários. Em Guruswamy (1992), um algoritmo com estas características é utilizado na resolução de problemas de aeroelasticidade com bons resultados.

O método proposto apresenta as mesmas características de estabilidade e precisão do algoritmo para qualquer regime de velocidade original. Resultados experimentais mostram redução no custo computacional de mais de 50%. Foram mostrados casos considerando a implementação de termos viscosos e os resultados mostram-se coerentes, dentro da faixa de Reynolds na qual se trabalhou. A malha computacional deve concentrar mais pontos próximo à parede sólida para cálculo de camada limite e condições de contorno próprias para parede sólida devem ser implementadas. Não é empregada a aproximação de camada fina. A extensão do método para problemas tridimensionais envolve mudanças nos operadores formalmente idênticas àquelas apresentadas para o caso bidimensional, não envolvendo dificuldades conceituais adicionais.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho recebeu suporte parcial do CNPq (Processo No. 530109/93-0) e da CAPES.

REFERÊNCIAS

Beam, R. M. , and Warming, R. F. , "An Implicit Factored Scheme for the Compressible Navier-Stokes

Equations," *AIAA Journal*, Vol. 16, No. 4, April 1978, pp. 393-402.

Chen, K.H., and Pletcher, R.H., "Primitive Variable, Strongly Implicit Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds," *AIAA Journal*, Vol. 29, No. 8, Aug. 1991, pp. 1241-1249.

Martins, R. J. , "Um Método de Diferenças Finitas para Simulação de Escoamentos em Qualquer Regime Velocidade," Tese de Mestrado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP, 1994.

Pulliam, T. H. and Chaussee, D. S. , "A Diagonal Form of an Implicit Approximate-Factorization Algorithm," *Journal of Computational Physics*, Vol. 39, 1981, pp. 347-363.

Azevedo, J. L. F. , "Aerodynamical Flow Simulation Using a Finite Difference Method," *Proceedings of the 2nd National Meeting of the Thermal Sciences*, Águas de Lindóia, SP, Brazil, Dec. 1988, pp. 3-6.

Azevedo, J. L. F., Fico, N.G.C.R., Jr., Ortega, M.A., and Luna, G.C., "Nozzle Flow Computations Using the Euler Equations," ICAS Paper No.92-4.1.2, *Proceedings of the 18th Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences*, Vol.I, Beijing, P.R. of China, Sept. 1992, pp. 97-107.

Ferrari, M. A. S. , "Aceleração de Convergência de um Método Numérico Implícito para Escoamentos em Qualquer Regime de Velocidade," Tese de Mestrado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP, julho, 1996.

Guruswamy, P. G., "Navier-Stokes on Swept-Tapered Wings, Including Flexibility," *Journal of Aircraft*, Vol. 29, No. 4, July-Aug. 1992.

Roshko, A. , "On the Development of Turbulent Wakes from Vortex Streets," *NACA Report*, Vol. 1191, 1954, 25p.

SUMMARY

The work address two important aspects in the development process of a numerical scheme capable of simulating all-speed flows. Initially, a convergence acceleration method is proposed for an inviscid, implicit algorithm which had been previously developed. This efficiency increase is based on the diagonalization of the implicit operator. Afterwards, the proposed scheme is extended in order to also treat viscous flows. Numerical experiments were performed for typical configurations of interest, and the results show good agreement with the literature. A computational cost reduction of more than 50% with regard to the original algorithm is observed.



NON-STATIONARY FLOW BETWEEN TWO PARALLEL PLATES WITH THE GAP PARTIALLY FILLED WITH A POROUS MEDIA



Ana Maria Aquino
UNESP/FEG
Graduate Course in
Mechanical Engineering
Campus de Guaratinguetá
12500 – 000 Guará - SP

Luiz R. Carrocci
UNESP/FEG
Associate Professor in
Mechanical Engineering
Energy Department
Campus de Guaratinguetá
12500 – 000 Guará - SP

Leon Sinay
INPE/LCP
12630 – 000
Cachoeira Paulista -SP

SUMMARY

Stationary and non - stationary flows are of great interest from the practical view point. We present in this work an exact solution of the equations that describe the flow between two parallel plates with the gap partially filled with a porous media. The upper plate oscillates longitudinally while the lower one remains stationary. Analytical expressions for the velocities and temperatures are derived and analysed as functions of porosity and thermal conductivity.

1. Introduction

Engineering applications such as petroleum wells drilling, flows in porous media, elastic waves propagation in soils, etc., have motivated a great deal of interest on stationary and non-stationary flows between parallel plates. Several authors (Ishgaki, 1971 - Cox, 1991) have determined velocity and temperature profiles of these flows modeled by the Navier-Stokes equations. Despite the large number of works, in some specific cases of lubrication mechanics, such as journal bearings - where the surfaces are porous material and there is a lubricating film between them - exact solutions are hardly found in the literature.

The present work is a generalization of Stokes' second problem studied by Schlichting (1968) and it complements the study of Carrocci (1982).

We present the analysis of a viscous, incompressible flow between two parallel, horizontal plates. The space between them is partially filled with an isotropic non-homogeneous porous media. The upper one oscillates longitudinally while the lower one remains stationary (see Fig. 2.1).

In section 2 we model the problem and section 3 shows the numerical results obtained solving the corresponding equations.

In the fourth section we discuss the results.

2. Mathematical Model

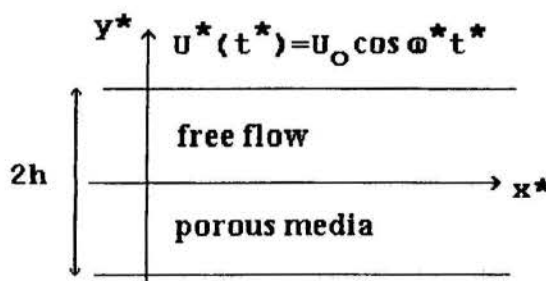


Figure 2.1: Geometrical description of the problem. $U^*(t^*)$ represents the velocity of the upper plate.

Consider a two-dimensional flow of an incompressible fluid between two parallel infinite plates separated by a distance $2h$. The upper plate oscillates longitudinally and the lower one remains stationary, as shown in Fig-

ure 1. Suppose that the flow does not change in the x direction and that there is no pressure gradient acting on the flow. The analysis of the problem must be divided accordingly to the two regions, one in which the fluid flows freely and the other for the flow through the porous media.

Let us denote with 1 and 2 the variables corresponding to the free flow and in the porous media respectively, then let u_j^* be the flow velocities, ν_j the kinematic viscosities and ε the permeability of the porous media. If the upper plate's motion is given by $U^*(t^*) = U_0 \cos \omega^* t^*$ with U_0 and ω^* constants, then the momentum equations are:

$$\text{free flow} \quad \frac{\partial u_1^*}{\partial t^*} = \frac{\partial U^*(t^*)}{\partial t^*} + \nu_1 \frac{\partial^2 u_1^*}{\partial y^{*2}}, \quad (2.1)$$

$$\text{flow in the porous media} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial u_2^*}{\partial t^*} = \frac{\partial U^*(t^*)}{\partial t^*} + \nu_2 \frac{\partial^2 u_2^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\nu_2}{\varepsilon} [U^*(t^*) - u_2^*],$$

subjected to the following boundary conditions

$$u_1^*(h, t^*) = U^*(t^*), \quad u_2^*(-h, t^*) = 0, \\ u_1^*(0, t^*) = u_2^*(0, t^*), \quad \left. \frac{\partial u_1^*}{\partial y^*} \right|_{y^*=0} = \left. \frac{\partial u_2^*}{\partial y^*} \right|_{y^*=0}.$$

Under the same flow hypothesis defined before, considering the heat transfer by convection zero, and denoting by T_j^* the temperatures, κ_j and c_j the thermal conductivities and specific heat constants, the equations for the temperature distributions are:

$$\frac{\partial T_j^*}{\partial t^*} = \kappa_j \frac{\partial^2 T_j^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\nu_j}{c_j} \left(\frac{\partial u_j^*}{\partial y^*} \right)^2, \quad (2.3)$$

with the boundary conditions

$$T_1^*(h, t^*) = T_2^*(-h, t^*) = T_1, \\ T_1^*(0, t^*) = T_2^*(0, t^*), \\ \kappa_1 \left. \frac{\partial T_1^*}{\partial y^*} \right|_{y^*=0} = \kappa_2 \left. \frac{\partial T_2^*}{\partial y^*} \right|_{y^*=0}.$$

Let us define the dimensionless parameters

$$t = t^* \frac{\nu_1}{h^2}, \quad y = \frac{y^*}{h}, \\ \omega = \omega^* \frac{\nu_1}{h^2}, \quad U = \frac{U^*}{U_0}, \\ \alpha_j = \frac{\nu_j}{\nu_1}, \\ \beta_1 = 0, \quad \beta_2 = \frac{\nu_2 h^2}{\nu_1 \varepsilon}, \\ u_j = \frac{u_j^*}{U_0}, \\ \theta_j = \frac{T_j^* - T_0}{T_1 - T_0}, \quad (2.4)$$

then, using (2.4) in (2.1),(2.2) and (2.3) we finally obtain the equations for the velocities and temperature:

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} = \frac{\partial U(t)}{\partial t} + \alpha_j \frac{\partial^2 u_j}{\partial y^2} + \beta_j [U(t) - u_j], \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \theta_j}{\partial t} = \frac{\alpha_j}{Pr_j} \frac{\partial^2 \theta_j}{\partial y^2} + \alpha_j Ec_j \left(\frac{\partial u_j}{\partial y} \right)^2, \quad (2.6)$$

valid for $j = 1, 2$. In (2.6), Pr_j and Ec_j represent the Prandtl and Eckert numbers for the regions.

It can be observed that although the system is nonlinear because equation (2.6) is coupled with (2.5) by the quadratic term, it can be studied with a linear analysis, solving first (2.5) and using the result as a non homogeneity in (2.6).

Equation (2.5) is solved utilizing the method of separation of variables, assuming a general solution of the form

$$u_j(y, t) = \cos \omega t + \cos \omega t \left[c_{1j} \cos \sigma_j y \cosh \sigma_j y \right. \\ \left. + c_{2j} \sin \sigma_j y \cosh \sigma_j y \right. \\ \left. + c_{3j} \cos \sigma_j y \sinh \sigma_j y \right. \\ \left. + c_{4j} \sin \sigma_j y \sinh \sigma_j y \right. \\ \left. + \sin \omega t \left[c_{5j} \cos \sigma_j y \cosh \sigma_j y \right. \right. \\ \left. + c_{6j} \sin \sigma_j y \cosh \sigma_j y \right. \\ \left. + c_{7j} \cos \sigma_j y \sinh \sigma_j y \right. \\ \left. + c_{8j} \sin \sigma_j y \sinh \sigma_j y \right], \quad (2.7)$$

where

$$\sigma_1 = Re(\sqrt{i\omega}), \quad \sigma_2 = Re\left(\sqrt{\frac{\beta + i\omega}{\alpha}}\right),$$

with the following boundary conditions:

$$u_1(1, t) = \cos \omega t, \quad u_2(-1, t) = 0, \\ u_1(0, t) = u_2(0, t), \quad \left. \frac{\partial u_1}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial u_2}{\partial y} \right|_{y=0}.$$

Solving (2.5),(2.6) is reduced to solve a linear algebraic system, for which we used a program written in the symbolic manipulation language Mathematica (Wolfram,1988). We developed the study of the described problem for the cases: a) the two plates have given, constant temperatures. b) the upper plate is adiabatic and the lower one is isothermic and c) the upper plate is isothermic and the lower one adiabatic using the following boundary conditions:

a)

$$\theta_1(1, t) = 1, \quad \theta_2(-1, t) = 0,$$

$$\theta_1(0, t) = \theta_2(0, t), \quad \kappa_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial y} \Big|_{y=0} = \kappa_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial y} \Big|_{y=0}.$$

b)

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial y} \Big|_{y=1} = 0, \quad \theta_2(-1, t) = 0,$$

$$\theta_1(0, t) = \theta_2(0, t), \quad \kappa_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial y} \Big|_{y=0} = \kappa_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial y} \Big|_{y=0}.$$

c)

$$\theta_1(1, t) = 0, \quad \frac{\partial \theta_2}{\partial y} \Big|_{y=-1} = 0,$$

$$\theta_1(0, t) = \theta_2(0, t), \quad \kappa_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial y} \Big|_{y=0} = \kappa_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial y} \Big|_{y=0}.$$

3. Results

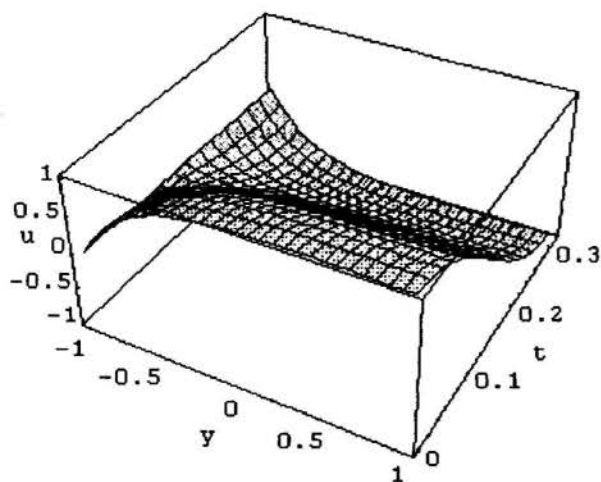


Figure 3.1: Velocity u as function of time and space for $\omega = 10$ and $\varepsilon = 0.1$.

We present in this section the results obtained evaluating numerically the solutions of equations (2.5) and (2.6) yield by the program written in Mathematica commented before.

Figure 3.1 shows the evolution in time of the velocity profiles of case a) with $\omega = 10$ and $\varepsilon = 0.1$. One can observe in it that, due to the oscillation of the upper plate, the plane velocity profiles corresponding to a uniform flow are deformed into a curved surface.

The analysis of the velocity's behavior on a time interval equal to a half-period of oscillation $T/2 = \pi/\omega$,

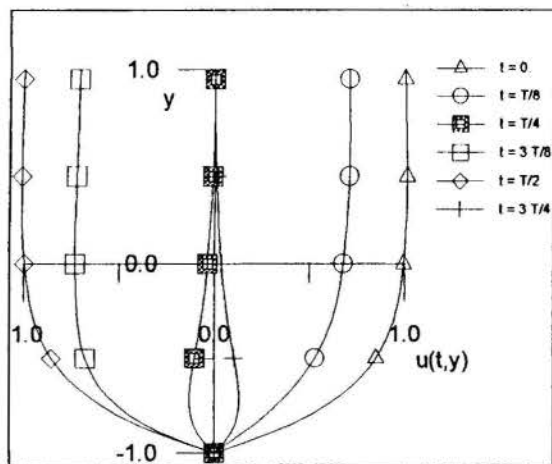


Figure 3.2: Dependence of u on time, with y varying between the plates in case a). The parameters are $\omega = 10$, $\varepsilon = 0.1$.

with $\omega = 10$ is summarized in Figure 3.2. It is shown there that even in the absence of an external pressure gradient, inversion of motion is verified at several instants, for example at $t = T/4$. These inversions are consequences of the viscous forces and the inertia of the fluid.

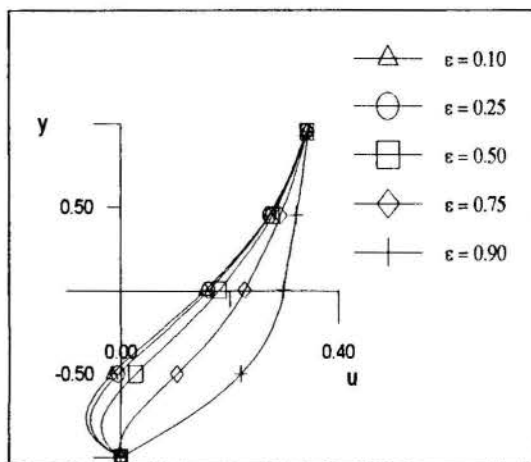


Figure 3.3: Dependence of the velocity u on the permeability ε in the case a) of two isothermic plates.

The dependence of the velocity on the permeability is presented in Figure 3.3, for which we used a frequency $\omega = 5$ and ε varying between 0.1 and 0.9. It can be observed that the inertia forces in the porous media are two orders of magnitude smaller than the viscous forces, verifying Darcy's law (Batchelor, 1967).

We next illustrate the influences of the thermal con-

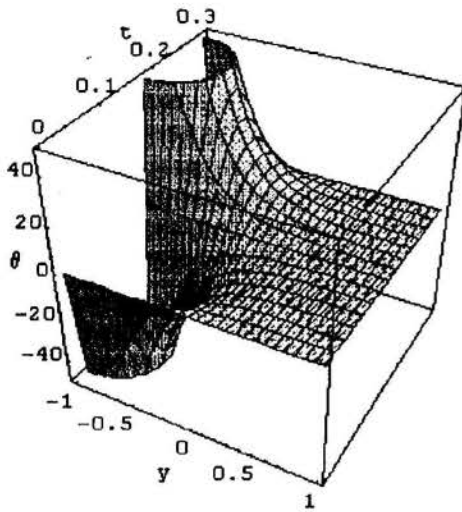


Figure 3.4: Dependence of θ on time in case c) for y varying between the plates. The frequency is $\omega = 10$, $\varepsilon = 0.1$ and $\kappa = 1$.

ductivity and permeability on the temperature profiles for the cases a), b) and c).

Figures 3.4-4.1 show the variations of temperature in the space between the plates as functions of time for the three cases, when the ratio between the thermal conductivity coefficients and the ratio between the Prandtl and Eckert numbers are unity. It can be seen that the profiles are similar, and that large temperature variations in the porous media are due to the fluid motion and to the heat conduction.

The results for the temperature profiles when $\omega = 5$ and $t = 1$, for the cases in which the ratio between the thermal conductivity coefficients of the porous media and the free fluid varies between 10^{-2} and 10^4 and permeabilities equal to 0.1, 0.5 and 0.75 are presented in figures 4.2 and 4.3. It is verified that the maximum temperature of the flow in the porous media, at that instant, decreases with the permeability. It can also be observed that the difference between the thermal conductivity coefficients changes the temperature, producing the separation of the curves at the interface between the two media.

4. Comments and Conclusions

The values between 5 and 20 for the dimensionless frequency were established through numerical experiments, utilizing a program written in Mathematica. The range of permeabilities between 0.1 and 0.5 is of particular interest in Tribology because it better represents real engineering cases and, thus, we choose these

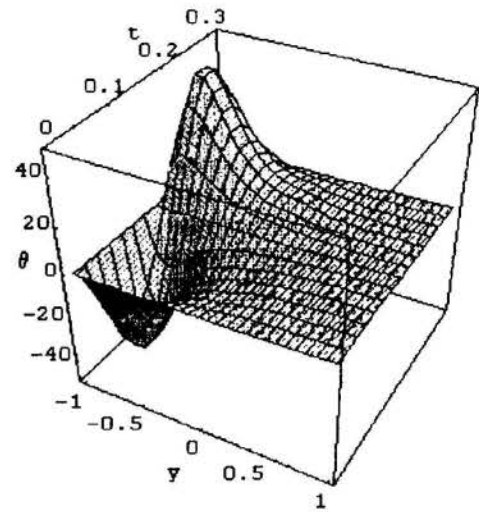


Figure 3.5: Temperature θ as a function of space and time in case a) of two isothermic plates.

values for the analysis in this paper.

We have determined that high permeabilities, besides diminishing the lubricant fluid retention, also diminish the dumping property of the porous media to mechanical shocks in journal bearings.

With respect to heat transfer and because we are dealing with low velocities and low temperatures, we verified that heat conduction is the dominant phenomenon.

For the range of permeabilities considered here one can deduce, observing the deformation of the corresponding profiles, that the flow velocity and the stress increase with the permeability.

The difference of temperatures in the neighborhood of the interface increases with the ratio between the thermal conductivity coefficients. In the porous region, the temperature increases markedly and its maximum value decreases with the permeability.

Using a symbolic manipulation language for this kind of problem yields interesting results from the physical point of view. From the practical point of view, the results are also encouraging because one can obtain fast and very accurate values. For example, the determination of the numerical solutions for the velocity and temperature for this paper were obtained in 50s and 100s respectively.

Acknowledgments

The research for this paper was partially supported by the Brazilian National Research Council - CNPq under Project N^0 520357/94 - 9.

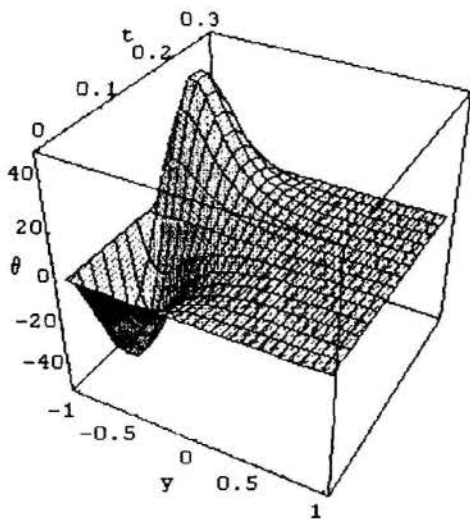


Figure 4.1: Temperature θ as a function of space and time in case b) with $\omega = 10$ and $\varepsilon = 0.1$.

References

[1] H. Ishgaki, (1971), *An Exact Periodic Solution of the Energy Equation*. J. Fluid Mechanics, 50, pp 657 – 668.

[2] V. H. Soundalgekar, H. S. Takhar and M. Singh, (1985), *Unsteady Flow in a Porous Medium Between Two Infinite Parallel Plates in Relative Motion*. J. Fluids Engineering, V 107, pp 534–535.

[3] A. Houpeurt, (1975), *Éléments de Mécanique des Fluides dans les Milieux Poreux*. 2 ed, Paris, Éditions Technip.

[4] K. H. M. A. Philip, (1990), *Similarity Solution of the Two-dimensional Unsteady Boundary-layer Equations*. J. Fluid Mechanics, 216, pp 537 – 559.

[5] L. Borne, (1992), *Harmonic Stokes Flow Through Periodic Porous Media: a 3D Boundary Element Method*. J. Computational Physics, 99, pp 214 – 232.

[6] S. M. Cox, (1991), *Analysis of Steady Flow in a Channel with One Porous Wall, or with Accelerating Walls*. SIAM J. Appl. Math., 51(2) pp 429 – 438.

[7] H. Schlichting, (1968), *Boundary Layer Theory*. 6th ed, McGraw-Hill, New York.

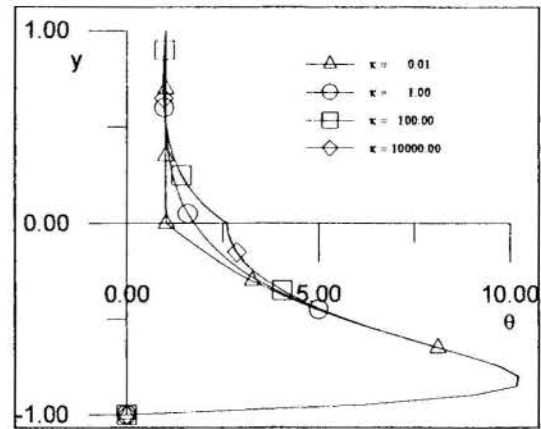


Figure 4.2: Dependence of θ on $\kappa = \frac{\kappa_2}{\kappa_1}$. The permeability is $\varepsilon = 0.1$.

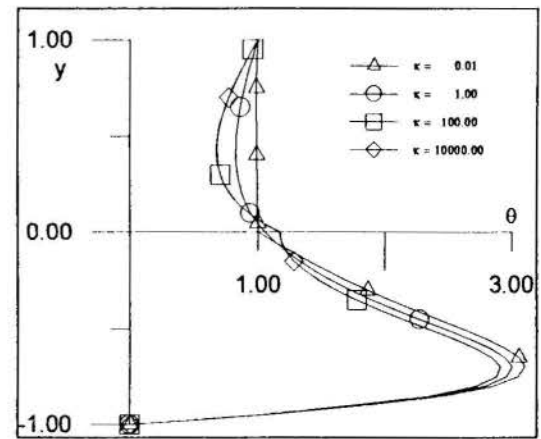


Figure 4.3: Idem as Figure 4.2 with $\varepsilon = 0.5$. It can be observed an almost singular behavior at $y = 0$.

[8] L. R. Carrocci, (1982), *Escoamento de Couette entre Duas Placas Paralelas com Parte do Espaçamento Preenchido com Meio Poroso*. Master's Thesis, UNICAMP.

[9] G. K. Batchelor, (1967), *An Introduction to Fluid Dynamics*. pp 223 – 224, Cambridge University Press, London.

[10] S. Wolfram, (1988), *Mathematica. A system for Doing Mathematics by Computer*. Addison-Wesley Pub. Co., Menlo Park, CA .

ABCm

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE REYNOLDS PARA MANCAIS AXIAIS DE SAPATAS SETORIAIS

Georgette Emile El Mouallem *
Nelson Manzanares Filho *
Vilmar Arthur Schwarz *

* Departamento de Mecânica
Escola Federal de Engenharia de Itajubá
37. 500-000 - Itajubá - MG - Brasil



RESUMO

Apresenta-se um modelo teórico para análise do comportamento operacional de mancais axiais de deslizamento, com base na teoria isotérmica da lubrificação hidrodinâmica. A equação de Reynolds, em coordenadas polares, foi resolvida na sapata setorial, através do método das diferenças finitas. Foram realizadas simulações computacionais numa ampla faixa de relações L/Re , a/b bem como para vários ângulos do setor da sapata. Uma vez determinada a distribuição de pressões na sapata, diversos parâmetros adimensionais de operação e desempenho do mancal foram calculados, tais como: Capacidade de carga, vazões no contorno, centro de pressão, perda de potência e variação da temperatura do lubrificante.

INTRODUÇÃO

Esse estudo possibilita a análise preditiva do comportamento operacional de mancais axiais, figura (1), usando parâmetros adimensionais plotados em tabelas que cobrem uma grande faixa de relações L/Re , a/b e θ_0 .

Num mancal axial ocorre a lubrificação hidrodinâmica regida pela equação de Reynolds, e o obstáculo maior é a dificuldade de se encontrar uma solução analítica para essa equação. Foram propostas várias soluções aproximadas mas todas são muito complexas e os cálculos muito longos. Pinkus (1958), William A. Gross et al. (1980), Jean Frêne (1982) e outros, usaram métodos numéricos para resolvê-la. Nesse trabalho foi aplicado o método das diferenças finitas com algumas modificações e a equação foi usada em coordenadas polares por se adequar melhor à geometria da sapata.

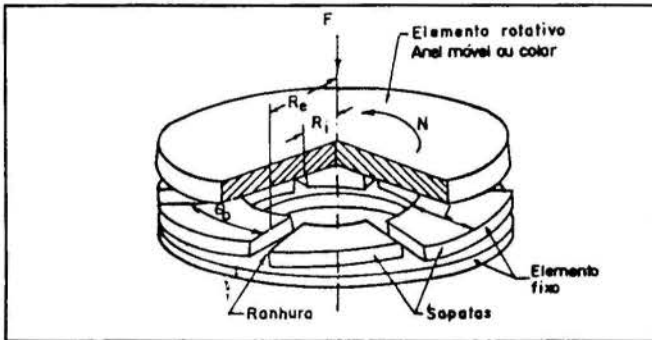


Figura 1 - Esquema de um mancal axial.

MODELO FÍSICO

Seja o escoamento entre duas placas planas inclinadas entre si. A placa inferior ou colar giratório, está animada de um movimento de translação uniforme com velocidade constante, a placa superior é fixa e inclinada de um ângulo α muito pequeno em relação à horizontal. O movimento de rotação do colar aliado à inclinação da sapata e à viscosidade do óleo dão origem à formação da película de óleo que, em forma de cunha, separa totalmente as superfícies, devido à pressão criada pelo movimento relativo do mecanismo.

No dimensionamento de um mancal, o projetista fixa previamente os chamados 'parâmetros independentes', que são:

- Dimensões da sapata setorial; diâmetros externo, R_e e interno, R_i e ângulo do setor, θ_0 .
- Velocidade da placa móvel, N .
- Espessura mínima do filme de fluido, a , e desnível da sapata, b .
- Força axial atuante no mancal, F

A análise preditiva do comportamento operacional de um mancal axial pode ser feita através dos parâmetros ditos 'dependentes' ou 'resultantes'.

- Fator de carga axial (adimensional), T
- Perda de potência (adimensional), H_0
- Centro de pressão (adimensional), θ_P e R_P
- Vazão de lubrificante (adimensional), nas laterais q_{li} , q_{re} , na entrada q_{oe} e na saída q_{os}
- Viscosidade do óleo lubrificante, η
- Coeficiente de fricção (adimensional), σ
- Elevação da temperatura, Δt

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

As condições de escoamento são para um fluido incompressível, em regime isotérmico, e com certas restrições apresentadas a seguir:

1. O meio é contínuo.
2. O fluido é newtoniano.
3. O escoamento é laminar.
4. Não há deslizamento entre o fluido e a superfície de contato.
5. As forças de campo no fluido são desprezadas.
6. A viscosidade do fluido é constante ao longo do filme.
7. A densidade ou massa volumétrica do fluido é constante.
8. A espessura do filme é muito pequena em relação à largura e o comprimento das superfícies em contato. A relação entre essas grandezas deve ser da ordem de 10^{-3} . Essa hipótese é fundamental, senão a equação de Reynolds não se aplica.

Na equação de Reynolds a espessura do filme é medida na direção de y e as condições no contorno são:

- Na superfície 1, para $y = 0 \Rightarrow u = u_1 ; v = 0 ; w = w_1$
- Na superfície 2, para $y = h \Rightarrow u = u_2 ; v = v_2 ; w = w_2$

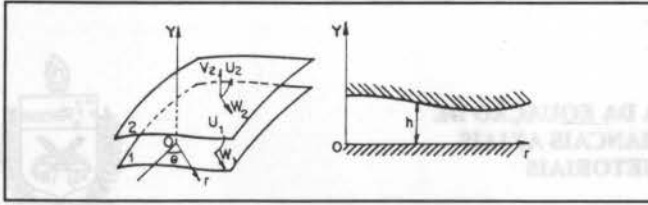


Figura 2 - Sistema de eixos.

Considerando que a superfície superior na figura 2 seja fixa: $v_2 = u_2 = w_2 = 0$, $u_1 = u$ e $w_1 = 0$, A equação de Reynolds é:

$$\frac{\partial}{\partial r_0} \left(r_0 h_0^3 \frac{\partial P_0}{\partial r_0} \right) + \frac{1}{r_0} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(h_0^3 \frac{\partial P_0}{\partial \theta} \right) = 6 \eta U \frac{\partial h_0}{\partial \theta} \quad (1)$$

Em seqüência, para transformar a Eq. (1) para a forma adimensional, foram usadas as seguintes equações:

$$r = \frac{r_0}{R_e} ; \quad h = \frac{h_0}{b} ; \quad P = \frac{P_0}{\eta N} \left(\frac{b}{L} \right)^2 \quad (2)$$

$$U = 2 \pi r_0 N = 2 \pi r R_e N$$

Substituindo as Eq. (2) em (1) e simplificando, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r h^3 \frac{\partial P}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(h^3 \frac{\partial P}{\partial \theta} \right) = 12 \pi r \left(\frac{R}{L} \right)^2 \frac{\partial h}{\partial \theta} \quad (3)$$

METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Distribuição de Pressão A relação (3) é a 'equação de Reynolds' na forma adimensional e o objetivo é integrá-la numericamente através do método das diferenças finitas para obter o valor das pressões nos pontos nodais. As pressões no contorno do domínio de integração são nulas.

$$P_{i,j} = A1_{i,j} \cdot P_{i,j+1} + A2_{i,j} \cdot P_{i,j-1} + A3_{i,j} \cdot P_{i+1,j} + A4_{i,j} \cdot P_{i-1,j} + A5_{i,j} \quad (4)$$

A1 a A5 são chamados 'Coeficientes da Equação de Diferenças Finitas' e são dados pelas equações a seguir:

$$\text{denom}_{i,j} = \frac{\left(\frac{r_{j+1} + r_j}{2} \right) h_i^3}{\Delta r^2} + \frac{\left(\frac{r_{j-1} + r_j}{2} \right) h_i^3}{\Delta r^2} + \frac{\left(\frac{h_i + h_{i+1}}{2} \right)^3}{r_j \Delta \theta^2} + \frac{\left(\frac{h_i + h_{i-1}}{2} \right)^3}{r_j \Delta \theta^2}$$

$$A1_{i,j} = \frac{\left(\frac{r_{j+1} + r_j}{2} \right) h_i^3}{\Delta r^2 \text{denom}_{i,j}} \quad A2_{i,j} = \frac{\left(\frac{r_{j-1} + r_j}{2} \right) h_i^3}{\Delta r^2 \text{denom}_{i,j}}$$

$$A3_{i,j} = \frac{\left(\frac{h_i + h_{i+1}}{2} \right)^3}{r_j \Delta \theta^2 \text{denom}_{i,j}} \quad A4_{i,j} = \frac{\left(\frac{h_i + h_{i-1}}{2} \right)^3}{r_j \Delta \theta^2 \text{denom}_{i,j}}$$

$$A5_{i,j} = \frac{6 \pi r_j (h_{i-1} - h_{i+1})}{\Delta \theta \text{denom}_{i,j}} \left(\frac{R_e}{L} \right)^2 \quad (5)$$

Nas equações acima h representa a espessura adimensional do filme de fluido, cuja fórmula é:

$$h = \frac{h_0}{b} = \frac{a+b}{b} \frac{\theta}{\theta_0} \quad (6)$$

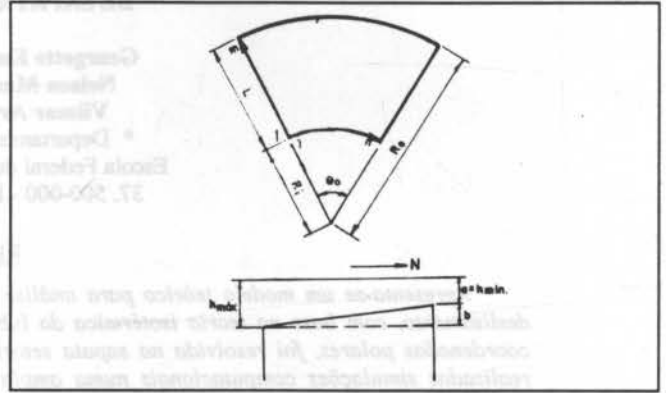


Figura 3 - Domínio de integração

Para se resolver o sistema de equações, usou-se o método iterativo de Gauss-Seidel, com fator de sobre-relaxação ótimo λ_0 e a Eq (4) se escreve:

$$P_{n,i,j} = P_{i,j} + \lambda_0 (A1_{i,j} \cdot P_{i,j+1} + A2_{i,j} \cdot P_{i,j-1} + \lambda_0 (A3_{i,j} \cdot P_{i+1,j} + A4_{i,j} \cdot P_{i-1,j} + A5_{i,j})) \quad (7)$$

onde:

$$\lambda_0 = \frac{2 \left[1 - (1 - \lambda)^{\frac{1}{2}} \right]}{\lambda} \quad (8)$$

O fator λ é calculado para cada caso no programa e é dado por:

$$\lambda = \frac{\left[\cos\left(\frac{\pi}{n}\right) + \left(\frac{\Delta \theta}{\Delta r}\right)^2 \cos\left(\frac{\pi}{m}\right) \right]^2}{1 + \left(\frac{\Delta \theta}{\Delta r}\right)^2} \quad (9)$$

Estabelecendo-se que $P_{i,j} = P_{n,i,j} = 0$, calculam-se então melhores aproximações sucessivas para as pressões dentro do domínio. Este processo pára quando o erro for menor que 0,0001.

$$\text{erro} = \frac{|P_{n,i,j} - P_{i,j}|}{|P_{n,i,j}|} \quad (10)$$

Após estudo minucioso, concluiu-se que o número ideal das divisões da malha deve ser de 250 x 250.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os picos de pressão, na linha circunferencial média da sapata, ocorrem numa posição circunferencial, próxima à saída do óleo; essa tendência é cada vez mais significativa à medida que aumenta a inclinação das sapatas, isto é, à medida que diminui a relação a/b. Os picos de pressão, na linha média da sapata, ocorrem aproximadamente no centro dessa linha.

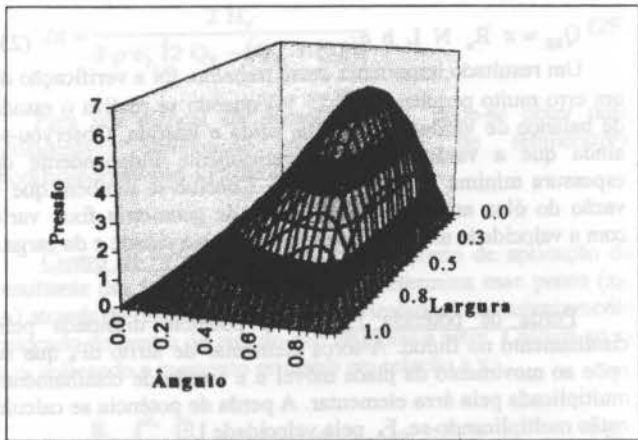


Figura 4 - Distribuição da pressão adimensional na sapata

Capacidade de carga F A capacidade de carga é dada por:

$$F = \int_{r_1}^1 \int_0^{\theta_0} \frac{P \eta N L^2 r R_e^2}{b^2} d\theta dr \quad (11)$$

A Eq.(11) se calcula numericamente usando o método de integração de Simpson.

$$F = \eta N \frac{L^2}{b^2} R_e^2 \left(\Delta r \Delta \theta \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n P_{(i,j)} r_{(i)} \right) \quad (12)$$

A capacidade de carga cresce de maneira muito acentuada com o acréscimo da relação a/b, podendo aumentar até 17 vezes quando a/b varia de 0,2 a 1,0. Análogamente, maiores relações L/Re aumentam a capacidade de carga. Essa tendência é mais significativa para menores valores do ângulo θ_0 do setor.

A título de validação do código computacional, conforme mostrado por Mouallem (1996), diferenças geralmente menores que 9% foram detectadas entre as soluções numéricas do presente trabalho e soluções analíticas encontradas em Gross et al. (1980) e outros.

Fator de carga T A parte entre parênteses na Eq. (12) é a carga adimensional Fv em função da qual se estabelece o fator de carga adimensional T dado por:

$$T = \frac{\eta N (\frac{L}{b})^2}{P} = \frac{\theta_0}{2} \left[1 - \left(1 - \frac{L}{R_e} \right)^2 \right] \frac{1}{Fv} \quad (13)$$

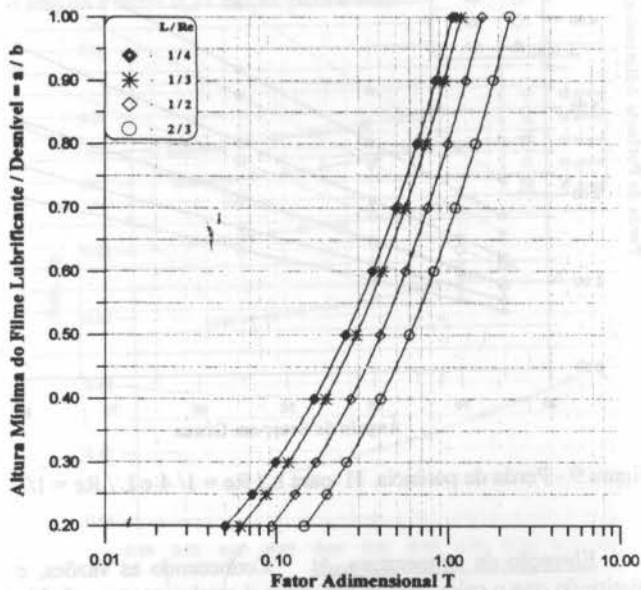


figura 5 - Fator de carga adimensional T, para $\theta_0 = 55^\circ$

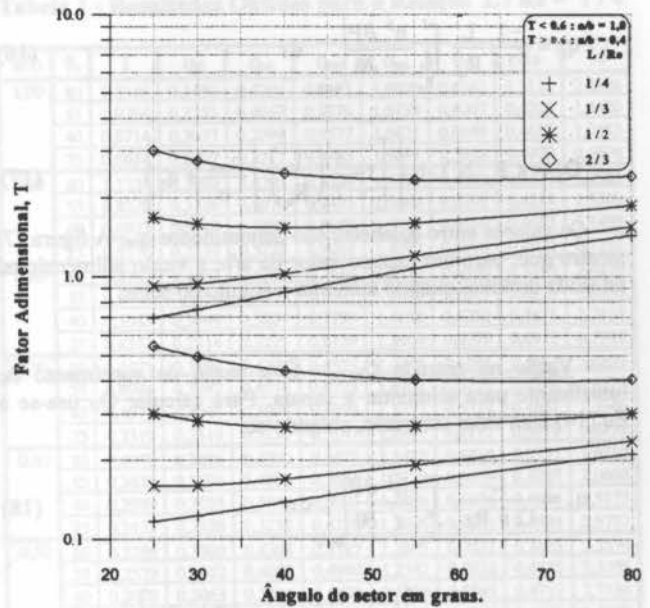


Figura 6 - Fator de carga adimensional versus o ângulo do setor.

Vazão do lubrificante A vazão na sapata se compõe de duas componentes, uma devida ao cisalhamento e outra ao gradiente de pressão.

$$Q = \int \left(\frac{U h_0}{2} - \frac{h_0^3}{12 r_0 \eta} \frac{\partial P_0}{\partial \theta} \right) dr_0 \quad (14)$$

Os gradientes de pressão foram calculados supondo que o campo de pressão no contorno é uma função de segundo grau na direção ortogonal a esse contorno. Expressando arbitrariamente os componentes da vazão em termos da velocidade N, da largura da sapata L, do desnível b, do raio externo Re, e de um valor adimensional q, tem-se:

$$Q = q \pi R_e N L b \quad (15)$$

Vazão na saída Qs Usando as Eq. (14) e Eq. (15), tem-se:

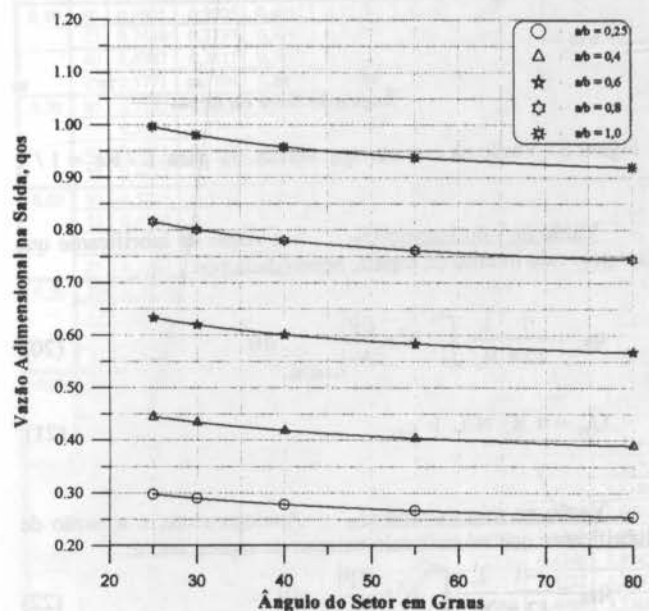


Figura 7 - Vazão na saída q_{os} versus θ_0 para $L/Re = 1/4$

$$q_s = \frac{-1}{12\pi R_c} \frac{L}{R_c} \int_{R_i}^{R_e} \frac{h^3}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_s} dr \quad (16)$$

$$Q_s = \pi R_c N L b \left\{ \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{L}{R_c} \right) \right] \frac{h_{\min}}{b} + q_s \right\} \quad (17)$$

Os valores entre colchetes são denominados q_{os} . A figura (7) mostra que, para um mesmo valor de a/b , a vazão adimensional na saída diminui quando aumenta o ângulo do setor.

Vazão na entrada Q_E É a vazão de suprimento de lubrificante para alimentar a sapata. Para calcular Q_E usa-se a Eq.(14) com sinal contrário, obtendo-se:

$$q_E = \frac{L}{12\pi Re} \int_{R_i}^{R_e} \frac{h^3}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} \Big|_{\theta=0} dr \quad (18)$$

$$Q_E = \pi Re N L b \left[\left(-1 + \frac{L}{2Re} \right) \left(1 + \frac{a}{b} \right) + q_E \right] \quad (19)$$

Os valores entre colchetes estão indicados por q_{oe} nas tabelas

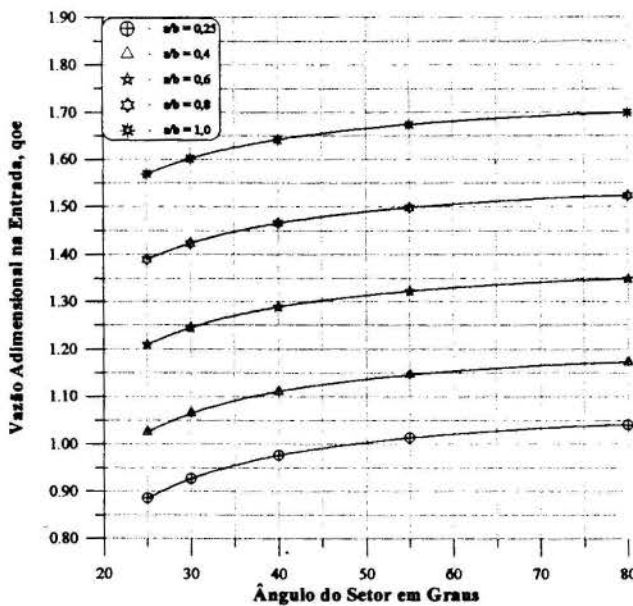


Figura 8 - Vazão na entrada q_{os} versus θ_0 para $L/Re = 1/4$

Vazão no raio interno Q_{Ri} É a vazão de lubrificante que sai pelo raio interno da sapata, sendo dada por:

$$q_{Ri} = \frac{1}{12\pi R_c} \frac{L}{R_c} \int_0^{\theta_s} h^3 r \frac{\partial P}{\partial r} \Big|_{r=R_i/R_c} d\theta \quad (20)$$

$$Q_{Ri} = \pi R_c N L b q_{Ri} \quad (21)$$

Vazão no raio externo Q_{Re} Analogamente, é a vazão de lubrificante que sai pelo raio externo da sapata, isto é:

$$q_{Re} = \frac{-1}{12\pi R_c} \frac{L}{R_c} \int_0^{\theta_s} h^3 r \frac{\partial P}{\partial r} \Big|_{r=R_e} d\theta \quad (22)$$

$$Q_{Re} = \pi R_c N L b q_{Re} \quad (23)$$

Um resultado importante desse trabalho, foi a verificação de um erro muito pequeno, ($\leq 0,15\%$) quando se realiza o estudo de balanço de vazões de entrada, saída e laterais. Observou-se ainda que a vazão lateral é praticamente independente da espessura mínima do filme de óleo. Conclui-se também que a vazão do óleo através de um mancal de geometria fixa, varia com a velocidade mas é independente da viscosidade e da carga.

Perda de potência H_0 É a potência dissipada pelo cisalhamento no fluido. A força elementar de atrito dF_a que se opõe ao movimento da placa móvel é a tensão de cisalhamento multiplicada pela área elementar. A perda de potência se calcula então multiplicando-se F_a pela velocidade U :

$$dH_0 = U dF_a = \eta U \frac{\partial U}{\partial y} dA \quad (24)$$

$$H_0 = 2\pi N \eta \int_{R_i}^{R_e} \int_0^{\theta_0} \left(\frac{2\pi r_0^3 N}{h_0} + \frac{r_0 h_0}{2\eta} \frac{\partial P_0}{\partial \theta} \right) dr_0 d\theta \quad (25)$$

$$H_0 = \frac{\pi \eta N^2 R_c^4}{b} \left\{ \pi \theta_0 L_n \left(1 + \frac{b}{a} \right) \left[1 - \left(1 - \frac{L}{R_c} \right)^4 \right] + \sigma \left(\frac{L}{R_c} \right)^2 \right\} \quad (26)$$

Na Eq.(26), H_0 é 'a perda de potência dimensional', e os valores entre chaves representam H , que é chamado 'Coeficiente de perda de potência adimensional', e σ é o 'Coeficiente de fricção adimensional', definidos a seguir:

$$\sigma = \Delta r \Delta \theta \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n r_j h_i \frac{\partial P}{\partial \theta} \quad (27)$$

$$H_0 = H \frac{\pi \eta N^2 R_c^4}{b} \quad (28)$$

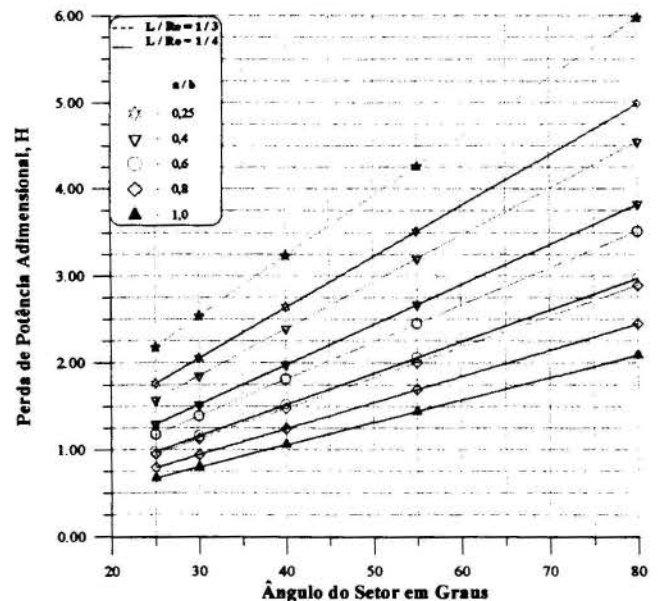


Figura 9 - Perda de potência H para $L/Re = 1/4$ e $L/Re = 1/3$

Elevação da temperatura, Δt Conhecendo as vazões, e admitindo que o calor gerado por atrito é totalmente transferido para o lubrificante, e através da equação de balanço de energia obtém-se:

$$\Delta t = \frac{2 H_0}{J \rho c_p [2 Q_E - (Q_{R_0} + Q_{R_i})]} \quad (29)$$

Para um mancal de geometria fixa, pode-se obter uma considerável diminuição do aumento de temperatura modificando apenas a razão a/b.

Centro de Pressão, θ_p e R_p É o ponto de aplicação da resultante das forças. Inicialmente se determina esse ponto (x_p , y_p) através de um sistema de eixos cartesianos convenientemente colocado no centro do círculo que originou o setor. Calcula-se x_p e y_p aplicando o momento primeiro em relação a x:

$$x_p = \frac{R_o}{F_v} \int_0^{\theta_0} \int_{R_i}^{R_o} P_{i,j} r_j^2 \cos \theta_i \, dr \, d\theta \quad (30)$$

$$x_p = \frac{R_o}{F_v} \Delta r \Delta \theta \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j} r_j^2 \cos \theta_i \quad (31)$$

Posteriormente, aplicando-se o momento em relação ao eixo y obtém-se:

$$y_p = \frac{R_o}{F_v} \int_0^{\theta_0} \int_{R_i}^{R_o} P_{i,j} r_j^2 \sin \theta_i \, dr \, d\theta \quad (32)$$

$$y_p = \frac{R_o}{F_v} \Delta r \Delta \theta \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j} r_j^2 \sin \theta_i \quad (33)$$

Por meio de uma mudança de coordenadas tem-se:

$$R_{op} = \sqrt{x_p^2 + y_p^2} \quad ; \quad \theta_{op} = \arctg \frac{y_p}{x_p} \quad (34)$$

Para situar melhor a posição desse ponto, adotou-se a seguinte adimensionalização, possibilitando que R_p e θ_p sejam relativos a um setor cujas dimensões (largura e ângulo) variam de 0 a 1.

$$R_p = \frac{R_{op} - R_i}{R_o - R_i} \quad ; \quad \theta_p = \frac{\theta_{op}}{\theta_0} \quad (35)$$

Os valores obtidos nas tabelas variam entre 0,57 e 0,77 para o ângulo e entre 0,31 e 0,61 para o raio.

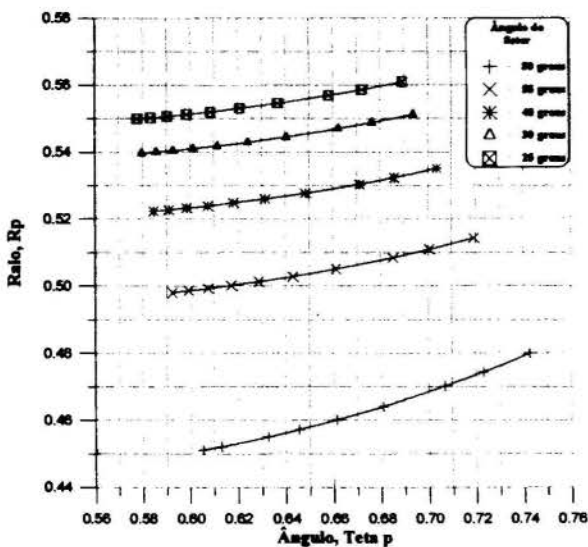


Figura 10 - Localização do centro de pressão, L/Re = 1/2.

Tabela 1 - Resultados Obtidos para a Relação L / Re = 1 / 4

a/b	θ_0	T	Q_{ri}	Q_{re}	Q_{os}	Q_{oe}	θ_p	R_p	H
1,00	80	1,4346	0,3489	0,4292	0,9195	1,6990	0,6342	0,3112	2,0884
	55	1,0764	0,3283	0,4067	0,9376	1,6739	0,6207	0,4204	1,4420
	40	0,8714	0,3037	0,3798	0,9577	1,6421	0,6089	0,4657	1,0553
	25	0,6984	0,2507	0,3217	0,9965	1,5691	0,5928	0,4970	0,6694
0,90	80	1,1334	0,3490	0,4293	0,8316	1,6113	0,6439	0,3149	2,2531
	55	0,8528	0,3286	0,4070	0,8493	1,5860	0,6295	0,4218	1,5569
	40	0,6923	0,3040	0,3801	0,8689	1,5539	0,6169	0,4663	1,1405
	25	0,5570	0,2510	0,3220	0,9064	1,4797	0,5998	0,4972	0,7251
0,80	80	0,8752	0,3492	0,4295	0,7436	1,5237	0,6550	0,3195	2,4479
	55	0,6609	0,3288	0,4072	0,7609	1,4982	0,6397	0,4236	1,6930
	40	0,5383	0,3044	0,3804	0,7799	1,4656	0,6262	0,4671	1,2418
	25	0,4353	0,2514	0,3225	0,8159	1,3900	0,6079	0,4975	0,7918
0,70	80	0,6571	0,3494	0,4297	0,6555	1,4360	0,6681	0,3253	2,6823
	55	0,4984	0,3292	0,4076	0,6723	1,4102	0,6516	0,4258	1,8574
	40	0,4078	0,3048	0,3809	0,6906	1,3772	0,6372	0,4681	1,3646
	25	0,3319	0,2519	0,3230	0,7247	1,2999	0,6175	0,4979	0,8733
0,60	80	0,4758	0,3496	0,4300	0,5673	1,3483	0,6835	0,3327	2,9710
	55	0,3632	0,3296	0,4081	0,5834	1,3222	0,6659	0,4287	2,0608
	40	0,2989	0,3055	0,3816	0,6007	1,2886	0,6504	0,4694	1,5173
	25	0,2453	0,2526	0,3238	0,6328	1,2094	0,6291	0,4984	0,9757
0,50	80	0,3286	0,3500	0,4304	0,4787	1,2605	0,7021	0,3423	3,3376
	55	0,2529	0,3302	0,4087	0,4940	1,2342	0,6832	0,4325	2,3,95
	40	0,2098	0,3063	0,3825	0,5103	1,1999	0,6665	0,4712	1,7138
	25	0,1743	0,2535	0,3248	0,5397	1,1182	0,6434	0,4991	1,1092
0,40	80	0,2123	0,3505	0,4309	0,3898	1,1727	0,7251	0,3552	3,8236
	55	0,1654	0,3311	0,4097	0,4040	1,1460	0,7048	0,4377	2,6677
	40	0,1388	0,3075	0,3837	0,4188	1,1109	0,6867	0,4736	1,9790
	25	0,1173	0,2548	0,3262	0,4449	1,0262	0,6615	0,5002	1,2924
0,30	80	0,1240	0,3515	0,4318	0,3002	1,0849	0,7542	0,3731	4,5117
	55	0,0986	0,3325	0,4111	0,3129	1,0577	0,7325	0,4450	3,1658
	40	0,0842	0,3094	0,3857	0,3257	1,0215	0,7129	0,4771	2,3647
	25	0,0730	0,2566	0,3283	0,3476	0,9329	0,6855	0,5018	1,5645
0,25	80	0,0896	0,3521	0,4325	0,2550	1,0410	0,7720	0,3847	4,9850
	55	0,0722	0,3335	0,4122	0,2666	1,0135	0,7496	0,4499	3,5131
	40	0,0625	0,3107	0,3870	0,2782	0,9766	0,7294	0,4796	2,6372
	25	0,0552	0,2580	0,3298	0,2975	0,8857	0,7007	0,5029	1,7603

Tabela 2 - Resultados Obtidos para a Relação L / Re = 1 / 3

a/b	θ_0	T	Q_{ri}	Q_{re}	Q_{os}	Q_{oe}	θ_p	R_p	H
1,00	80	1,5484	0,3000	0,4047	0,8910	1,5969	0,6233	0,3787	2,4604
	55	1,2069	0,2731	0,3741	0,9134	1,5615	0,6087	0,4546	1,7036
	40	1,0273	0,2410	0,3379	0,9376	1,5171	0,5974	0,4869	1,2505
	25	0,9207	0,1789	0,2669	0,9803	1,4263	0,5844	0,5120	0,7964
0,90	80	1,2264	0,3003	0,4049	0,8070	1,5133	0,6323	0,3809	2,6561
	55	0,9589	0,2734	0,3744	0,8289	1,4775	0,6168	0,4554	1,8412
	40	0,8184	0,2413	0,3382	0,8523	1,4323	0,6046	0,4873	1,3535
	25	0,7361	0,1791	0,2671	0,8932	1,3398	0,5908	0,5122	0,8644
0,80	80	0,9501	0,3005	0,4051	0,7229	1,4296	0,6426	0,3837	2,8880
	55	0,7458	0,2737	0,3748	0,7440	1,3933	0,6261	0,4564	2,0048
	40	0,6387	0,2417	0,3387	0,7665	1,3474	0,6131	0,4878	1,4764
	25	0,5771	0,1794	0,2675	0,8055	1,2527	0,5982	0,5125	0,9462
0,70	80	0,7162	0,3008	0,4055	0,6385	1,3459	0,6548	0,3871	3,1677
	55	0,5651	0,2741	0,3753	0,6589	1,3091	0,6371	0,4578	2,2031
	40	0,4861	0,2421	0,3392	0,6803	1,2622	0,6231	0,4885	1,6263
	25	0,4417	0,1797	0,2679	0,7170	1,1650	0,6071	0,5129	1,0468
0,60	80	0,5215	0,3012	0,4059	0,5539	1,2621	0,6692	0,3915	3,5135
	55	0,4143	0,2747	0,3759	0,5733	1,2247	0,6502	0,4595	2,4498
	40	0,3585	0,2428	0,3399	0,5934	1,1766	0,6352	0,4894	1,8139
	25	0,3283	0,1802	0,2685	0,6274	1,0765	0,6178	0,5134	1,1742
0,50	80	0,3629	0,3017	0,4065	0,4689	1,1783	0,6868	0,3974	3,9548
	55	0,2910	0,2755	0,3768	0,4870	1,1401	0,6663	0,4619	2,7671
	40	0,2538	0,2437	0,3409	0,5055	1,0906	0,6500	0,4906	2,0573
	25	0,2348	0,1808	0,2693	0,5364	0,9868	0,6311	0,5142	1,3416
0,40	80	0,2370	0,3026	0,4074	0,3833	1,0944	0,7085	0,4053	4,5440
	55	0,1927	0,2767	0,3780	0,3998	1,0552	0,6864	0,4651	3,1956
	40	0,1700	0,2449	0,3423	0,4163	1,0040	0,6687	0,4923	2,3897
	25	0,1597	0,1817	0,2705	0,4432	0,8957	0,6480	0,5152	1,5740
0,30	80	0,1409	0,3038	0,4087	0,2967	1,0103	0,7364	0,4166	5,3875
	55	0,1170	0,2784	0,3799	0,3110	0,9700	0,7126	0,4699	3,8186
	40	0,1051	0,2468	0,3444	0,3249	0,9166	0,6934	0,4950	2,8801
	25	0,1009	0,1829	0,2722	0,3469	0,8023	0,6706	0,5169	1,9231
0,25	80	0,1031	0,3047	0,4097	0,2527	0,9683	0,7536	0,4240	5,9742
	55	0,0869	0,2797	0,3813	0,2656	0,9272	0,7291	0,4732	4,2587
	40	0,0790	0,2481	0,3459	0,2779	0,8724	0,7091	0,4969	3,2308
	25	0,0771	0,1838	0,2733	0,2970	0,7545	0,6851	0,5182	2,1764

Tabela 3 - Resultados Obtidos para a Relação L/Re = 1/2

a/b	θ_0	T	q_{in}	q_{re}	q_{os}	q_{oe}	θ_p	R_p	H
1.00	80	1,8654	0,2037	0,3530	0,8313	1,3886	0,6052	0,4511	2,9017
	55	1,6067	0,1665	0,3071	0,8859	1,3332	0,5925	0,4981	2,0189
	40	1,5385	0,1291	0,2594	0,8859	1,2747	0,5846	0,5224	1,4869
	25	1,6827	0,0781	0,1872	0,9226	1,1883	0,5775	0,5500	0,9471
0.90	80	1,4839	0,2039	0,3533	0,7549	1,3127	0,6130	0,4521	3,1372
	55	1,2820	0,1667	0,3074	0,7819	1,2563	0,5994	0,4987	2,1868
	40	1,2303	0,1292	0,2597	0,8074	1,1965	0,5910	0,5228	1,6136
	25	1,3488	0,0781	0,1874	0,8424	1,1083	0,5834	0,5503	1,0305
0.80	80	1,1559	0,2042	0,3537	0,6782	1,2367	0,6221	0,4534	3,4176
	55	1,0025	0,1670	0,3078	0,7041	1,1791	0,6075	0,4993	2,3876
	40	0,9647	0,1294	0,2600	0,7282	1,1179	0,5985	0,5233	1,7658
	25	1,0607	0,0782	0,1876	0,7613	1,0275	0,5903	0,5507	1,1314
0.70	80	0,8775	0,2047	0,3542	0,6012	1,1606	0,6327	0,4550	3,7579
	55	0,7648	0,1674	0,3083	0,6256	1,1015	0,6171	0,5002	2,6331
	40	0,7387	0,1297	0,2604	0,6483	1,0387	0,6074	0,5239	1,9530
	25	0,8152	0,0783	0,1879	0,6792	0,9458	0,5986	0,5513	1,2565
0.60	80	0,6450	0,2052	0,3548	0,5236	1,0842	0,6456	0,4572	4,1818
	55	0,5659	0,1678	0,3089	0,5465	1,0235	0,6287	0,5013	2,9413
	40	0,5491	0,1300	0,2610	0,5674	0,9587	0,6182	0,5248	2,1897
	25	0,6090	0,0784	0,1882	0,5957	0,8627	0,6085	0,5520	1,4161
0.50	80	0,4546	0,2060	0,3557	0,4454	1,0075	0,6613	0,4601	4,7284
	55	0,4024	0,1685	0,3098	0,4663	0,9448	0,6430	0,5028	3,3427
	40	0,3930	0,1304	0,2617	0,4851	0,8776	0,6315	0,5260	2,5006
	25	0,4389	0,0786	0,1887	0,5104	0,7780	0,6209	0,5531	1,6278
0.40	80	0,3025	0,2070	0,3569	0,3661	0,9305	0,6810	0,4641	5,4682
	55	0,2713	0,1694	0,3111	0,3845	0,8653	0,6611	0,5051	3,8930
	40	0,2674	0,1310	0,2628	0,4009	0,7950	0,6485	0,5277	2,9313
	25	0,3015	0,0788	0,1894	0,4225	0,6910	0,6368	0,5546	1,9244
0.30	80	0,1851	0,2085	0,3588	0,2852	0,8530	0,7068	0,4702	6,5476
	55	0,1692	0,1708	0,3130	0,3005	0,7845	0,6852	0,5085	4,7090
	40	0,1691	0,1319	0,2643	0,3138	0,7103	0,6713	0,5304	3,5772
	25	0,1935	0,0792	0,1904	0,3309	0,6007	0,6582	0,5569	2,3747
0.25	80	0,1382	0,2096	0,3601	0,2438	0,8140	0,7231	0,4744	7,3120
	55	0,1281	0,1717	0,3143	0,2572	0,7435	0,7005	0,5110	5,2946
	40	0,1293	0,1325	0,2654	0,2686	0,6669	0,6859	0,5324	4,0448
	25	0,1494	0,0794	0,1911	0,2831	0,5540	0,6721	0,5586	2,7033

Tabela 4 - Resultados Obtidos para a Relação L/Re = 2/3

a/b	θ_0	T	q_{in}	q_{re}	q_{os}	q_{oe}	θ_0	R_p	H
1.00	80	2,4054	0,1118	0,2986	0,7668	1,1774	0,5937	0,5005	3,0863
	55	2,3301	0,0767	0,2457	0,7939	1,1166	0,5850	0,5412	2,1504
	40	2,4687	0,0512	0,2001	0,8152	1,0667	0,5803	0,5685	1,5824
	25	3,0151	0,0269	0,1410	0,8397	1,0081	0,5759	0,6044	1,0046
0.90	80	1,9196	0,1119	0,2989	0,6978	1,1089	0,6008	0,5012	3,3417
	55	1,8638	0,0768	0,2460	0,7238	1,0468	0,5915	0,5418	2,3329
	40	1,9776	0,0512	0,2003	0,7441	0,9958	0,5864	0,5689	1,7196
	25	2,4188	0,0269	0,1411	0,7675	0,9359	0,5817	0,6048	1,0941
0.80	80	1,5013	0,1121	0,2992	0,6285	1,0401	0,6090	0,5022	3,6468
	55	1,4620	0,0769	0,2463	0,6531	0,9765	0,5990	0,5424	2,5522
	40	1,5541	0,0513	0,2005	0,6723	0,9242	0,5935	0,5696	1,8851
	25	1,9043	0,0269	0,1412	0,6944	0,8630	0,5884	0,6054	1,2026
0.70	80	1,1456	0,1124	0,2997	0,5586	0,9709	0,6188	0,5034	4,0192
	55	1,1199	0,0770	0,2466	0,5817	0,9055	0,6080	0,5434	2,8215
	40	1,1933	0,0513	0,2008	0,5995	0,8519	0,6020	0,5704	2,0894
	25	1,4656	0,0269	0,1414	0,6201	0,7889	0,5965	0,6060	1,3374
0.60	80	0,8479	0,1127	0,3003	0,4879	0,9012	0,6305	0,5050	4,4859
	55	0,8330	0,0772	0,2471	0,5092	0,8338	0,6188	0,5446	3,1616
	40	0,8904	0,0514	0,2012	0,5256	0,7784	0,6123	0,5714	2,3490
	25	1,0969	0,0270	0,1417	0,5444	0,7135	0,6063	0,6069	1,5098
0.50	80	0,6032	0,1132	0,3011	0,4164	0,8309	0,6450	0,5073	5,0923
	55	0,5967	0,0774	0,2478	0,4355	0,7610	0,6323	0,5462	3,6076
	40	0,6405	0,0515	0,2017	0,4501	0,7035	0,6251	0,5729	2,6918
	25	0,7923	0,0270	0,1420	0,4668	0,6363	0,6185	0,6081	1,7392
0.40	80	0,4067	0,1138	0,3022	0,3434	0,7597	0,6634	0,5105	5,9210
	55	0,4063	0,0777	0,2487	0,3600	0,6866	0,6495	0,5487	4,2240
	40	0,4389	0,0516	0,2024	0,3724	0,6267	0,6416	0,5751	3,1692
	25	0,5461	0,0271	0,1425	0,3867	0,5567	0,6341	0,6099	2,0616
0.30	80	0,2538	0,1148	0,3039	0,2683	0,6873	0,6878	0,5155	7,1441
	55	0,2573	0,0782	0,2501	0,2817	0,6102	0,6724	0,5525	5,1458
	40	0,2805	0,0518	0,2035	0,2916	0,5471	0,6636	0,5784	3,8893
	25	0,3522	0,0271	0,1432	0,3028	0,4736	0,6552	0,6126	2,5523
0.25	80	0,1922	0,1154	0,3051	0,2296	0,6505	0,7034	0,5191	8,0182
	55	0,1969	0,0785	0,2510	0,2410	0,5709	0,6873	0,5553	5,8113
	40	0,2160	0,0519	0,2042	0,2495	0,5059	0,6779	0,5809	4,4124
	25	0,2730	0,0272	0,1437	0,2590	0,4303	0,6689	0,6146	2,9109

CONCLUSÕES

Os três parâmetros de desempenho que orientam o projeto de um mancal de deslizamento são a espessura mínima do filme lubrificante, as vazões do lubrificante no contorno da sapata e a perda de potência. Um item adicional no caso de mancais axiais é o centro de pressão que é de grande importância para mancais pivotados, pois é ele que define a localização do pivô. Esses valores na forma adimensional e outros como o fator de carga e o coeficiente de fricção são mostrados nas tabelas 1 a 4. Analizando os resultados pode-se deduzir que:

- *Efeito do parâmetro θ_0* : Para um dado L/Re há um ótimo valor de θ_0 . Assim, pelo uso de um número ótimo de sapatas, garante-se a mais alta capacidade de carga. Geralmente deseja-se ter a maior capacidade de carga, a maior razão L/Re, e o menor número de sapatas. Maiores ângulos de setor e menores relações a/b implicam que os picos de pressão se posicionem mais próximos à saída da sapata.
- *Efeito do parâmetro L/Re*: Maiores razões de L/Re irão elevar a capacidade de carga. Essa tendência é mais forte com valores pequenos do ângulo θ_0 do setor.
- *Efeito de a/b*: A capacidade de carga varia muito rapidamente com o aumento de a/b, podendo aumentar até 17 vezes quando a relação a/b varia de 0.2 a 1.0.

REFERENCIAS

Frêne, J., 1982, "Paliers Hydrodynamiques, Lubrification Hydrodynamique", Techniques de l'ingénieur, vol. B5 - 11, B671, pp. 01-12.

Gross, W. A., Matsch, L. A., Castelli, V., Eshel, A., Vohr, J. H., Wildmann, M., 1980, "Fluid Film Lubrication", Wiley - Interscience Publication, Technical Information Center, pp. 157 - 288.

Mouallem, E. G., 1996, "Aplicação do método das diferenças finitas à análise de mancais axiais hidrodinâmicos de sapatas setoriais", dissertação de mestrado.

Pinkus, O. and Lynn, W., 1958, "Solution of the Tapered-Land Sector Bearing", Mass., Trans. Asme, vol. 80, pp. 1510-1516.

ABSTRACT

A theoretical model, based on the isothermal hydrodynamic lubrication theory, for the calculation of a wide range of 'dimensionless operating parameters' is presented, enabling any designer to perform a predictive analysis of the operational behavior of a hydrodynamic thrust bearing. The Reynolds equation, in polar coordinates, was solved in the region corresponding to a tapered-land sector pad, the oil-film shape being that of on uniform taper in the circumferencial direction. The finite difference method was applied in order to obtain the nodal pressure distribution, after several tests relative to the optimization of net refinement. Once the pressure distribution on the sector pad was obtained, the dimensionless operating parameters, such as load capacity, lubricant flow rate in the sector edges, and power losses were calculated. Thus, a computational model was developed for simulating the operational behavior of hydrodynamic thrust bearings, for a wide range of the following geometrical dimensions and working conditions:

- Pad radial length / Pad outer radius,
- Minimum lubricant film thickness / Amount of taper,
- Angular span of the sector pad.

Furthermore, a series of tables and graphs were organized, allowing the complete analysis of the bearing operational behavior, even without the use of a computer by the designer.



DISPERSION Y RETROMEZCLADO EN UNA COLUMNA DE EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO YORK-SCHEIBEL

M. G. Gómez*, A. Ballesteros, J.M. Segnini, M. Zamora, F. Pironti

Departamento de Termodinámica

Universidad Simón Bolívar

Apartado Postal 89000, Caracas 1080A, Venezuela

SUMARIO

En este trabajo se reporta un estudio experimental sobre dispersión y retromezclado en una columna de extracción líquido-líquido de multietapas tipo York-Scheibel. Se trabajó con dos líquidos inmiscibles en contracorriente, agua destilada por el tope y kerosene por el fondo. Se inyectaban pulsos de colorantes y se analizaban las respectivas respuestas con un espectrofotómetro. Se encontró que en general hay mayor dispersión cuando la fase continua la constituye el agua y no el kerosene; que el modelo de dispersión cerrado-cerrado sigue la tendencia observada y se pudo calcular el Peclet para cada corrida. Al graficar el Pe estimado en función del número de revoluciones del agitador para una velocidad de entrada fija, se encontró la presencia de un máximo; es decir, la dispersión es mínima alrededor de 650 rpm. Se aplicó el modelo de celdas en serie con recirculación y se estimó el coeficiente de retromezclado que mejor ajustaba la data, encontrándose un valor de 0.2 para 36 etapas.

INTRODUCCION

El proceso de extracción líquido-líquido, se hace cada vez más importante, ya que ha sido la solución a la separación de mezclas cuyos componentes tienen puntos de ebullición similares. Para este proceso se han usado diversos equipos con la finalidad de optimizar y hacer más eficaz la extracción. Entre éstos se encuentra la columna de extracción líquido-líquido diseñada por York y Scheibel que es objeto de estudio en este trabajo. Para que se haga posible la utilización de este equipo es necesario conocer su hidrodinámica, la dispersión axial, la fracción de retención de la fase dispersa, las condiciones de inundación y la transferencia de masa. El estudio de la hidrodinámica, es complejo, ya que no se puede disponer de una representación completa de la distribución de velocidades del fluido, y se restringe a conocer la distribución de los tiempos de residencia de la corriente de fluido. Esta información puede determinarse mediante la técnica del estímulo-respuesta, que consiste en la inyección de un trazador y la obtención de su representación a la salida del sistema en función del tiempo.

En este trabajo se analiza la dispersión axial y el efecto del coeficiente de retromezclado en el interior de la columna antes mencionada, en función de algunas condiciones operacionales como: flujos de entrada de los fluidos (agua y kerosene) al equipo, velocidad de agitación y el fluido que constituye la fase continua, colocando la interfase al inicio y al final de las etapas según sea el caso. Finalmente, se ajustaron los datos experimentales con dos modelos teóricos: uno basado en el modelo diferencial de dispersión axial utilizando las ecuaciones desarrolladas por Bischoff y Levenspiel (1962), y el otro en el modelo de celdas en contracorriente con retroflujo transitorio mediante el uso de las ecuaciones resueltas propuestas por Dongaocar et. al. (1993).

FUNDAMENTOS TEORICOS

Levenspiel (1962) propuso un modelo de dispersión axial para un sistema cerrado-cerrado, entendiéndose por este último término aquel sistema en donde no hay dispersión hacia atrás en la entrada ni tampoco hay dispersión hacia adelante en la salida. Estas dos restricciones fijan las condiciones de borde para el modelo diferencial cuya ecuación viene dado por:

$$\frac{\partial C}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial C}{\partial z} \quad (1)$$

en donde C es la concentración normalizada, i.e. $c(t) / \int_0^\infty c(t) dt / \bar{t}$, $z = x/L$, $\theta = t / \bar{t}$, y el Número de Peclet,

$Pe = uL/D$, siendo D el coeficiente de dispersión, u la velocidad promedio del fluido, L la longitud del sistema entre el punto de inyección y la medida de la concentración del trazador. La ecuación anterior puede ser resuelta para las dos condiciones cerradas y la solución analítica obtenida por Yagi et al (1953) para una función pulso a la entrada viene dada por la siguiente expresión:

$$E(\theta) = 4 \sum \frac{\delta_n (Pe \operatorname{sen} \delta_n + 2 \delta_n \cos \delta_n)}{Pe^2 + 4Pe + 4\delta_n^2} \times \exp \left\{ \frac{Pe}{2} - \frac{(Pe^2 + 4\delta_n^2)\theta}{4Pe} \right\} \quad (2)$$

donde E(θ) representa directamente la distribución de tiempos de residencia en función del tiempo normalizado, y δ_n es la raíz enésima positiva de la siguiente ecuación trascendental:

$$\cot \delta_n = 0.5 \left(\frac{2\delta_n}{Pe} - \frac{Pe}{2\delta_n} \right) \quad (3)$$

Sin embargo, el cálculo del Peclet que se ajuste a la data experimental a partir de la Ec. (2) no es directo y mucho más sencillo es procediendo a partir de los tres primeros momentos, i.e. de la media, de la varianza y del sesgo. Para el sistema cerrado-cerrado, se han derivado Wen y Fan (1975) las siguientes relaciones:

$$\mu = \bar{t} \quad (4)$$

$$\sigma^2 = \left\{ \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} [1 - \exp(-Pe)] \right\} \bar{t}^2 \quad (5)$$

$$\gamma^3 = \frac{24}{Pe^3} \left\{ \left(\frac{Pe}{2} - 1 \right) + \left(\frac{Pe}{2} + 1 \right) \exp(-Pe) \right\} \bar{t}^3 \quad (6)$$

Dongaonkar et al. (1993) hallaron soluciones analíticas generalizadas para el modelo de celdas en serie con retromezclado para específicamente columnas de multietapas de extracción líquido-líquido. A partir de la ecuación del balance de masa para el trazador en una etapa genérica n, se tiene:

$$(1 + \alpha)C_{n-1} - (1 + 2\alpha)C_n + \alpha C_{n+1} = \frac{1}{N} \frac{dC_n}{d\theta} \quad (7)$$

donde α representa el coeficiente de retromezclado y N el número de etapas de extracción. La solución para la respuesta transitoria a la salida de la etapa N a un pulso de trazador en la entrada viene dada por la siguiente expresión:

$$C_n(\theta) = \sum_{i=1}^n A_i \exp(\zeta_i \theta) \quad (8)$$

donde:

$$A_i = \left[\frac{a^{N-1} \text{Sen}(\Psi_i)}{\alpha d[\text{DEN}]|_{\Psi=\Psi_i}/d\Psi} \right] / \left\{ \alpha d[\text{DEN}]|_{\Psi=\Psi_i}/d\Psi \right\} \quad (9)$$

$$\zeta_i = N \{ 2[\alpha(1 + \alpha)]^{0.5} \cos(\Psi_i) - (1 + 2\alpha) \} \quad 1 \leq i \leq N \quad (10)$$

siendo $a = [(1 + \alpha)/\alpha]^{0.5}$

Los N valores de Ψ_i son ceros de la Ec. (11) en el intervalo $0 < \Psi < \pi$,

$$\text{DEN}(\Psi) = a \text{sen}[(N+1)\Psi] - 2 \text{sen}(N\Psi) + (1/a) \text{sen}[(N-1)\Psi] \quad (11)$$

EQUIPO Y PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Se dispuso de una columna de extracción líquido-líquido tipo *York-Scheibel* (Figura 1), constituida por una columna

de vidrio *Pyrex* (1) de 10 cm de diámetro, con 36 secciones rellenas en acero inoxidable 316 con empaaduras de teflón y un eje central para agitación mecánica accionado por un motor de velocidad variable. El agitador es del tipo turbina de 6 cm de diámetro y con 4 paletas verticales de 1 cm de ancho. Secciones de relleno para las zonas de calma y separación de fases con dos válvulas de entrada y una de salida. Dos recipientes de plástico de 50 l de capacidad, para la alimentación (2). Una válvula de aguja para el control de la alimentación (3). Dos válvulas de cobre: una para el drenaje del kerosene (4a) y otra para la entrada de kerosene (4b). Tres rotámetros: (5a) de entrada del solvente pesado (agua), (5b) de entrada de solvente liviano (kerosene) y (5c) de salida de solvente pesado igual al anterior. Un motor de 1/4 HP a prueba de explosiones con selector de velocidades para el agitador de turbina (6) (las velocidades promedio a las que se trabajó fueron: 704, 882, 1117 y 1209 rpm). Dos tubos de vidrio en forma de T (7) para alojar las inyectoras de trazador.

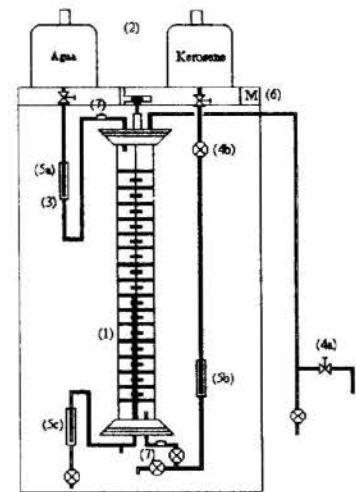


Figura 1. Esquema del equipo empleado.

Se prepararon soluciones de azul de metileno (insoluble en kerosene) y de rojo muerto (insoluble en agua) de diferentes concentraciones, a las cuales se les midió la absorbancia en un espectrofotómetro marca *Spectronic 20 Milton Roy*, con rango de longitud de onda entre 340-960 nm y se realizaron gráficas de concentración en función de la absorbancia. El azul de metileno es insoluble en kerosene y el rojo muerto es insoluble en agua. Los rotámetros se calibraron antes de llenar la columna. Se ajustaron los flujos de entrada y salida de los fluidos a través de los rotámetros hasta lograr las condiciones estacionarias, que se alcanzan cuando no existe variación apreciable del nivel de la interfase, cuidando que la fase dispersa no entre en contacto con la agitación. Se inyectaron los trazadores en la entrada de los fluidos a la columna, azul de metileno (1, 2 o 3 ml) y de rojo muerto (7 o 10 ml), y se controla el tiempo a partir de este momento. Las cantidades inyectadas dependieron de cuál fluido constituyó la fase continua y de la velocidad de agitación. Seguidamente se van tomando muestrás para diferentes tiempos hasta que no haya trazador en la salida. Las muestrás se introducen en el espectrofotómetro y se mide la absorbancia de cada una. Para las de azul de metileno se

ajusta una longitud de onda de 666 nm y para las de rojo muerto de 520 nm.

RESULTADOS Y DISCUSION

En la Figura 2 se muestran curvas típicas de respuesta para el sistema estudiado, en un caso la fase continua es el agua y en el otro caso el kerosene es la fase continua. Los experimentos se realizaron para la misma velocidad de agitación, i.e. 483 rpm con flujos de agua y kerosene parecidos. Los tiempos de residencia promedio de cada curva son similares, como era de esperarse. Sin embargo, al calcular la varianza adimensional para cada caso se pudo observar que el valor es mayor cuando el agua es la fase continua en lugar del kerosene. Esta misma tendencia se repitió para los distintos experimentos realizados a otras velocidades de rotación del agitador y de alimentación de los fluidos, por lo cual se desprende que la dispersión es mayor cuando el agua es la fase continua. Este resultado es de importancia para el proceso de extracción líquido-líquido en este tipo de equipo, por cuanto la transferencia de masa se vería afectada a medida que la dispersión es mayor.

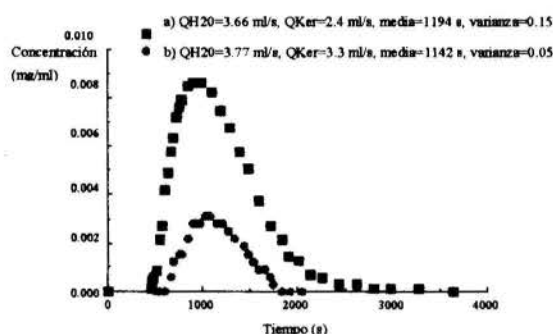


Figura 2. Variación de la concentración de trazador con el tiempo para a) Agua fase continua b) Kerosene fase continua, velocidad de agitación: 483 rpm.

A partir de las ecuaciones (8), (9), (10) y (11) del modelo de celdas en serie, derivado por Dongaonkar et. al. (1993) y mencionado anteriormente, se estimó que el coeficiente de retromezclado, α , que mejor ajustaba los datos para un número de etapas $N = 36$ era de 0.2. Sin embargo, la comparación de los datos experimentales con los resultados obtenidos de aplicar el modelo de celdas en serie con retromezclado, arrojaba errores mayores que el ajuste con el modelo de dispersión.

En la Figura 3 se muestra la comparación entre la curva de distribución de tiempos de residencia experimental y la teórica obtenida a partir del modelo de dispersión para un sistema cerrado-cerrado, para un Pe igual a 15.47, correspondiente a un experimento en donde la fase continua es el agua, la velocidad de rotación del agitador de 605 rpm, el caudal de agua de 2.5 ml/s y el caudal de kerosene de 2.4 ml/s. A partir de los valores experimentales se calculó la media: 1175 s; la varianza adimensional: 0.12 y el sesgo adimensional: 0.044. Mediante la técnica de los momentos se calculó el Peclet de 15.47 que mejor ajusta la data y con este valor se halló la curva teórica a partir de la solución para el sistema cerrado-cerrado. De la gráfica se desprende que el ajuste es bastante bueno con un error promedio del 9%.

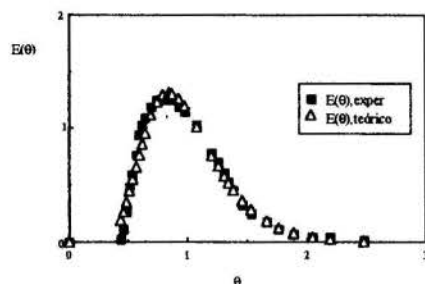


Figura 3. Modelo de dispersión, comparación de la curva experimental con la curva teórica para un Peclet de 15.47, sistema cerrado-cerrado, agua como fase continua.

En la figura 4 se grafican los diferentes valores de Peclet calculados a partir del modelo de dispersión para distintos flujos del fluido en la fase continua en función del número de revoluciones del agitador. Aparentemente se observa la presencia de un máximo, alrededor de 650 rpm, lo cual es indicativo de un mínimo en la dispersión, favoreciendo así el proceso de extracción líquido-líquido. En esta gráfica se reafirma lo dicho anteriormente que la dispersión cuando el agua es la fase continua es mayor, puesto que todos los valores de Peclet son menores que los correspondientes para el kerosene.

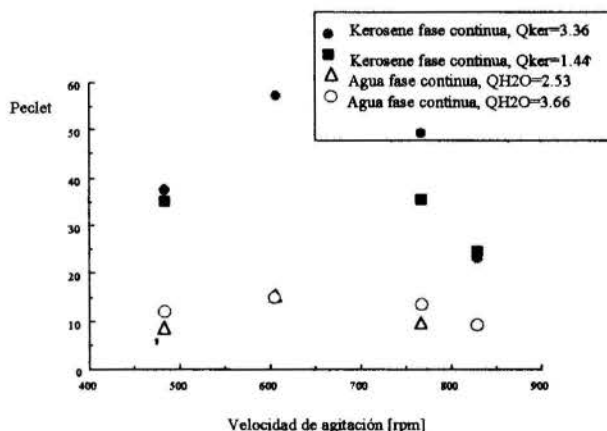


Figura 4. Variación del Peclet con la velocidad de agitación para cuatro flujos de fase continua

CONCLUSIONES

En este trabajo se reporta un estudio experimental sobre dispersión y retromezclado en una columna de extracción líquido-líquido de multietapas tipo York-Scheibel. Se trabajó con dos líquidos inmiscibles en contracorriente, agua destilada por el tope y kerosene por el fondo. El método experimental empleado fue la técnica de estímulo-respuesta, i.e., se inyectaban pulsos de colorantes y se analizaban las respectivas respuestas con un espectrofotómetro. Se utilizó el azul de metileno como trazador para la fase acuosa y el rojo muerto para la fase orgánica; el azul de metileno es insoluble en kerosene y el rojo muerto es insoluble en el agua. Se encontró que en general hay mayor dispersión cuando el agua

es la fase continua que cuando el kerosene es la fase continua, siguiendo el modelo de dispersión cerrado-cerrado la tendencia observada y se pudo calcular el Peclet para cada corrida. Al graficar el Pe estimado en función del número de revoluciones del agitador para una velocidad de entrada fija, se encontró la presencia de un máximo; es decir, la dispersión es mínima alrededor de 650 rpm. Se aplicó el modelo de celdas en serie con recirculación y se estimó el coeficiente de retromezclado que mejor ajustaba la data, encontrándose un valor de 0.2 para 36 etapas.

were injected and the corresponding responses were detected with a spectrophotometer. It was found, that in general, there is more dispersion when the continuous phase was water instead of kerosene. The dispersion model with boundary conditions for closed-closed system followed the observed tendency and a Peclet number was calculated for each experimental test. When the Peclet's number was calculated and plotted against agitation velocity for a given feed flow, an apparent maximum value was presented, i.e. around 650 rpm the dispersion is minimum. The cells in serie model with recirculation was applied and an estimated back-mixing coefficient which best fitted the data was found to be 0.2 for 36 stages.

LISTA DE SIMBOLOS

A_i = coeficiente definido por la Ec. (8).
 c = concentración del trazador, mg/ml.
 C = concentración adimensional del trazador en la etapa n.
 $DEN(\Psi)$ = definido por la Ec. (11).
 D = coeficiente de dispersión axial, cm^2/s .
 L = longitud de la sección de prueba de la columna, m.
 N = número de etapas.
 Pe = número adimensional de Peclet, UL/E .
 s_j = parámetro definido por la Ec. (10).
 t = tiempo, s.
 \bar{t} = tiempo de residencia promedio, s.
 u = velocidad superficial de la fase, m/s.
 V = volumen total de la columna, m^3 .
 X = coordenada en la dirección axial, m.
 z = coordenada adimensional

Símbolos griegos

α = coeficiente adimensional de retromezclado
 γ^3 = sesgo dimensional.
 θ = tiempo adimensional.
 σ^2 = varianza adimensional.
 Ψ = parámetro definido por la Ec. (9).

REFERENCIAS

- Dongoakar, K. R., H. R. Clive Pratt y G. W. Stevens, 1993, "Generalized solution of the transient backflow model equations for tracer concentration in stagewise liquid extraction columns", *Ind. Eng. Chem. Res.* 32, 1169-1173.
- Levenspiel, O., 1962, "Ingeniería de las Reacciones Químicas", Editorial Reverte, S.A., Mexico, pp. 279-347.
- Wen, C.Y. and Fan, L.T., 1975, "Models for Flow Systems and Chemical Reactors", Marcel Decker Inc., New York.
- Yagi, S. y Miyachi, T., 1953, *Kagaku Kogaku*, 17 p. 382; tomado de la publicación de Ohsasa, K., M. Sambauchi y H. Nakakura, 1982, "Gas Holdup and Longitudinal Mixing in a Rotary Annular Bubble Column", *International Chemical Engineering*, Vol 22, No. 2, pag.355-361.

SUMMARY

In this work, we report an experimental study about dispersion and back-mixing in a York-Scheibel multi-stage liquid-liquid extraction column. We worked with two immiscible liquids, flowing countercurrent, distilled water from the top and kerosene from the bottom. Pulses of dyes



EXTRAÇÃO LÍQUIDO-LÍQUIDO EM COLUNAS COM PRATOS PULSANTES



⁽¹⁾Luiz Mário N. Góis, ⁽²⁾Elias B. Tambourgi, ⁽²⁾João A. F. R. Pereira

⁽¹⁾Mestrado em Engenharia Química -UFBA

40.210-630 - Salvador/Bahia/Brasil

⁽²⁾DESQ/FEQ/UNICAMP

13083-970 - Campinas/São Paulo/Brasil

RESUMO

No presente trabalho é apresentado um estudo sobre um extrator de pratos pulsantes. Este estudo é baseado nos dados de eficiência de separação obtidos utilizando-se o sistema líquido *n*-butanol-ácido acético-água. São introduzidas modificações na geometria e na operação do extrator e analisadas as influências de cada um dos parâmetros individualmente. A eficiência de separação é determinada através dos dados de concentração de soluto nas correntes de saída da coluna, extrato e refinado, utilizando-se para isso o modelo proposto por Kawase (1990). Uma correlação de modelagem para a eficiência é também apresentada.

INTRODUÇÃO

A extração líquido-líquido é um processo de separação que envolve a ação de um solvente na recuperação de componentes de uma mistura líquida. Este processo é baseado na diferença dos índices de solubilidade dos componentes envolvidos na mistura, diferente, portanto da destilação que é condicionada aos pontos de ebulição dos componentes.

Os extratores pulsados destacam-se dos demais outros mecanicamente agitados devido à sua forma de agitação se processar através de pulsos periódicos. Este processo apresenta como principal vantagem o fato da agitação acontecer na mesma direção do escoamento das fases, o que evita o escoamento radial da mistura, como ocorre em colunas agitadas por mecanismos de rotação.

Dos estudos de extração, pouco se tem visto nos últimos anos sobre as colunas pulsadas em geral e, muito menos ainda, a respeito das colunas com pratos pulsantes. Logo é de se prever que a quantidade de pesquisas referentes à este tipo de coluna ainda é bastante restrito, o que viabiliza o interesse em estudos referentes ao desenvolvimento deste extrator.

No presente trabalho é apresentado um estudo sobre a eficiência de separação em um extrator de pratos pulsantes, utilizando-se o sistema líquido butanol-ácido acético-água. São analisadas as influências de vários parâmetros no desempenho da coluna e uma correlação de modelagem é apresentada.

ANÁLISE DA LITERATURA

A maioria dos trabalhos existentes na literatura que tratam da transferência de massa em colunas de extração, normalmente se referem ao desempenho dessas colunas com relação ao transporte de um determinado soluto entre duas correntes, ou fases distintas (contínua e dispersa). Este desempenho, geralmente, é avaliado em função da determinação de alguns coeficientes, cujos significados são de grande importância nos cálculos e projetos de equipamentos de contato contínuo,

utilizados nos processos de separação em geral. O Coeficiente de Transferência de Massa, *k*, o Número de Unidades de Transferência, *NUT*, a Altura Equivalente de Estágios Teóricos, *HETS*, ou as medidas da Eficiência de Separação, *λ*, podem ser citados como os principais parâmetros determinados.

Com relação às colunas pulsadas, alguns autores já publicaram estudos sobre a transferência de massa nestes extratores. Porém, quase todos eles se detiveram às colunas com fluxo pulsado, enquanto que muito pouco tem sido publicado, nos últimos anos, sobre as colunas com pratos pulsantes.

Thornton (1957), foi quem primeiro estudou a transferência de massa em colunas pulsadas. Baseado em dados experimentais obtidos de uma coluna com fluxo pulsado este autor utilizou a definição de *HTU* descrita por Chilton (1935), detêve-se a uma faixa de operação em que o Número de Reynolds (*Re*) variava entre 20 e 500 e obteve a seguinte correlação empírica.

$$\frac{HTU}{\left(\frac{\mu^2}{g \cdot \rho_c^2}\right)^{1/3}} = K \left[\frac{\mu_c \cdot g}{V_o^3 \cdot (1 - \phi)^3 \cdot \rho_c} \right]^{2m} \left[\frac{\Delta \rho}{\rho_c} \right]^{2(m-1)} \quad (1)$$

$$\left[\frac{V_c^3 \cdot \rho_c}{g \cdot \mu_c \cdot \phi^3} \right]^{1/3} \left[\frac{V_d}{V_c} \right]^{0.5}$$

Nesta equação os termos *K* e *m* foram obtidos experimentalmente

O estudo apresentado por Thornton (1957) é ainda bastante citado na literatura atual, como sendo um dos primeiros trabalhos em que foi apresentada uma correlação para o cálculo da *HTU*, em colunas pulsadas. Porém a equação proposta, apesar de abranger um número bem razoável de parâmetros experimentais, se refere a transferência de massa em colunas com fluxo pulsado, e não com pratos pulsantes como é o caso da coluna aqui estudada.

Smoot e Babb (1962), mediram perfis de concentração ao longo de uma coluna com fluxo pulsado e determinaram valores para HTU a partir dos perfis encontrados. Segundo estes autores as HTU 's em colunas pulsadas podem ser obtidas através da seguinte equação:

$$\frac{HTU}{h} = 504 \left[\frac{f \cdot A \cdot D_h \cdot \rho_d}{V_d} \right]^{-0,40} \left[\frac{V_c}{f \cdot A} \right]^{0,43} \left[\frac{V_c}{V_d} \right]^{0,56} \left[\frac{D_h}{h} \right]^{0,62} \quad (2)$$

O estudo apresentado por Smoot e Babb (1962), é bem interessante, já que nele é mostrado um método mais preciso para a avaliação da transferência de massa em colunas pulsadas. Porém a análise realizada por estes autores também se refere somente às colunas com fluxo pulsado.

A literatura cita ainda outros autores como Landau et al (1964), Prochazka et al (1965) e Lo e Karr (1972), que desenvolveram seus estudos, utilizando colunas com pratos pulsantes, baseando-se em um estudo apresentado por Treybal (1959), em que a eficiência global, λ , é descrita pela relação entre a carga total introduzida na coluna e as $HETS$, existentes, ou seja:

$$\lambda = \frac{V_c + V_d}{HETS} \quad (3)$$

Tojo et al (1980), estudaram a transferência de massa em um extrator de pratos pulsantes conhecido como MVDC ("Multistage Vibrating Disk Column"). Este extrator apresenta como característica principal anéis circulares entre os estágios e discos compactos. A eficiência de separação, λ , foi medida seguindo-se o mesmo procedimento adotado por Landau et al (1964), Prochazka et al (1965) e Lo e Karr (1972), ou seja, através da utilização da correlação 3, proposta por Treybal (1959). A diferença básica deste trabalho com relação aos outros, para colunas com pratos pulsantes, é no que diz respeito ao cálculo dos valores das $HETS$, que neste foi determinado através da seguinte correlação,

$$HETS = \frac{V_c}{K_c \cdot a} \frac{\ln F}{F-1} \quad (4)$$

Baird et al (1992), estudaram a transferência de massa em uma coluna com pratos pulsantes alternados. Valores para NTU foram encontrados neste trabalho de duas formas distintas. A primeira, baseada no modelo descrito por Treybal (1980), na condição em que os dados de equilíbrio dos sistemas líquidos utilizados eram representados por retas, ou seja:

$$NTU = \ln \left[\frac{x_f - x_e^*}{x_e - x_e^*} \right] \left[\left(1 - \frac{I}{F} \right) + \frac{I}{F} \right] \quad (5)$$

A segunda, para os sistemas em que os dados de equilíbrio não eram representados por retas, através do mesmo modelo utilizado por Smoot e Babb (1962) em colunas com fluxo pulsado (equação 2).

Existem ainda na literatura outros trabalhos cujos autores utilizaram métodos bem mais simples para o estudo da

transferência de massa que podem ser empregados nos extratores pulsados. Estes métodos se baseiam na determinação da Eficiência de Separação, λ .

A correlação adotada por Murphree (1925), por exemplo, define a Eficiência de Separação, λ , através de uma relação em que são comparadas as frações de soluto, de entrada e saída, para uma determinada fase, com as composições de equilíbrio do sistema utilizado. O modelo proposto por Murphree (1925) pode ser expresso da seguinte forma:

$$\lambda = \frac{x_f - x_r}{x_f - x_r^*} \quad (6)$$

Assim, quanto mais próximas das concentrações de equilíbrio forem as concentrações de saída (de extrato ou de refinado), melhores valores de eficiência são obtidos para a operação.

Uma outra correlação existente na literatura para eficiência de separação, e que também pode ser utilizada é a proposta por Kawase (1990). Esta correlação é bem mais simples que a anterior, já que, para a sua utilização, não são necessários os dados de equilíbrio do sistema líquido.

A equação proposta por Kawase (1990) pode ser descrita da seguinte forma:

$$\lambda = \frac{x_f - y_e}{x_f} \quad (7)$$

sendo a eficiência, λ , interpretada como sendo a fração de recuperação de soluto na corrente de extrato.

Com relação aos dois últimos trabalhos analisados, verifica-se que o método proposto por Kawase (1989), além de ser mais recente, parece ser mais fácil de ser utilizado que o proposto por Murphree (1925), já que nele não são necessários os dados de equilíbrio do sistema líquido para a sua aplicação, dependendo somente das concentrações do soluto nas correntes de alimentação.

Finalmente, com relação à eficiência de separação em colunas de extração, pode-se citar ainda o trabalho publicado por Coimbra (1990). Neste trabalho, o autor comparou os dados de eficiência obtidos através das duas últimas correlações citadas (6 e 7), na extração do ácido láctico, utilizando um extrator de discos rotativos, e mostrou que os valores da eficiência obtidos através da correlação proposta por Kawase (1990), eram bem mais precisos que os obtidos com a utilização da correlação proposta por Murphree (1925).

A comparação apresentada por Coimbra (1990), pode vir portanto confirmar a precisão do modelo proposto por Kawase (1990), nas medidas dos dados da eficiência de separação em colunas de extração.

Diante das várias conclusões obtidas dos estudos encontrados na literatura, a proposta do presente trabalho é realizar um estudo, com respeito a transferência de massa, em uma coluna de extração com pratos pulsantes, utilizando para isso, o sistema líquido n-butanol-ácido acético-água, cujas propriedades físicas, assim como os dados de interesse são bem conhecidos da literatura. Este estudo se baseia nos dados de eficiência de separação, λ , obtidos por meio da correlação proposta por Kawase (1990). São analisadas as influências dos parâmetros, geométricos e operacionais, no desempenho da coluna, através dos dados de eficiência encontrados, e uma correlação de modelagem para λ , é proposta.

EXPERIMENTAL

O extrator de pratos pulsantes construído para este estudo, consiste de uma tubo de vidro com 97 cm de comprimento e 5,5 cm de diâmetro. No interior deste tubo foi instalado um arranjo de pratos perfurados com diâmetro de 5,0 cm fixados a uma haste de PVC. Este arranjo foi adaptado ao tubo, com a extremidade superior conectada a um mecanismo de pulsação.

O ajuste da frequência foi feito através da variação da velocidade de rotação do motor que impunha o movimento de pulsação aos pratos, enquanto que o ajuste da amplitude através da posição de fixação da haste no mecanismo de pulsação.

O sistema líquido escolhido para os testes, foi o n-butanol-ácido acético-água. Optou-se por este sistema, devido a relação entre as densidades e solubilidades da água e do n-butanol serem propícias à extração líquido-líquido.

O procedimento experimental adotado constou basicamente de medidas de concentrações de ácido acético na corrente de alimentação (x_f), e nas correntes de saída (x_s e x_r). Estas medidas foram obtidas através da técnica da titulometria, sendo utilizada uma solução de hidróxido de sódio (0,5 N) como neutralizante.

De posse dos dados de concentração de soluto nas correntes utilizou-se então a equação 6 para a determinação da eficiência de separação, λ .

ANÁLISE DOS RESULTADOS

As variações operacionais utilizadas neste estudo constaram de modificações na vazão da fase contínua (3,8 e 11,2 ml/s), na frequência de pulsação (0,4 e 1,2 s⁻¹) e na amplitude (4,0 e 6,0 cm), sendo mantida fixa a vazão de alimentação da fase dispersa em 7,3 ml/s.

As variações introduzidas nos parâmetros geométricos foram feitas no número de pratos pulsantes e na área livre de escoamento. Foram realizados experimentos adotando-se geometrias de coluna com 5 e 7 pratos e áreas livres de escoamento de 20 e 38%, sendo que para as colunas com 4 pratos só foi utilizada a área livre de 20%.

A seguir são descritas as influências de cada uma das variáveis estudadas na eficiência de separação, tomando-se como base tabelas de dados onde estão relacionados a eficiência de separação, λ , com cada parâmetro selecionado.

Influência da Frequência de Pulsação. O estudo da influência da frequência é apresentado através da análise dos dados mostrados na Tabela 1. Observa-se também nesta tabela, efeitos causados devido às alterações introduzidas nos outros parâmetros analisados tais com a área livre de escoamento, o número de pratos, a amplitude de pulsação e a vazão da fase contínua.

Observando-se os resultados apresentados na tabela verifica-se primeiramente, na maioria deles, uma tendência de crescimento da eficiência com a frequência. Esta tendência é justificada em função de que nos experimentos com frequências mais elevadas deve ocorrer uma maior intensidade de quebra de gotas no interior da coluna, e facilitar o transporte de soluto entre as duas fases, devido ao aumento da área interfacial de contato.

Analisando-se os resultados, quando utilizadas áreas livres de 38%, percebe-se uma tendência de ocorrência de pontos de máximo para valores intermediários da frequência de pulsação. Ou seja, valores de eficiência mais elevados obtidos para a frequência de 0,4 s⁻¹. Enquanto que nos casos em que a área livre é de 20%, os comportamentos apresentados pelos pontos

mostram um crescimento proporcional da eficiência com a frequência de pulsação.

Tabela 1 - Influência da frequência de pulsação

n.pratos	A livre %	Q _c ml/s	A cm	$\lambda_{0,0}$	$\lambda_{0,4}$	$\lambda_{1,2}$
7	38	3,80	4,0	0,20	0,369	0,390
7	38	11,20	4,0	0,22	0,313	0,250
7	38	3,80	6,0	0,20	0,837	0,144
7	38	11,20	6,0	0,22	0,720	0,694
7	20	3,80	4,0	0,32	0,367	0,472
7	20	11,20	4,0	0,59	0,720	0,887
7	20	3,80	6,0	0,32	0,412	0,538
7	20	11,20	6,0	0,59	0,800	0,813
4	20	3,80	4,0	0,39	0,459	0,531
4	20	11,20	4,0	0,74	0,773	0,853
4	20	3,80	6,0	0,39	0,380	0,400
4	20	11,20	6,0	0,74	0,780	0,849

O comportamento dos resultados apresentados na Tabela 1, com relação à área livre de 38% vem a confirmar a existência de uma frequência de pulsação, de onde, a partir dela, as gotas da fase dispersa tornam-se muito pequenas, sendo mais facilmente ou mas rapidamente, conduzidas por todo o comprimento da coluna, sem haver no entanto, o contato necessário entre as fases presentes para uma boa transferência de massa. Este comportamento deve também ter sido influenciado pela quantidade de pratos existentes na coluna, já que com uma maior área livre, mais facilmente as gotas escoam entre os pratos reduzindo assim o tempo de contato entre as fases, e com uma maior quantidade de pratos na coluna, mais facilitado é o transporte. Estes dois fenômenos devem então contribuir para que o contato entre as fases presentes seja reduzido, baixando assim os valores da eficiência nos casos de frequência de 1,2 s⁻¹.

Influência da Amplitude de Pulsação. O estudo da influência da amplitude de pulsação está bem relacionado com o da frequência, já que o produto, $A.f$, conhecido como velocidade de pulsação, é um parâmetro de grande importância nos estudos de desempenhos de extratores pulsados. Esta influência é percebida através da análise dos dados mostrados na Tabela 2.

Tabela 2 - Influência da amplitude de pulsação

n.pratos	f s ⁻¹	a livre %	Q _c ml/s	$\lambda_{0,0}$	$\lambda_{4,0}$	$\lambda_{6,0}$
7	0,4	38	3,80	0,20	0,369	0,381
7	0,4	38	11,20	0,22	0,313	0,720
7	1,2	38	3,80	0,20	0,390	0,338
7	1,2	38	11,20	0,22	0,250	0,694
7	0,4	20	3,80	0,32	0,367	0,412
7	0,4	20	11,20	0,59	0,720	0,800
7	1,2	20	3,80	0,32	0,472	0,538
7	1,2	20	11,20	0,59	0,887	0,813
4	0,4	20	3,80	0,39	0,459	0,380
4	0,4	20	11,20	0,74	0,773	0,780
4	1,2	20	3,80	0,39	0,531	0,400
4	1,2	20	11,20	0,74	0,853	0,849

Analisando-se os dados apresentados na tabela, observa-se dois comportamentos distintos, quanto tratadas as colunas com 7 e com 4 pratos respectivamente.

Nas colunas com 7 pratos verifica-se uma tendência de crescimento da eficiência com o aumento da amplitude. Este crescimento é justificado pelo aumento do caminho percorrido pelos pratos, no movimento de pulsação, que deve proporcionar uma maior agitação e maior mistura entre as fases presentes na coluna. Porém, ainda com relação às colunas com 7 pratos, em alguns casos de frequências ou vazões de fase contínua mais elevadas ($1,2 \text{ s}^{-1}$ e $11,2 \text{ ml/s}$, respectivamente), a eficiência tende a decrescer. Este fenômeno deve estar associado, muito provavelmente, ao arraste da fase dispersa pela base da coluna.

Nas colunas em que foram utilizados 4 pratos, em quase todos os casos observa-se, com exceção do caso da frequência de $0,4 \text{ s}^{-1}$ e vazão $11,2 \text{ ml/s}$, uma tendência de crescimento, e posterior decrescimento. Este fenômeno também é justificado com base na ocorrência do arraste da fase dispersa pela fase contínua.

O comportamento de arraste apresentado desta vez é um pouco diferente do descrito na seção anterior (estudo da influência da frequência), quando tratadas as colunas com 38% de área livre. Na seção anterior o arraste foi processado pelo topo da coluna devido a área livre dos pratos ser mais elevada e a coluna possuir um maior número de pratos pulsantes. Já o arraste, verificado nesta seção, para as colunas com 4 pratos deve ocorrer na base da coluna devido tanto a quantidade de pratos não ser suficiente para o transporte, como a área livre reduzida fazer com que as gotas não ascendam na coluna.

Nesta análise pode-se então concluir que normalmente se obtém maiores valores de eficiência de separação em experiências com amplitudes de pulsação mais elevadas. Apesar de que deve-se levar em conta a existência de faixas de energia de agitação que, acima das quais, os níveis de eficiência tendem ao decrescimento. Estas faixas estão relacionadas a frequência, a amplitude e ao número de pratos, entre outros.

Influência do Número de Pratos Pulsantes. Esta avaliação é bem semelhante a já feita para a amplitude e a frequência de pulsação vistas nas seções anteriores, já que a dimensão do caminho percorrido pelos pratos e a quantidade de pratos presentes são fatores que estão intrinsecamente ligados ao tratamento da agitação da coluna.

Observando-se os dados mostrados na Tabela 3, verifica-se a existência de dois grupos de dados distintos. Um grupo para amplitudes na faixa de $0,0$ a $4,0 \text{ cm}$ e um outro para a amplitude de $6,0 \text{ cm}$. Nos casos de experiências com colunas com amplitudes de $0,0$ a $4,0 \text{ cm}$, melhores resultados foram obtidos nas colunas com 4 pratos que nas com 7 pratos. Exceção sendo feita para o caso dos dados com vazão de $11,2 \text{ ml/s}$ e a frequência de $1,2 \text{ s}^{-1}$. Enquanto que nos casos de experiências com amplitudes de $6,0 \text{ cm}$ melhores resultados foram obtidos para colunas com 7 pratos. Exceção novamente sendo feita no caso da vazão de $11,2 \text{ ml/s}$ e frequência de $1,2 \text{ s}^{-1}$.

Tabela.3 - Influência da quantidade de pratos

a livre %	Q_c ml/s	A cm	f s^{-1}	$\lambda_{7 \text{ pratos}}$	$\lambda_{4 \text{ pratos}}$
20	3,80	0,0	0,0	0,320	0,390
20	11,20	0,0	0,0	0,590	0,740
20	3,80	4,0	0,4	0,367	0,459
20	11,20	4,0	0,4	0,720	0,773
20	3,80	4,0	1,2	0,472	0,531
20	11,20	4,0	1,2	0,887	0,853
20	3,80	6,0	0,4	0,412	0,380
20	11,20	6,0	0,4	0,800	0,780
20	3,80	6,0	1,2	0,538	0,400
20	11,20	6,0	1,2	0,813	0,849

Estes resultados contrariam também as expectativas de que com taxas de agitação elevadas, tem-se maior quebra de gotas e elevadas áreas interfaciais de contato.

Nos casos em que se dispôs de amplitudes mais baixas ($0,0$ a $4,0 \text{ cm}$), o caminho percorrido pelos pratos é mais curto, o que deve ter favorecido às configurações com 4 pratos, devido ao tempo de permanência das fases nos estágios se mais elevado. Nas configurações com 7 pratos este tempo deve ter sido menor diante da maior facilidade ocorrida no transporte do soluto entre os estágios da coluna.

Na outra faixa de amplitude ($6,0 \text{ cm}$), o caminho percorrido é maior e, neste caso, obteve-se melhores resultados para as configurações com 7 pratos devido a maiores taxas de agitação terem sido atingidas.

Na análise da influência da quantidade de pratos conclui-se que o efeito deste parâmetro na eficiência está diretamente condicionado às variações da amplitude de pulsação.

Com base nos experimentos realizados obteve-se as justificativas para esta análise em função do tempo de permanência das fases nos estágios da coluna.

Influência da Área Livre de Escoamento. O estudo da influência da área livre de escoamento na transferência de massa foi realizado somente para colunas com 7 pratos. Os resultados encontrados estão mostrados através dos dados apresentados na Tabela 4.

Tabela 4 - Influência da Área Livre de Escoamento.

n. pratos	Q_c ml/s	A cm	f s^{-1}	$\lambda_{38\%}$	$\lambda_{20\%}$
7	3,80	0,0	0,0	0,200	0,320
7	11,20	0,0	0,0	0,220	0,590
7	3,80	4,0	1,2	0,390	0,472
7	11,20	4,0	1,2	0,250	0,887
7	3,80	6,0	0,4	0,837	0,412
7	11,20	6,0	0,4	0,720	0,800
7	3,80	6,0	1,2	0,144	0,538
7	11,20	6,0	1,2	0,694	0,813

Analisando-se os valores da eficiência de separação mostrados, observa-se claramente que melhores valores de eficiências são obtidos para as colunas com áreas livres de escoamento de 20%, sendo o fenômeno observado em praticamente todas as experiências.

O fato tem justificativa baseada em que nos casos em que a coluna apresenta área livre de escoamento de 20%, o tempo de permanência de ambas as fases no interior do estágio é bem mais elevado. Enquanto que nas colunas com 38% de área livre, existe uma maior facilidade da massa líquida escoar entre os estágios, o que deve fazer com que o contato entre as fases seja mais reduzido. Assim, desde que aconteça uma maior contato entre as fases, certamente maiores valores para a eficiência, λ , devam vir a ser obtidos.

Influência da Vazão da Fase Contínua. A influência da vazão da fase contínua na transferência de massa, está relacionada com as condições de inundação da coluna, o que não deixa de ser condições em que acontece arraste de uma das fases pela outra. Assim, pode ocorrer a existência de uma mistura rica em fase contínua na saída de refinado, devido ao arraste da fase contínua pela fase dispersa. Da mesma forma, também pode ocorrer a presença de uma mistura rica em fase dispersa na saída de extrato, devido ao arraste da fase dispersa pela fase contínua. Portanto, desde que aconteça a inundação da coluna, os dados de

eficiência de separação não devem ser satisfatórios, visto que o contato entre as fases é afetado.

Conforme já previsto na seção referente a análise da frequência de pulsação, observa-se na Tabela 5 a existência de 3 grupos distintos de dados. O primeiro grupo em que a área livre é de 38% e se dispõe de 7 pratos, um segundo para área livre de 20% e 7 pratos e, por último, um terceiro para área livre de 20% e 4 pratos.

Analisando-se primeiramente o caso em que se dispõe de dados para 7 pratos e área livre de 38%, observa-se com apenas uma exceção, que a eficiência decresce com o aumento da vazão da fase contínua. Seguindo-se os mesmos princípios utilizados nas análises anteriores, este é um caso típico de arraste da fase dispersa pela base da coluna, provocado pela facilidade com que acontece o escoamento da fase contínua no sentido descendente, tanto devido a grande área livre de escoamento como pela elevada quantidade de pratos presentes.

Com relação ao segundo grupo de dados, ou seja o que a área livre é de 20% e se dispõe de 7 pratos, o comportamento apresentado já é invertido com relação ao do primeiro grupo, ou seja: melhores resultados foram obtidos para a vazão de 11,2 ml/s que para a de 3,8 ml/s.

Tabela.5 - Influência da vazão da fase contínua na eficiência

n.pratos	a livre %	f s ⁻¹	A cm	λ _{3,8}	λ _{11,2}
7	38	0,00	0,0	0,200	0,220
7	38	0,40	4,0	0,369	0,313
7	38	1,20	4,0	0,390	0,210
7	38	0,40	6,0	0,837	0,720
7	38	1,20	6,0	0,144	0,694
7	20	0,40	4,0	0,367	0,720
7	20	1,20	4,0	0,472	0,887
7	20	0,40	6,0	0,412	0,800
7	20	1,20	6,0	0,538	0,813
4	20	0,00	0,0	0,390	0,740
4	20	0,40	4,0	0,459	0,773
4	20	1,20	4,0	0,531	0,853
4	20	0,40	6,0	0,380	0,780
4	20	1,20	6,0	0,400	0,849

Comparando-se os dois casos vistos, observa-se nitidamente a grande relação existente entre a influência da vazão da fase contínua e a área livre de escoamento, na eficiência. Ou seja, no caso da área livres de 38% a fase contínua, como escoar bem mais facilmente, consegue arrastar grande parte da fase dispersa pela base da coluna. O mesmo não acontecendo nos casos em que a área livre é de 20%, já que com esta área a fase contínua não tem a mesma facilidade de escoamento, o arraste é bem mais reduzido e os níveis de eficiência melhores.

Na análise do terceiro grupo de dados, ou o em que se dispõe da área livre de 20% e 4 pratos, observa-se novamente uma tendência crescente da eficiência com a vazão da fase contínua. Esta tendência também deve estar associada com o nível reduzido do arraste da fase dispersa que deve acontecer nestes casos, devido a influência marcante da área livre de escoamento mesmo com a quantidade de pratos reduzida.

MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática utilizada no presente trabalho constou de uma estudo para a determinação de uma correlação empírica para a Eficiência de Separação (λ). Nesta correlação a variável λ, é relacionada com todos os outros parâmetros, cujas

influências com relação à transferência de massa, foram percebidas no decorrer dos experimentos.

A técnica empregada constou da utilização dos princípios da análise dimensional e do método da regressão linear multivariável para a determinação dos grupos adimensionais e dos coeficientes que iriam compor a equação.

A equação encontrada foi portanto a seguinte:

$$\lambda = \frac{x_f - x_e}{x_f} = 5,287 \left[\frac{D \cdot f \cdot \rho_c}{\mu_c} \right]^{-0,907} \left[\frac{N}{N+1} \right]^{-2,15} \left[\frac{Q_f}{Q_r} \right]^{0,097} [\varepsilon]^{-0,4695} \left[\frac{\mu_c}{g \cdot \rho_c^2 \cdot L^3} \right]^{0,24296} \left[\frac{f^2 \cdot A}{g} \right]^{0,4992} \quad (8)$$

Na Figura.1 é mostrada uma comparação entre os resultados obtidos através da equação 8, λ_{calc}, e os determinados com os valores experimentais das concentrações de soluto, x_f e y_e, ou seja, λ_{exp}, através da equação 6. Foi encontrado, com isso, um erro médio na faixa de 25,65%, o que permite afirmar que a equação 8, obtida no presente trabalho, descreve satisfatoriamente os resultados obtidos nos experimentos, com relação a transferência de massa no extrator estudado.

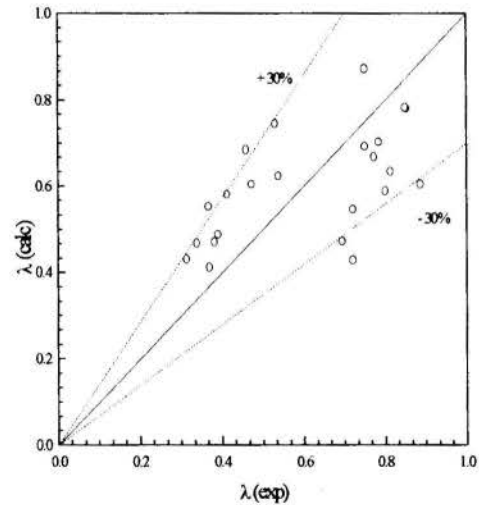


Figura 1 - Comparação entre os dados de Eficiência de Separação experimentais e os obtidos através da equação 8.

CONCLUSÕES

Como conclusões encontradas no presente trabalho pode-se citar principalmente a boa resposta mostrada pelo extrator, com relação aos níveis de eficiência de separação.

Além disso, a identificação das influências dos parâmetros estudados permite a identificação das melhores faixas de operabilidade do equipamento.

Diante do que foi mostrado pode-se concluir também que a utilização do extrator de pratos pulsantes pode ser perfeitamente viável em processos industriais de extração, podendo também inclusive, vir a tornar-se uma nova alternativa com relação aos equipamentos convencionais que são utilizados na separação líquido-líquido.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Baird, M. H. I. et al, 1992, "Axial Mixing and Mass Transfer in a Vibrating Perforated Plate", *Extraction Column*, *Can. J. Chem. Eng.*, V.70, 69-76.

Chilton, T. H. e Colburn, A. P., 1935, "Distillation and Absorption in Packed Columns", *Ind. Eng. Chem.*, V.27, N.3, 225-262.

Coimbra, J., 1991, "Purificação de Ácido Lático em uma Coluna de Discos Rotativos Perfurados", *Tese de Mestrado*, FEA/UNICAMP.

Kawase, Y., 1990, "Dispersed-Phase Holdup and Mass Transfer in a Rotating Disc Contactor with Perforated Skirts", *J. Chem. Tech. Biotechnol.*, V.48, 247-260.

Landau, J. et al, 1964, "Studies on Extraction II. Liquid-Liquid Extractor with Vibrating Plates", *Col. Cze. Chem. Commun.*, V.29, 3003-3019.

Lo, C. T. e Karr, A. E., 1972, "Development of a Laboratory-Scale Reciprocating Plate Extraction Column", *Ind. Eng. Chem. Des. Dev.*, V.11, N.4, 495-501.

Murphree, E. V., 1925, "Graphical Rectifying Column Calculations", *Ind. Eng. Chem.*, V.17, N.9, 960-964.

Prochazka, J. et al, 1965, "Studies on Extraction III. The action of a Single Plate in a Vibrating Plate Extractor", *Col. Cze. Chem. Commun.*, V.30, 158-168.

Smoot, L. D. e Babb, A. L., 1962, "Mass Transfer Studies in a Pulsed Extraction Column", *Ind. Eng. Chem. Fund.*, V.1, N.2, 93-103.

Tojo, K. et al, 1980, "Design Method and Performance Characteristics of a Vibrating Disk Column (MVDC) Extractor", *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, V.19, N.3, 459.

Thornton, J. D., 1957, "Liquid-Liquid Extraction Part XIII - The Effect of Wave-Form and Plate Geometry on the Performance and Throughput of a Pulsed Column", *Trans. Inst. Chem. Eng.*, V.35, 316.

Treybal, R. E., 1980, "Mass Transfer Operation", 3rd Edn. MacGraw-Hill, New York, 551.

x^* - conc. molar de soluto no equilíbrio - f. contínua (mol/cm³)
 y_* - conc. molar de soluto no extrato (mol/cm³).

Letras Gregas

ε - fração de área livre
 ρ - densidade (g/cm³)
 μ - viscosidade absoluta (g.cm/s)
 λ - eficiência de separação
 $\Delta\rho$ - diferença entre densidades
 ϕ - fração de retenção da fase dispersa

Subscriptos

c - fase contínua
 d - fase dispersa
 i - fase

NOMENCLATURA

A - amplitude de pulsação (cm)
 a - área interfacial de contato (cm²)
 D - diâmetro interno da coluna (cm)
 D_h - diâmetro dos furos dos pratos (cm)
 f - frequência de pulsação (ciclos/s ou s⁻¹)
 F - fator de extração $F = V_c/mV_d$
 g - aceleração da gravidade (cm²/s)
 h - altura de um compartimento ou estágio (cm)
 HTU - Altura de Unidade de Transferência (cm)
 $HETS$ - Altura Equivalente de Estágios Teóricos (cm)
 K - coeficiente global de transferência de massa (m/s)
 L - comprimento total da coluna (cm)
 m - constante de equilíbrio
 N - número de pratos da coluna
 $NETS$ - Número Equivalente de Estágios Teóricos
 NTU - Número de Unidades de Transferência
 Q_f - vazão volumétrica de alimentação (cm³/s)
 Q_e - vazão volumétrica de extrato (cm³/s)
 Q_r - vazão volumétrica de refinado (cm³/s)
 V - velocidade superficial de escoamento (cm/s)
 V_0 - velocidade característica (cm/s)
 x_f - conc. molar de soluto na alimentação- f. contínua (mol/cm³)
 x_r - conc. molar de soluto no refinado (mol/cm³)



CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DO EFEITO DO DISTRIBUIDOR DO GÁS SOBRE A TRANSFERÊNCIA DE MASSA GÁS/LÍQUIDO EM COLUNA DE BORBULHAMENTO ASCENDENTE



Domingos S.H. Malta, A. Knoechelmann, César A.M. de Abreu, M. Benachour

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Pernambuco
50740 - 521 - Recife - PE - Brasil

RESUMO

Foram realizados estudos de transferência de massa em coluna de borbulhamento gás/líquido ascendente que consistem, essencialmente, da avaliação do coeficiente volumétrico de transferência de massa gás/líquido (lado líquido) $k_L a$ em função da velocidade superficial do gás (U_G) e dos parâmetros geométricos do distribuidor tipo placa perfurada identificados pelo diâmetro dos orifícios (d_o), número dos orifícios (N) e o passo entre eles (L_p). Foram analisados 95 distribuidores para uma velocidade superficial do gás variando entre 0,01 m/s e 0,09 m/s. Os efeitos de d_o , L_p e N , e U_G sobre o $k_L a$ foram correlacionados com o regime de borbulhamento na coluna identificado por fotografia e filmagem vídeo e com as medições da retenção gasosa feitas num estudo precedente.

INTRODUÇÃO

As colunas de borbulhamento são contadores em que a fase descontínua em forma de bolhas move-se relativamente a uma fase contínua. A fase contínua pode ser líquida ou uma mistura homogênea líquido/sólido (slurry). Estes contadores possuem uma alta retenção líquida e um fluxo de transferência de massa relativamente alto, fatores que os fazem adaptados às reações gás/líquido, cujo o regime de absorção reativa é lento, com por exemplo a maioria das oxidações, hidrogenações, clorações, etc. Processos biotecnológicos e reações catalíticas trifásicas em leito de lama (slurry) podem apresentar também um regime de absorção reativa lento quando o tamanho das partículas (catalíticas ou células microbianas) é suficientemente maior que a dimensão do filme líquido da interface gás/líquido

O uso crescente das colunas de borbulhamento nos processos industriais e particularmente nas operações de refino de petróleo, de fermentação e de tratamento das águas residuais, durante as últimas três décadas, deve-se principalmente as vantagens que apresentam quando comparadas a outros tipos de contadores como os reatores perfeitamente agitados, as colunas recheadas ou os reatores de leito gotejante. As principais vantagens incluem:

- áreas interfaciais com valores relativamente elevados e dissipação reduzida da energia;
- altos fluxos de transferência de massa atingidos permitindo um fácil controle da temperatura, indicando segurança para o desenvolvimento de reações exotérmicas;
- baixo custo do equipamento;
- consumo energético mais baixo que nos reatores perfeitamente agitados;
- baixo custo de operação devido a inexistência de partes móveis;
- ocupação de menor espaço comparadas aos reatores perfeitamente agitados.

Entre as desvantagens ressaltam-se o alto grau de retromistura, tanto para a fase líquida como para a fase gasosa, a alta perda de carga no funcionamento à pressão atmosférica e alta instabilidade das bolhas.

O crescimento do uso das colunas de borbulhamento na prática industrial estimulou esforços na tentativa de um melhor

conhecimento das características hidrodinâmicas e dos fenômenos de transporte de massa, de calor e de mistura, e suas interdependências, partes fundamentais na modelagem e extrapolação destes reatores. Apesar de muitos estudos feitos sobre as colunas de borbulhamento e da grande quantidade de dados disponíveis, necessários na avaliação dos parâmetros envolvidos, estes reatores apresentam ainda problemas de concepção e de extrapolação.

Este trabalho tem como objetivo o estudo da transferência de massa gás/líquido em função de modificações na geometria do distribuidor do gás tipo placa perfurada e da velocidade superficial do gás em um coluna de borbulhamento gás/líquido ascendente com fase líquida fechada. A transferência de massa está sendo correlacionada com o regime de borbulhamento previamente analisado e com as medições da retenção gasosa realizadas num estudo precedente (Domingos et al., 1996).

MATERIAIS E MÉTODOS

O dispositivo utilizado nos experimentos é constituído de uma coluna em vidro de 0,06 m de diâmetro interno (D_C) e de 0,85 m de altura (figura 1). A coluna é alimentada com ar comprimido fornecido por um compressor de vazão máxima de $1,25 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ (303 K, 1 atm.). A vazão gasosa é medida por meio de dois rotâmetros, previamente calibrados, com escala de variação respectivamente de 0 a 1000 L/h e de 0 a 4000 L/h (303 K, 1 atm.). O gás é distribuído através de uma placa perfurada em teflon. Na base da coluna, encontra-se um dispositivo de nylon cujo objetivo é facilitar a substituição dos distribuidores. Foram analisados 95 distribuidores com a geometria determinada pela combinação de 5 números de orifícios (7, 19, 37, 61 e 91), com 5 diâmetros de orifícios (0,0005 m; 0,001 m; 0,0015 m; 0,002 m e 0,0025 m), e com 5 passos entre os orifícios (0,0045 m; 0,0055 m; 0,007 m; 0,009 m e 0,014 m). O sistema gás/líquido estudado é ar/água destilada e as condições operacionais foram: vazão volumétrica do ar compreendida entre $2,77 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$ e $2,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ (303 K, 1 atm.), que corresponde a uma faixa de variação da velocidade superficial do gás de 0,01 m/s e 0,09 m/s; altura inicial do líquido mantida a 0,64 m; pressão da coluna de

borbulhamento muito próxima da pressão atmosférica; temperatura do líquido igual a do ambiente 303 K.

A determinação do coeficiente volumétrico de transferência de massa gás/líquido $k_L a$ é feita pelo método de oxigenação dinâmica, a desoxigenação inicial sendo obtida por borbulhamento com o gás nitrogênio. A concentração de oxigênio dissolvida na água destilada é seguida por meio de uma sonda de oxigênio tipo Mini - Digi 02 Meter OH - 113 Radelkis, de fabricação húngara, colocada no reator e acoplada a um microcomputador IBM 286 com interface analógico - digital. Esta última permite transformar o sinal analógico da concentração de oxigênio, registrado em função do tempo, em um sinal digital que armazenado em um arquivo graças a um programa computacional desenvolvido para este fim, e aproveitado posteriormente para avaliação de $k_L a$. A dinâmica da sonda é determinada usando dois bequeres, um saturado em oxigênio e outro com água destilada completamente desoxigenada com borbulhamento de nitrogênio. A constante da dinâmica da sonda k_p é avaliada antes de começo dos ensaios e depois do fim dos ensaios. O valor médio de k_p é de $0,33 \text{ s}^{-1}$ que corresponde a um tempo médio de resposta da sonda de 3 s.

- | | |
|-------------------------|----------------------------|
| 1 - Coluna | 6 - Sonda de oxigênio |
| 2 - Distribuidor do gás | 7 - Sonda de temperatura |
| 3 - Manômetro em U | 8 - Carta de interface A/D |
| 4 - Rotâmetro do gás | 9 - Computador |
| 5 - Medidor de Oxigênio | |

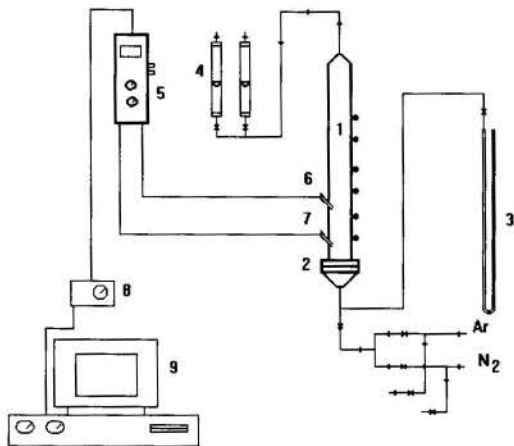


Figura 1 - Descrição esquemática da montagem experimental

Para determinação do coeficiente volumétrico de transferência de massa gás/líquido (lado líquido) $k_L a$ na coluna de borbulhamento, um modelo é construído considerando o volume da fase líquida é homogêneo com realização de um equilíbrio termodinâmico na interface gás/líquido. O balanço de oxigênio ao nível da sonda e na fase líquida (bulk) é dado pelo sistema de equações diferenciais ordinárias de primeiro ordem :

$$\frac{dC_p}{dt} = k_p (C_{O_2} - C_p) \quad (1)$$

$$V_L \frac{dC_{O_2}}{dt} = k_L S (C_{O_2}^* - C_{O_2}) \quad (2)$$

ou

$$\frac{dC_{O_2}}{dt} = k_L a (C_{O_2}^* - C_{O_2}) \quad (3)$$

onde t : é o tempo de análise dinâmica, C_{O_2} a concentração de oxigênio dissolvido no líquido, $C_{O_2}^*$ a concentração de oxigênio dissolvido no líquido na saturação, C_p a concentração de oxigênio indicada pela sonda de oxigênio, e S é a superfície de contato gás/líquido, V_L é o volume do líquido, e a é a área interfacial de contato gás/líquido por unidade de volume de líquido. Considerando as condições de contorno $C_{O_2} = C_p = 0$ a $t = 0$, o sistema de equações (1) e (3) possui uma solução analítica e a expressão teórica da concentração em função do tempo é dado por:

$$\frac{C_p(t)}{C_{O_2}} = \frac{1 - (k_p \exp(-k_L a t) - k_L a \exp(-k_p t))}{k_p - k_L a} \quad (4)$$

O coeficiente volumétrico de transferência $k_L a$ é obtido por otimização a um parâmetro. A identificação das curvas experimentais $C_p(t)$ com a equação (4) permite obter $k_L a$ minimizando a função do erro relativo:

$$F = 2 * \sum \frac{C_{p,e}(t) - C_{p,t}(t)}{C_{p,e}(t) + C_{p,t}(t)} \quad (5)$$

construída sobre uma média de 1000 pontos experimentais. O acordo entre os valores experimentais ($C_{p,e}(t)$) e teóricos ($C_{p,t}(t)$) é satisfatório.

A identificação estática e dinâmica dos regimes de borbulhamento foi realizada respectivamente com uma máquina fotográfica tipo CANON com filmes do tipo KODAK ASA 125 preto e branco e uma máquina filmadora tipo PANASONIC AFX CCD (high speed) Omnimovie VHS HQ.

RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÃO

O efeito da velocidade superficial do gás e da geometria do distribuidor sobre a transferência de massa gás/líquido foi ressaltado por experiências com as diferentes velocidades e distribuidores anteriormente citados.

O efeito do diâmetro dos orifícios sobre o coeficiente de transferência de massa gás/líquido $k_L a$ foi quantificado mantendo constantes, o número de orifícios, o passo entre eles e a velocidade superficial do gás.

A figura 2, mostrando a variação de $k_L a$ em função do diâmetro dos orifícios para $N = 19$ e $L_p = 0,014 \text{ m}$, é um exemplo representativo dos diferentes resultados experimentais obtidos. Ela evidencia uma diminuição do coeficiente volumétrico de transferência de massa com o diâmetro dos orifícios e um aumento com a velocidade superficial do gás. A diminuição do $k_L a$ com o diâmetro dos orifícios (N , L_p e U_G constantes) é explicado em razão da diminuição da velocidade do gás nos orifícios que limita a quebra do fluxo gasoso favorecendo assim bolhas com diâmetro médio elevado ($> 0,005 \text{ m}$) e também retenções gasosas baixas (Domingos et al., 1996). Isto leva a pequenas áreas interfaciais a e conseqüentemente a pequenos

coeficientes volumétricos de transferência de massa gás/líquido $k_L a$.

Função do passo entre orifícios, a coalescência, é um fenômeno que prejudica a área interfacial gás/líquido, pode se manifestar ou ser acentuado ao aumentar-se os diâmetros dos orifícios. A mudança do regime de borbulhamento, identificado pela filmagem em vídeo e fotográfica, é uma identificação forte desta manifestação. A figura 2 é um exemplo concreto desta situação. A $U_G = 0,03$ m/s e $d_o = 0,0005$ m, o regime observado é homogêneo, com a característica de apresentar bolhas uniformes ao longo do comprimento e do raio da coluna. Passando ao diâmetro $d_o = 0,001$ m, o regime torna-se heterogêneo, caracterizado pela presença de bolhas grandes misturadas com bolhas pequenas, e conseqüentemente o $k_L a$ diminui. A $U_G = 0,07$ m/s e $d_o = 0,0005$ m, o regime de borbulhamento observado é heterogêneo, mudando para um diâmetro de orifícios de $0,001$ m, o regime torna-se pulsante ou formação de bolhas grandes ($> 0,005$ m) que ocupam quase toda a seção da coluna, com queda do valor de $k_L a$.

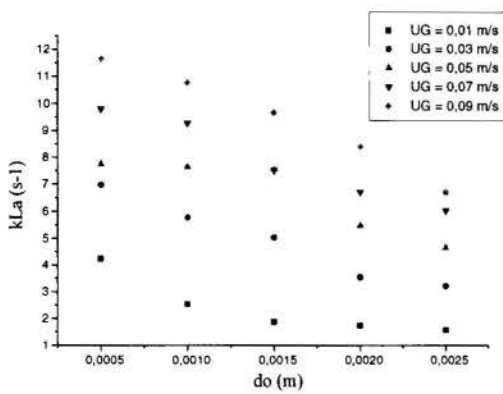


Figura 2 - Efeito do diâmetro dos orifícios sobre $k_L a$

O aumento de $k_L a$ com a velocidade de gás para um distribuidor determinado já foi ressaltado por vários trabalhos da literatura (Alvarez-Cuena et al., 1980; Wilkinson et al., 1994).

O efeito do passo entre os orifícios do distribuidor (L_p) sobre o coeficiente volumétrico de transferência de massa $k_L a$ foi analisado mantendo-se constantes o número de orifícios (N) e seus diâmetros (d_o) para uma determinada velocidade superficial do gás. Ao fixar a velocidade U_G , o número de orifícios, o seu diâmetro, estamos também mantendo constante a velocidade do gás nos orifícios para todos os distribuidores. Nestas condições, a quebra do fluxo gasoso em bolhas é também a mesma para todos os distribuidores e o coeficiente volumétrico $k_L a$ fica exclusivamente dependente da distribuição do gás através da seção da coluna. Espera-se que uma área interfacial maior seja obtida para distribuidores cuja passo entre orifícios permita uma distribuição mais uniforme dos orifícios na superfície da placa perfurada reduzindo assim ao máximo a coalescência das bolhas formadas. Analisando os resultados experimentais obtidos, a figura 3 apresentando a variação de $k_L a$ em função do passo L_p para $N = 19$ e $d_o = 0,001$ m é um exemplo representativo do que pode ser obtido, determinam-se para o número de orifícios estudado, o passo entre orifícios que produz o maior $k_L a$.

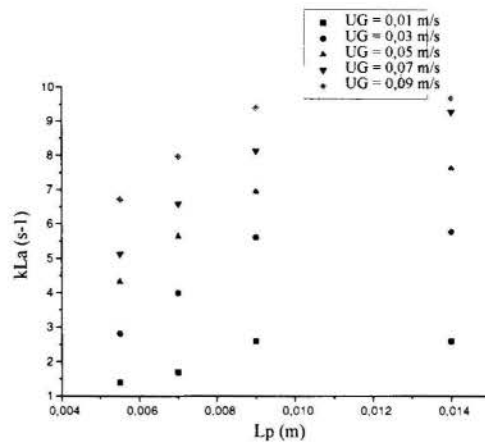


Figura 3 - Efeito do passo entre os orifícios sobre $k_L a$

Um resumo dos resultados é fornecido na tabela 1. Como previsto, os passos entre os orifícios indicados pela referente tabela correspondem exatamente aqueles passos onde os orifícios são melhor distribuídos em toda superfície da placa perfurada.

Tabela 1 - Passo entre os orifícios otimizado em função do número de orifícios do distribuidor.

N	7	14	37	61	91
$L_p \cdot 10^3$ (m)	14	14	9	7	5,5

Domingos et al., 1996, estudando o efeito do passo L_p sobre a retenção gasosa usando os mesmos distribuidores chegaram a mesma conclusão: para cada número de orifícios N , são os mesmos valores de L_p (tabela 1) que também fornecem os maiores valores da retenção gasosa.

O efeito do número de orifícios da placa perfurada sobre o $k_L a$ na coluna de borbulhamento foi analisado fixando-se, para cada velocidade superficial do gás, o diâmetro dos orifícios e o passo entre eles. O aumento do número de orifícios tem como consequência dois efeitos antagônicos. O primeiro consiste em diminuir a velocidade do gás nos orifícios, devido ao crescimento da área livre do distribuidor, a qual reduz a quebra do fluxo gasoso e, conseqüentemente, provoca o aumento do tamanho das bolhas, resultando numa diminuição da área interfacial a . O segundo efeito conduz a uma repartição mais uniforme do fluxo gasoso através da seção da coluna, permitindo a redução da coalescência das bolhas, resultando em um aumento da área interfacial a . Como estes efeitos provocam características antagônicas deve haver um número de orifícios que combinado ao passo que entre eles otimiza estes efeitos, oferecendo um valor da área interfacial mais elevado que os demais. A figura 4 apresentando a variação de $k_L a$ em função do número de orifícios para $d_o = 0,0005$ m e $L_p = 0,0055$ m é um exemplo representativo dos diferentes resultados experimentais obtidos.

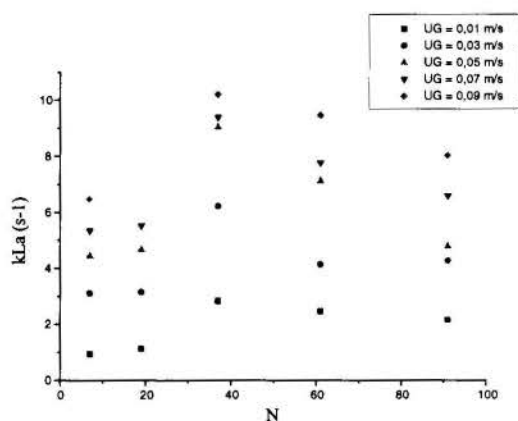


Figura 4 - Efeito do número dos orifícios sobre $k_{L,a}$

A análise dos diferentes resultados conduz a conclusão seguinte: para um passo entre orifícios maior que 0,0045 m e para cada diâmetro de orifícios estudado, ao fixar uma velocidade superficial do gás determinada, há um número de orifícios que maximiza o valor de $k_{L,a}$ para aquele conjunto. Os valores de N otimizados com os respectivos valores de L_p e de diâmetro do estão indicados na tabela 2.

Tabela 2 - Número de orifícios (N) otimizado em função do passo (L_p) e do diâmetro (d_o).

$d_o \cdot 10^3$ (m)	0,5	0,5	1	1	1,5	1,5	2	2	2,5	2,5
$L_p \cdot 10^3$ (m)	5,5	7	5,5	7	5,5	7	5,5	7	5,5	7
N	37	19	61	19	37	61	61	37	61	37
	19	19	19	19	19	19	19	7	19	7

Domingos et al. (1996), analisando o efeito do número de orifícios N sobre a retenção gasosa nas mesmas condições operacionais e para os mesmos distribuidores encontram os mesmos resultados indicados na tabela 2.

Tsuchiya et al. (1992), estudando placas perfuradas com $d_o = 0,001$ m e N variando entre 19 e 197 em uma coluna de diâmetro interno de 0,4 m, apresentam nos seus trabalhos um aumento da retenção gasosa com N. Nos nossos estudos, comprovamos que existe um número de orifícios N otimizado em relação a um passo determinado, cada diâmetro dos orifícios analisados, que permite de maximizar a retenção gasosa e o coeficiente volumétrico de transferência de massa gás/líquido

CONCLUSÃO GERAL

O estudo do efeito dos diferentes parâmetros geométricos do distribuidor tipo placa perfurada (diâmetro dos orifícios, passo entre os orifícios e número de orifícios) sobre o coeficiente volumétrico de transferência de massa gás/líquido (lado líquido) $k_{L,a}$ permite conduzir às seguintes conclusões:

- O coeficiente volumétrico de transferência $k_{L,a}$ é reduzido a níveis baixos com aumento do diâmetro dos orifícios, com conseqüente aparecimento de bolhas grandes e promoção de fenômenos de coalescência e possível mudança do regime de borbulhamento;
- O coeficiente volumétrico de transferência $k_{L,a}$ aumenta com o passo entre orifícios em conseqüência da redução da coalescência;
- Para cada diâmetro dos orifícios estudado, existe um número de orifícios otimizado que favorece o aparecimento de bolhas menores, devido a relação existente entre a quebra do fluxo gasoso, promovida por uma velocidade elevada do gás nos orifícios (redução do número de orifícios, e pela limitação da coalescência (aumento do número de orifícios) que será tanto acentuada quanto maior for o passo entre os orifícios;
- Para um distribuidor do gás determinado, o coeficiente volumétrico de transferência de massa $k_{L,a}$ aumenta com a velocidade superficial do gás;
- O comportamento dos fenômenos de transferência de massa gás/líquido em uma coluna de borbulhamento ascendente com fase líquida fechada segue exatamente na mesma direção que os resultados obtidos anteriormente em estudos de retenção gasosa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alvarez-Cuenca, M., Baker, C.G.J e Bergougnou, M.A, 1980, "Oxygen mass transfer in bubble column", chem. Eng. Sci, Vol 35, pp. 1121-1127.
- Domingos, D.S.H, Abreu, C. A. M, Knoechelmann, A. e Benachour, M.,1996, "Estudo do efeito do distribuidor do gás sobre o comportamento hidrodinâmico em coluna de borbulhamento ascendente", 11º Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Rio de Janeiro, Brasil.
- Tsuchiya, K e Nakamishi, O., 1992, "Gas hold-up behaviour in a tall bubble column with perforated plate distributors", chem. Eng. Sci, Vol. 47, pp. 3347-3354.
- Wilkinson, P.M, Haringe, H., Van Dierendonck, L. L., 1994, "Mass transfer and bubble size in a bubble column under pressure", Chem. Eng. Sci, Vol 49, pp. 1417-1427.

SUMMARY

Mass transfer studies in ascendent gas/liquid bubble column were realized to measure, essentially, the volumetric gas/liquid mass transfer coefficient (liquid-side) $k_{L,a}$ as function of the superficial gas velocity (U_G) and of the geometric parameters of the perforated plate distributor identified by the diameter (d_o), number (N) and pitch (L_p) of the holes. The 95 distributors were analyzed for a superficial gas velocity in a range of 0,01 m/s to 0,09 m/s. The effects of d_o , L_p and N, and U_G on $k_{L,a}$ were correlated with the observed bubble flow regime in the column identified with photographic and video images and with the gas hold-up measurements done in a previous study.



TRANSFERENCIA DE MASA SOLIDO LIQUIDO EN TANQUES AGITADOS

Montiel, Graciela[#]- Avanza, Jorge[#] - Quiroga, Oscar[##]
 [#] Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional del Nordeste
 9 de Julio 1449 - C.P. 3400 - Corrientes - Argentina
 [##] INQUI - Universidad Nacional de Salta-
 Buenos Aires 177 - C.P. 4400- Salta - Argentina

RESUMEN

Se analiza el modelado cinético de la disolución de una partícula sólida en un medio líquido, tomando en cuenta los efectos de las principales variables geométricas y fisicoquímicas que se hallan involucradas al proceso. Los modelos resultantes, de acuerdo con la importancia que muestra el efecto de cada variable, se utilizan para correlacionar datos experimentales de la disolución de partículas de naftaleno en diferentes alcoholes. Los coeficientes de transferencia de masa estimados, son correlacionados a través de $Sh(Re, Sc)$.

INTRODUCCION

El coeficiente de transferencia de masa es una magnitud ingenieril, cuyo conocimiento es imprescindible para calcular las velocidades de transferencia de masa en una interfase, y es muy utilizado en el análisis de procesos tales como destilación, absorción, extracción, lixiviación, secado y reacciones químicas heterogéneas. Su valor se calcula sobre la base del análisis dimensional por medio de correlaciones que vinculan al número de Sherwood con los números de Schmidt, de Reynolds y/o de Grashoff, dependiendo del hecho que la velocidad de la transferencia esté controlada por mecanismos de convección forzada o de convección natural, y son específicas para determinados tipos de equipos de procesamiento.

En relación al análisis de sistemas líquido-sólido, cuyo procesamiento tiene lugar en un tanque agitado, es de destacar que para calcular el coeficiente de transferencia de masa existen numerosas correlaciones, tales como las de Hixson y Baum (1941), Humphrey y Van Ness (1957), Barker y Treybal (1960), Nagata y col. (1960), entre otras. La mayoría de ellas tienen en común el hecho de que el coeficiente de transferencia de masa ha sido estimado de datos experimentales provenientes de la disolución de sólidos en líquidos, y difieren principalmente en los criterios que ha adoptado cada autor para definir la velocidad y la longitud característica del sistema, parámetros que están asociados directamente al espesor y las características de la capa límite que rodea a las partículas sólidas.

El hecho de no tenerse en cuenta en las ecuaciones de correlación todos los parámetros físicos- químicos, geométricos y fluidodinámicos que tienen efecto sobre el proceso de transferencia de masa, conduce a la estimación de coeficientes de transferencia de masa "impuros".

En esta comunicación hemos analizado la cinética de la disolución de sólidos en medios líquidos, tomando en cuenta los mecanismos, los factores geométricos y fisicoquímicos que se hallan involucrados. El propósito principal es desarrollar modelos que permitan estimar, de datos experimentales, al coeficiente de transferencia de masa libre de tales factores.

CINETICA DE LA DISOLUCION

Entre los primeros trabajos relativos al modelado cinético de disolución de sólidos en líquidos figura el publicado por Noyes y Whitney (1897), quienes estudiaron la disolución de cilindros rotatorios de cloruro de plomo y de ácido benzoico en agua en un contenedor tanque agitado discontinuo, y haciendo uso del concepto de difusión a través de la capa límite que rodea al sólido, propusieron el siguiente modelo para interpretar la velocidad de disolución de un sólido B en un solvente líquido A:

$$\frac{d\rho_B}{dt} = k' (\rho_B \Omega - \rho_B) \quad (1)$$

Según la ec.(1) la velocidad de cambio que experimenta la concentración másica del soluto en una disolución, ρ_B , es proporcional a la fuerza impulsora que da origen a un flujo másico desde la superficie del sólido reactivo hacia el seno de la fase líquida; y formularon al coeficiente k' proporcional a la relación entre el coeficiente de difusión del soluto y el espesor de capa límite que rodea al sólido.

Si bien es cierto que Noyes y Whitney (1897), durante la programación de sus experimentos, no tuvieron en cuenta la importancia que tiene la extensión de la superficie externa del sólido reactivo sobre la velocidad observada de la transformación, ellos la reconocieron y la tuvieron presente en el momento de calcular al coeficiente de transferencia de masa.

La importancia de la superficie externa, Ω , de la partícula fue explicitada posteriormente por Hixson y Crowell (1931), a través de la ecuación siguiente:

$$\frac{dM}{dt} = -\Omega k_c (\rho_B \Omega - \rho_B) \quad (2)$$

Estos autores tomaron en cuenta la variación que experimenta Ω durante la disolución, y a tal efecto la expresaron en función de M , para el caso de partículas esféricas: $\Omega = \Omega^0 (M/M^0)^{2/3}$. Por sustitución de Ω en la ec.(2), e integración con ρ_B constante, obtuvieron:

$$\frac{\Omega^0 k_c \rho_{B\Omega} t}{3M^0} = 1 - \left[\frac{M}{M^0} \right]^{1/3} \quad (3)$$

la cual es conocida como "ley de la raíz cubica".

Hacemos notar que si la disolución de un sólido en un líquido se experimenta en un contactor tipo tanque agitado discontinuo, entonces las masas del soluto y del sólido reactivo quedan vinculadas entre sí:

$$M^0 - M = M_B = V_L \cdot \rho_B \quad (4)$$

Con el correr de los años este modelo no ha experimentado modificaciones sustanciales. Mas bien se nota que en él se introdujeron explícitamente los efectos que tienen, sobre la velocidad observada de la disolución, las distintas variables físicas y químicas involucradas.

En lo que sigue, adoptaremos como ecuación fundamental del modelado la expresión propuesta por Quiroga y col.(1994):

$$\frac{dX}{dt} = \frac{m_B N_B \Omega}{M^0} \quad (5)$$

donde el grado de transformación del sólido reactivo es definido como:

$$X = \frac{M^0 - M}{M^0} \quad (6)$$

quedando adjunta a la ec.(5) la siguiente hipótesis : "*la variación de masa de la partícula reactante se debe únicamente a la interacción fisicoquímica que experimenta con el fluido que la rodea, quedando excluidos los fenómenos: disgregación o rotura de la partícula; y aglomeración o sinterización con otras partículas*".

SUPERFICIE EXTERNA

El cambio que experimenta la extensión de la superficie externa de una partícula no porosa, ya sea en un proceso de disolución o en uno de reacción química heterogénea no catalítica, depende de la forma inicial de la partícula, de la rugosidad de su superficie y de su grado de reactividad. Todo ello contribuye a que en la generalidad de los casos el modelado resulte complejo.

En el caso de partículas no porosas, que se transforman conservando su forma inicial, y presentan una superficie no rugosa con un grado de reactividad independiente del tiempo y de las coordenadas internas de la partícula, la extensión de la superficie externa puede ser calculada en función de X, mediante:

$$\Omega = \Omega^0 (1 - X)^p \quad (7)$$

en la que el valor del coeficiente p está asociado a la forma de la partícula : p = 2/3 , esferas; p = 1/2 , agujas; p = 0 , discos o placas planas. La ec. (7) es exacta sólo para partículas esféricas, y resulta una muy buena aproximación para cilindros alargados, discos y placas planas.

FLUJO MOLAR

El flujo molar medio N_B es calculado comúnmente mediante la "ley de transferencia de masa de Newton", que formularemos aquí como :

$$N_B = k_c (C_{B\Omega} - C_B) \quad (8)$$

En los casos de disoluciones de partículas no porosas, para evaluar $C_{B\Omega}$ suele adoptarse frecuentemente el criterio que utilizaron Noyes y Whitney (1897) , generalizado posteriormente por Bird y col. (1964). Este criterio consiste en suponer que $C_{B\Omega}$ es igual al valor que tiene la concentración de saturación de soluto B en el solvente A, es decir $C_{B\Omega} = C_{B^*}$; y, expresaremos la ec.(8) del siguiente modo:

$$N_B = k_c (C_{B^*} - C_B) \quad (9)$$

La ec.(9) con C_{B^*} constante, ha sido empleada en numerosas investigaciones relativas a la disolución de sólidos no porosos, pero deberá tenerse en mente que esta ecuación es válida sólo cuando C_{B^*} se alcanza instantáneamente, y su valor es independiente del tiempo y de las coordenadas internas de Ω .

EFFECTO DE LA VARIACION DE VOLUMEN SOBRE LA FUERZA IMPULSORA

La variación que experimenta V_L durante la disolución fue estudiada por Wilhelm et al.(1941), quienes propusieron el siguiente modelo:

$$V_L = \left[1 + \frac{\alpha M^0 X}{M_B^*} \right] V_A \quad (10)$$

sujeto a la restricción :

$$V_L^* = (1 + \alpha) V_A \quad (11)$$

cuyo coeficiente de expansión lineal de volumen, α , puede calcularse mediante la siguiente expresión:

$$\alpha = \frac{\rho_A - \rho_L^*}{\rho_L^*} + \frac{\rho_A M_B^*}{\rho_L^* M_A} \quad (12)$$

donde: ρ_L^* , es la densidad de la solución en el punto de saturación; ρ_A , V_A y M_A , son la densidad, el volumen y la masa del solvente, respectivamente. Para la generalidad de las soluciones, los valores de α se hallan comprendidos entre 0 y 0.1, y en muy pocos casos se presentan valores menores que 0.

Tomando en cuenta la definición de concentración molar:

$$C_B = \frac{M_B}{m_B V_L} = \frac{M^0 X}{m_B V_L} \quad (13)$$

combinando (6) , (10) y (13) obtenemos

$$C_B = \frac{C_{B^*} (1 + \alpha) Y X}{1 + \alpha Y X} \quad (14)$$

con:

$$Y = \frac{M^o}{M_B^*} = \frac{M^o}{m_B C_B^* V_A} \quad (15)$$

resultando Y una variable experimental independiente.

Combinando ahora las ecs.(9) y (14) obtenemos:

$$N_B = \frac{k_c C_B^* (1 - Y X)}{1 + \alpha Y X} \quad (16)$$

la cual debe emplearse sólo en el modelado de disoluciones de sólidos en líquidos, en las que la formación de C_B^* se produce inmediatamente que el sólido se pone en contacto con el solvente líquido, y su valor es independiente del tiempo de contacto y de las coordenadas internas de la partícula. A través de esta ecuación observamos que N_B es función de X; del coeficiente α ; del factor Y, cuyo valor es mayor que cero; y de otros factores que se incorporan a través de k_c . También observamos que para $Y \rightarrow 0$ resulta $N_B = k_c C_B^*$, mientras que para $Y > 1$, el máximo grado de transformación que puede alcanzar la partícula, es $X = 1/Y$, dado que para ese valor de X resulta $N_B = 0$.

Combinando ahora las ecs. (5), (7) y (16), obtenemos

$$\frac{dX}{dt} = \frac{2 m_B k_c C_B^* (1 + Y X) (1 - X)^p}{(1 - p) \rho I^o (1 + \alpha Y X)} \quad (17)$$

con $(\Omega^o/M^o) = [2/(1-p) \rho I^o]$

La ecuación (17) se utiliza para correlacionar datos cinéticos de disolución de partículas sólidas, cuando la formación de C_B^* es instantánea.

En dicha ecuación, k_c puede resultar función de X, a través de las distintas variables que han sido observadas y han quedado explicitadas en las correlaciones $Sh = Sh(Re, Sc)$. Entre todas estas variables, el diámetro de la partícula es función de X, pero se observa que no en todos los casos ha sido adoptado como longitud característica del sistema. En efecto, al analizar las correlaciones que han sido propuestas para calcular el número de Sherwood, específico para el caso que estamos tratando aquí, es fácil observar que se adoptaron diferentes criterios para elegir la longitud característica. Para algunos autores, la longitud característica es el diámetro del tanque, para otros es el diámetro de la turbina o de la paleta, y, hay quienes adoptan el diámetro de la partícula. Esta observación hace que dejemos en suspenso las correcciones de $k_c = k_c(X)$ que deben introducirse en la ec.(17).

EFECTO DEL TIEMPO DE INDUCCION

Existen casos de disoluciones de sólidos en líquidos en los que puede observarse que la formación de C_B^* no es instantánea, sino que requiere un cierto período de inducción. En tales casos, este período puede ser explicado como: "*el tiempo requerido para que el solvente interactue con las moléculas sólidas ubicadas en la superficie interfacial de la partícula reactante, y la migración de moléculas, o iones, del soluto desde esa zona hacia el seno de la fase líquida*". Según esta explicación,

el tiempo de inducción está vinculado a la formación de $C_{B\Omega}$ y su velocidad puede expresarse como:

$$\frac{dC_{B\Omega}}{dt} = k_d (C_B^* - C_{B\Omega}) \quad (18)$$

cuya integración, sujeta a la condición inicial $C_{B\Omega} = C_{B\Omega o}$ en $t = 0$, nos da:

$$C_{B\Omega} = C_B^* [1 - (1 - C^o) e^{-t^*}] \quad (19)$$

con: $t^* = t/t_{in}$, $k_d = 1/t_{in}$, y $C^o = C_{B\Omega o}/C_B^*$; siendo k_d un coeficiente cinético de disolución, dependiente de la temperatura y de la concentración del solvente.

Combinando las ecs. (8), (14) y (19), obtenemos para el flujo molar:

$$N_B = \frac{k_c C_B^* [1 - Y X - (1 + \alpha Y X) (1 - C^o) e^{-t^*}]}{1 + \alpha Y X} \quad (20)$$

y sustituyendo las ecs.(7) y (20) en la (5), obtenemos finalmente:

$$\frac{dX}{dt^*} = \frac{k^* h [1 - Y X - (1 + \alpha Y X) (1 - C^o) e^{-t^*}] (1 - X)^p}{(1 - p) (1 + \alpha Y X)} \quad (21)$$

$$\text{con: } h = \frac{2 m_B k_{c o} C_B^* t_{in}}{\rho I^o} \quad k^* = k_c / k_{c o} \quad (22 a, b)$$

donde k^* , según la correlación que se adopte para k_c , puede resultar una función de X.

EXPERIMENTAL

La disolución de esferas de naftaleno en metanol, etanol y butanol, fue estudiada a distintas temperaturas y velocidad de rotación del impulsor de flujo. Respecto de este último factor, cabe señalar que se realizaron dos tipos de experimentos completamente diferentes, cuyas características principales resumimos a continuación.

Disolución sin agitación

Estos experimentos fueron realizados a los efectos de constatar la presencia de un tiempo de inducción durante la disolución, y a la vez verificar que el proceso no estuviera controlado cinéticamente por la velocidad de disociación de las moléculas de sólido en contacto con el solvente. En estos experimentos la velocidad de la disolución fue seguida por la variación instantánea que experimenta la masa de la partícula, la cual se hallaba sumergida en un volumen grande de alcohol (3.5 litros), sin agitación y termostatizado. Se realizaron experimentos repetidos de disolución en etanol y butanol a 300 K. Los datos experimentales fueron correlacionados por la ec.(17), a los efectos de verificar la hipótesis de "formación instantánea de C_B^* ", y luego por la ec.(21), ambas con $p = 2/3$, $\alpha = Y = 0$, obteniéndose los resultados que se presentan en la tabla 1.

Tabla 1: datos experimentales correlacionados por la ec.(17) y por la ec. (21)

Alcohol	ec.(17)		ec. (21)		t_{in} s
	$k_c \cdot 10^6$ m/s	$s^2 \cdot 10^5$	$k_c \cdot 10^6$ m/s	$s^2 \cdot 10^5$	
Etanol	6.58	2.3	6.88	0.35	27
Butanol	5.80	17.0	7.38	1.33	134

donde s^2 es la varianza asociada a los resultados de regresión. Se observa que la menor varianza corresponde, en ambos casos, a la ec.(21); que el tiempo de inducción del etanol es menor que el del butanol, y que a medida que aumenta su valor, es mayor la diferencia entre las estimas de k_c por las ecs. (17) y (21).

Disolución con agitación

Estos experimentos se realizaron en un reactor tanque agitado discontinuo, termostatzado, a diferentes valores del factor Y. La velocidad de la disolución fue seguida midiendo la concentración de naftaleno en la fase líquida, a diferentes tiempos, por lectura de la absorbancia a 276 nm.

Los datos experimentales fueron correlacionados por la ec. (17), con $p = 2/3$ y $\alpha = 0$, y los valores de Y correspondiente a cada experimento. Los resultados de k_c , para 200 rpm y temperaturas comprendidas entre 278 K y 303 K, son los que figuran en la tabla 2.

Tabla 2: k_c en función de la temperatura absoluta para los distintos alcoholes y las condiciones experimentales explicitadas más arriba.

Alcohol	$k_c = f(T)$ m/s
Metanol	$3.37 \cdot 10^{-4} \exp(-631/T)$
Etanol	$2.64 \cdot 10^{-3} \exp(-986/T)$
Butanol	$1.38 \cdot 10^{-3} \exp(-1252/T)$

Influencia de la definición de la longitud característica sobre k_c

Los coeficientes k_c , estimados por la ec. (17), fueron correlacionados a través del número de Sherwood en función de los números de Reynolds y de Schmidt. Se analizaron y discriminaron, a través de la varianza asociada a cada ecuación de correlación, los distintos criterios que fueron propuestos para definir la longitud y la velocidad característica del sistema. Los mejores resultados se obtuvieron empleando la correlación siguiente:

$$Sh_1 = 4.22 Re_2^{0.443} Sc^{0.38} \quad s^2 = 1.80 \cdot 10^{-4} \quad (23)$$

con:

$$Sh = k_c d_p / D_{AB} \quad (24)$$

$$Re = \rho_L d_p^2 n_r / \mu \quad Sc = \mu / \rho_L D_{AB} \quad (25a,b)$$

Los coeficientes de difusión fueron calculados mediante la ecuación de Wilke [Bird et al. (1964)]:

$$D_{AB} = 7.4 \cdot 10^{-8} \frac{(m_A \phi_A)^{1/2} T}{\mu V_{Bb}^{0.6}} \quad [m^2/s] \quad (26)$$

donde ϕ_A se denomina factor de asociación del solvente y es igual a 1.9 para el metanol, 0.3 para el etanol y 0.25 para el butanol.

El error relativo promedio asociado a la ec.(23), fue 5.27%. A través de esta correlación, observamos que k_c resulta función del diámetro de la partícula, efecto que debería ser tomado en cuenta en las ecs. (17) y (21).

CONCLUSIONES

Experimentalmente hemos comprobado que en algunos procesos de disolución, la formación de C_{B^*} no es instantánea, hipótesis que ha sido utilizada tradicionalmente en el desarrollo de modelos para estimar el coeficiente de transferencia de masa. A través de esta hipótesis, se introduce en muchos casos error sistemático asociado a la estima de k_c , que es mayor a medida que aumenta el tiempo de inducción.

Nomenclatura

A	reactivo fluido
B	reactivo sólido
C_B	concentración molar del soluto B en el seno de la región fluida, kmol/m ³
C_{B^*}	concentración molar de saturación del soluto B, kmol/m ³
$C_{B\Omega}$	concentración molar de soluto B evaluado en Ω , kmol/m ³
D_{AB}	difusividad del soluto B en el fluido A, m ² /s
d_p	diámetro de partícula, m
k_c	coeficiente de transferencia de masa, m s ⁻¹
k_{c0}	coeficiente de transferencia de masa a $t = 0$, m s ⁻¹
k_d	coeficiente cinético de disolución, s ⁻¹
M^o	masa inicial de reactivo sólido B, kg
M_{B^*}	masa de soluto contenida en una disolución saturada, kg
M_B	masa actual de soluto en la disolución, kg
m_B	masa molar de B, kg/kmol
n_r	velocidad de giro del impulsor, s ⁻¹
N_B	flujo molar del soluto B evaluado en Ω , kmol/m ² s
T	temperatura, K
t	tiempo, s
t_{in}	tiempo de inducción, s
t^*	tiempo adimensional, definido igual a t/t_{in}
V_L	volumen de fluido, m ³
V_{bb}	volumen molecular de B, m ³
Letras griegas	
α	coeficiente de expansión lineal de volumen
δ	espesor de película de fluido, m
μ	viscosidad de la fase fluida, kg/m s
$\rho_{B\Omega}$	concentración másica del sólido B en la solución y sobre la superficie Ω , kmol/m ³
ρ_B	concentración másica del sólido B en el seno de la solución, kmol/m ³
ρ	densidad del sólido B, kg/m ³
ρ_L	densidad de la fase fluida L, kg/m ³
ρ_A	densidad del solvente A, kg/m ³
ρ_L^o	densidad de la solución en el punto de saturación, kg/m ³
Ω^o	superficie externa inicial de la partícula reactante, m ²
Ω	superficie externa de la partícula reactante, m ²

Referencias

Barker, J.J. and Treybal, 1960, "Mass transfer coefficients for solids suspended in agitated liquids", A.I.Che.J., 6 (2), 289.

Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N., 1964, "Fenómenos de transporte", Ed. Reverté.

Hixson, A.W. and Baum, S.J., 1942, "Agitation. Performance of propellers in liquid-solids systems", Indust. Eng. Chemistry, 34, (1), 120.

Hixson and Crowell, 1931, Ind. Eng. Chem., 23, 923, 1002-1160.

Humphrey, D.W. and Van Ness, H.C., 1957, "Mass transfer in a continuous-flow mixing vessel", A.I.Che.J., 3 (2), 283.

Nagata, S., Yamaguchi, N. and Adachi, T., 1960, "Mass transfer in agitated liquid-solid systems" Mem. Fac. Eng. Kyoto Univ., 22, 86.

Noyes and Whitney, 1897, Z. Physik. Chem., 3, 869.

Quiroga, O.D., Avanza, J.R., Fusco, A., 1994, "Modelado de transformaciones fluido-sólido reactivo", edición previa, registro N° 67996 en la Dirección Nacional de Derecho de Autor (Argentina)

Whilhem, R.H., Conklin, L.H. and Sauer, T.C., 1941, "Rate of Solution of Crystals", Ind. Eng. Chem., 33, (4), 453.

Abstract

The kinetic models of the dissolution of a solid particle in a liquid is analyzed, considering the effects of the principal geometry and physico-chemical variables which are involved in the process. The resultant models according to the importance of the effect that shows each variable, are using to correlate experimental dates of dissolution of naphthalen particles in different alcohols. The estimated mass transfer coefficients are correlationated through the $Sh = Sh(Re, Sc)$.



ESTUDO DA EFICIÊNCIA DE MURPHREE NUMA COLUNA AGITADA POR PALHETAS ROTATIVAS

Ana P.B. Rabelo; Roberto R. de Souza; Elias B. Tambourgi; João A.F.R. Pereira
Departamento de Sistemas Químicos e Informática
Faculdade de Engenharia Química - Universidade Estadual de Campinas
CP: 6066 - CEP: 13081-970 - Campinas - SP - Brasil



RESUMO

Com a finalidade de melhorar os processos industriais, vem sendo desenvolvidas novas tecnologias, técnica e economicamente mais viáveis que as convencionais. Neste sentido, a extração líquido-líquido desponta como uma opção tecnológica extremamente interessante. Neste trabalho, estudou-se uma coluna de extração agitada por palhetas rotativas. A agitação melhora o contato entre as fases, aumentando a transferência de massa. O objetivo deste trabalho é avaliar a transferência de massa neste tipo de coluna, através da Eficiência de Murphree, analisando a influência de variáveis geométricas e operacionais na eficiência. Foram observadas eficiências da ordem de 90% nas melhores condições de operação.

INTRODUÇÃO

Devido à modernização dos processos industriais e a necessidade de obter-se produtos com melhor qualidade e mais viáveis economicamente, vem ocorrendo nos últimos anos uma grande procura por tecnologias alternativas, econômica ou tecnicamente mais viáveis que as convencionais. Neste sentido, a extração líquido-líquido apresenta-se como um campo tecnológico extremamente interessante. Outras razões que vem estimulando o uso e o estudo da extração líquido-líquido são:

- Perspectivas de economia de energia comparada a outros processos de separação,
- Possibilidade de evitar deterioração pela temperatura que pode ser causada por métodos de separação que usam a energia térmica,
- Desenvolvimento de equipamentos melhores para promover um contato mais efetivo das fases líquidas (Humphrey, 1984).

A extração líquido-líquido é um processo que envolve a transferência de massa entre dois líquidos imiscíveis, tendo a capacidade de realizar separações que não são possíveis por outros métodos. Este processo de separação é baseado na distribuição do soluto entre as duas fases e a miscibilidade parcial dos líquidos.

As relações de equilíbrio de fases são fundamentais para análises quantitativas de processos de extração. As relações de equilíbrio de fases são baseadas em princípios termodinâmicos e representadas por diagramas estabelecidos por leis de distribuição dos constituintes entre as fases.

A escolha entre os métodos de separação é feita de acordo com aspectos econômicos e de características físicas e químicas dos componentes da mistura a ser separada.

Atualmente, a extração líquido-líquido é empregada nos casos onde um outro método de separação seja anti-econômico ou inviável, como nos casos em que os componentes são pouco solúveis, têm baixa volatilidade relativa, são sensíveis à temperatura requerida para a separação, têm pontos de ebulição próximos ou quando o componente desejado é pouco volátil e está presente em pequena quantidade na solução, formam azeótropo ou onde a separação por outros métodos tenha alto custo.

A viabilidade econômica dos processos que empregam a extração líquido-líquido é fortemente influenciada pelos custos do equipamento e pelos custos de recuperação do solvente, já que a operação do extrator em si, não exige grande consumo de energia e também tem baixo custo de manutenção (Hanson, 1968).

O uso de extratores verticais em processos de extração líquido-líquido pode ser justificado pelo fato desses equipamentos ocuparem pequena área, promoverem uma alta eficiência de separação e terem fácil operação e manutenção.

O sistema de escoamento em contra-corrente é o mais comum e é mais eficiente em relação ao uso de solvente. O escoamento em contra-corrente ocorre devido à diferença de densidades entre os líquidos que estão em contato na coluna. A fase mais pesada entra pelo topo da coluna e desce até o fundo da coluna. A fase mais leve entra pelo fundo e sobe até o topo da coluna (Treybal, 1968).

As colunas de contato diferencial são equipamentos mais compactos e ocupam menos área do que outros tipos de contadores (Hanson, 1971). As colunas de contato diferencial podem ser divididas em quatro categorias principais: Colunas baseadas na ação da gravidade (diferença de densidade entre as fases), Colunas Pulsadas, Colunas Mecanicamente Agitadas e Extratores Centrífugos.

O objetivo deste trabalho é desenvolver uma coluna de extração agitada por palhetas rotativas e estudar a transferência de massa neste tipo de coluna, de acordo com a Eficiência de Murphree. É analisada a influência de variáveis geométricas e operacionais na eficiência da coluna.

TRANSFERÊNCIA DE MASSA

O objetivo num processo de extração é efetuar a transferência de moléculas de soluto da fase refinada para a fase extrato (Hanson, 1968).

Quando duas fases que não estão em equilíbrio entram em contato, a taxa de transferência de soluto entre elas depende de quanto as concentrações de soluto nas duas fases diferem dos valores de equilíbrio, fixados pelo coeficiente de distribuição, o qual depende do potencial químico do soluto nas duas fases (Hanson, 1968).

A transferência de massa é proporcional à área interfacial. A área interfacial é função da velocidade e tipo de agitação usada, das densidades das duas fases, da tensão interfacial e da razão entre as fases.

O estudo da transferência de massa neste trabalho, será feito através da Eficiência de Murphree.

Murphree (1925) apresentou a seguinte definição para a eficiência no estudo de operações de separação :

$$E^* = \left[\frac{x_f - x_r}{x_f - x_r^*} \right] \cdot 100 \quad (1)$$

Essa equação é também apresentada por Treybal (1963). Essa definição representa o desvio em relação ao equilíbrio.

Para o uso dessa equação, é necessário calcular as concentrações de equilíbrio do ácido acético nas duas fases.

As condições termodinâmicas para duas fases existirem em equilíbrio são: elas devem estar à mesma pressão e temperatura e que os potenciais químicos de cada componente em cada fase deve ser o mesmo (Prausnitz et al., 1980; Hanson, 1968).

A combinação dos balanços de massa global e por componente com os coeficientes de distribuição permitem que as composições das fases no equilíbrio sejam calculadas (Prausnitz et al., 1980; Hanson, 1968).

Neste trabalho, os cálculos do equilíbrio foram executados por um programa de computador que utiliza o modelo UNIQUAC de predição, proposto por Prausnitz et al. (1980), para o cálculo das condições de equilíbrio.

EQUIPAMENTO E PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Procedimento Experimental. O procedimento experimental usado é constituído, basicamente, em medir as concentrações de ácido acético nas amostras da alimentação e das saídas da coluna, mostrada na figura 1, por titulação com uma solução de hidróxido de sódio de 0,01 N ou 0,1 N, usando-se fenolftaleína como indicador, para cada arranjo geométrico e condição operacional estudados.

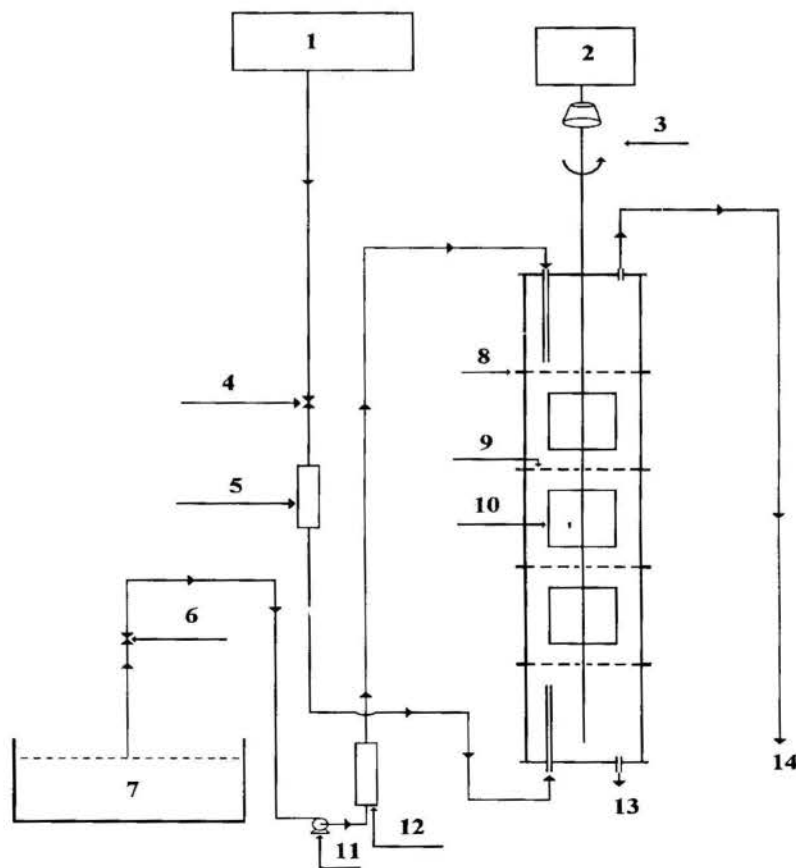


Figura 1 - Coluna de Extração Agitada por Palhetas Rotativas

sendo:

1- Reservatório da fase leve

2 - Motor

3 - Sistema de Rotação

4,6 - Válvulas

5,12 - Rotâmetros

7 - Reservatório da fase pesada

8 - Flange

9 - Distribuidores

10 - Palhetas

11 - Bomba Centrífuga

13 - Saída da fase pesada

14 - Saída da fase leve

Descrição do Equipamento Experimental. A coluna de extração agitada por palhetas rotativas que foi estudada neste trabalho é mostrada na figura 1. A coluna tem 85 cm de comprimento e seu diâmetro interno é 5,6 cm. Ela é constituída de cinco tubos cilíndricos de vidro. No centro da coluna, há um eixo de PVC, que está conectado ao sistema rotacional e ao qual algumas palhetas estão presas. O eixo de rotação é acionado por um motor elétrico de velocidade variável. Em cada seção de agitação, duas palhetas de largura 1,8 cm e 10 cm de altura são conectadas ao eixo, formando um ângulo de 180°.

O arranjo geométrico, que foi alterado nos experimentos, é a área livre das palhetas. O primeiro arranjo tinha palhetas compactas (área livre de 0%) e o segundo arranjo tinha uma área livre das palhetas de 14%.

A fase contínua (água) é introduzida pelo topo da coluna através de uma bomba centrífuga e a fase dispersa (butanol e ácido acético) é alimentada pelo fundo da coluna.

O sistema líquido ternário escolhido foi : água-ácido acético-butanol, o qual forma um sistema ternário tipo I (dois pares de líquidos miscíveis e um par de líquidos parcialmente miscível).

A concentração de ácido acético na alimentação era de aproximadamente 2% (em massa). Esse sistema líquido foi escolhido por ser bastante estudado e assim permitir que comparações entre diferentes equipamentos sejam realizadas, por ser economicamente viável e permitir a obtenção dos valores das concentrações de equilíbrio através de cálculos termodinâmicos por meio de um programa computacional.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Na tabela 1 estão apresentados os valores dos parâmetros geométricos e operacionais que foram estudados neste trabalho.

Tabela 1 - Condições geométricas e operacionais estudadas

PARÂMETROS ESTUDADOS	VALORES ASSUMIDOS
Área Livre das Palhetas (%)	0, 14
Vazão Total de Alimentação (ml/s)	5,5 ; 7,0 ; 8,5
Razão entre as Vazões de Alimentação	9, 6, 3
Velocidade de Rotação (rps)	0, 1, 2, 3, 4

Usando-se os valores das concentrações de equilíbrio, que foram obtidas através de um programa de computador que utiliza o modelo UNIQUAC de predição, e as concentrações de

entrada e saída da fase refinada na equação (1), que é a definição da Eficiência de Murphree, o comportamento que será descrito abaixo foi observado.

1. Velocidade de Rotação das Palhetas. Foi observado que ocorre um aumento da eficiência com o aumento da velocidade de rotação das palhetas, sendo que este aumento é mais acentuado para velocidades de rotação mais baixas (de 0 a 2 rps). Para velocidades maiores, ocorreu um aumento da eficiência, porém pouco acentuado. Isso pode ser observado na figura 2.

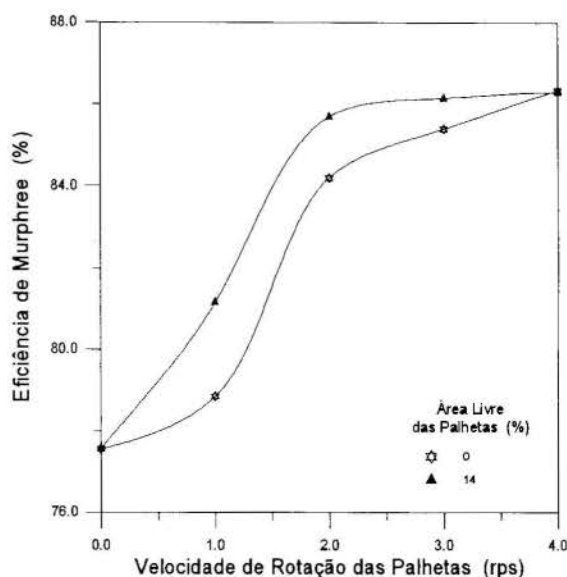


Figura 2 - Eficiência de Murphree em função da velocidade de rotação das palhetas parametrizada na área livre das palhetas.

Este comportamento ocorre porque o aumento da agitação, inicialmente melhora a mistura entre as fases e aumenta a área interfacial, devido à diminuição no tamanho médio das gotas e com isso há um aumento na taxa de transferência de massa. Porém, esse efeito não continua indefinidamente. Primeiro, há um limite para o aumento da área interfacial que pode ser obtido. Segundo, abaixo de um certo tamanho de gotas, estas começam a se comportar como esferas rígidas sem circulação interna. Por causa disso, a transferência de massa no interior das gotas ocorre pelo lento processo de difusão molecular. Além disso, foi observado durante os experimentos que velocidades de rotação das palhetas muito altas provocaram um aumento na resistência ao escoamento, imposta pelas palhetas e isso impedia ou retardava a ascensão das gotas da fase dispersa ao topo da coluna, prejudicando a transferência de massa. Velocidades de rotação muito altas podem provocar o retorno axial da fase dispersa (a fase dispersa é "carregada" pela fase contínua numa direção contrária ao escoamento inicial) e da fase contínua (a fase contínua é "carregada" pela fase dispersa). As taxas de extração são severamente reduzidas por esses dois fenômenos.

Os resultados mostrados na figura 2 foram obtidos mantendo-se constantes a razão entre as vazões de alimentação em 6 e a vazão total de alimentação em 7 ml/s.

2. Razão entre as Vazões de Alimentação. Na figura 3, nota-se um aumento da eficiência com o aumento da razão entre as vazões de alimentação. Isso significa que o sistema se

aproxima do equilíbrio, o que é verificado pelo aumento da Eficiência de Murphree. A principal razão para este efeito é que uma maior quantidade de solvente pode extrair mais soluto, porque há mais solvente em contato com o soluto.

Os resultados mostrados na figura 3 foram obtidos mantendo-se constantes a área livre das palhetas em 14% e a vazão total de alimentação em 5,5 ml/s.

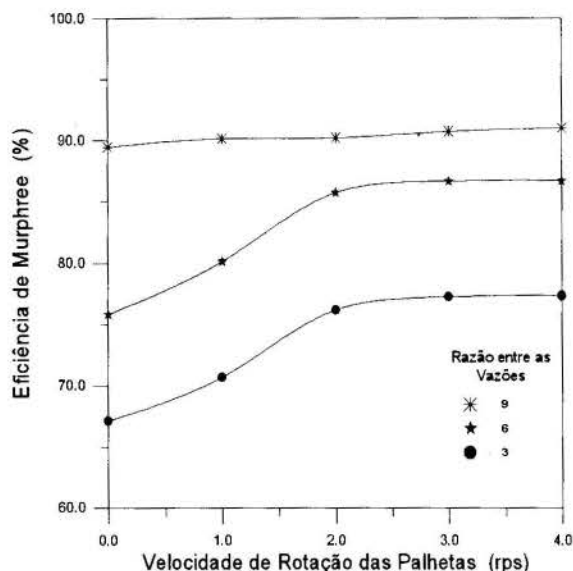


Figura 3 - Eficiência de Murphree em função da velocidade de rotação das palhetas parametrizada na razão entre as vazões de alimentação.

3. Vazão Total de Alimentação. Na figura 4, pode ser visto que ocorre um aumento da Eficiência de Murphree com o aumento da vazão total de alimentação para altas velocidades de rotação (acima de 2 rps) e o comportamento inverso para baixas velocidades de rotação. nota-se também, o aumento da Eficiência de Murphree com o aumento da velocidade de rotação das palhetas.

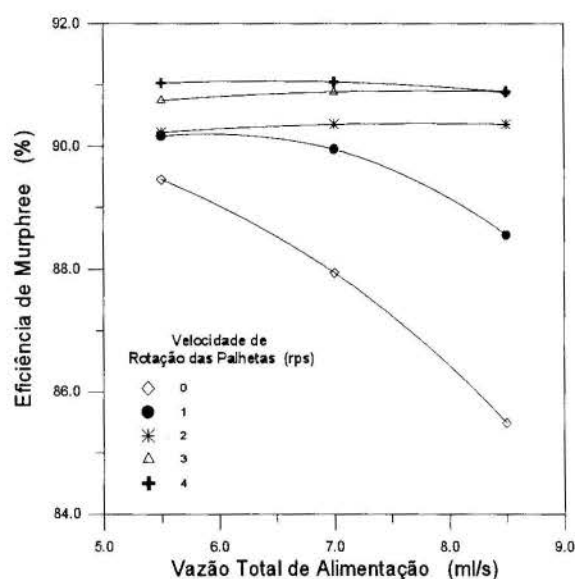


Figura 4 - Eficiência de Murphree em função da vazão total de alimentação parametrizada na velocidade de rotação das palhetas.

Para velocidades de rotação das palhetas baixas (entre 0 e 1 rps), o aumento da vazão total de alimentação diminui a eficiência, ou seja, o sistema se encontra mais afastado do equilíbrio. Isso ocorre porque o aumento da vazão total de alimentação faz com que o tempo de contato entre as fases seja menor e isso faz com que o sistema se mantenha mais afastado do equilíbrio. Com velocidades de rotação das palhetas mais elevadas (acima de 2 rps), o aumento da mistura e da turbulência promovidos pela agitação mais intensa, faz com que o tempo de contato entre as fases aumente e com isso, a transferência de massa também aumente, sendo assim, o sistema tende a se aproximar mais do equilíbrio.

Os resultados mostrados na figura 4 foram obtidos mantendo-se constantes a razão entre as vazões de alimentação em 9 e a área livre das palhetas em 14%.

4. Área Livre das Palhetas. Na figura 2, pode-se notar que ocorre um aumento na eficiência com o aumento da área livre das palhetas. O aumento da área livre das palhetas faz com que a superfície de contato entre as fases e a turbulência no interior da coluna aumentem. Esses fatores melhoram a mistura e reduzem o tamanho médio das gotas, além de aumentar o tempo de contato entre as fases. Assim, eles favorecem a transferência de massa. Com isso, a Eficiência de Murphree tende a aumentar.

CONCLUSÕES

Com este trabalho, pode-se concluir que com esse tipo de coluna pode-se conseguir eficiências de separação bastante altas, chegando a aproximadamente 90%, quando operando em condições adequadas, como foi verificado nos experimentos com o sistema líquido ternário escolhido : água-ácido acético-butanol.

Notou-se que efeitos contrários à transferência de massa ocorrem na coluna a altas velocidades de rotação (acima de 3 rps), tais como: retorno axial da fase dispersa e da fase contínua, aumento da resistência ao escoamento imposta pelas palhetas.

Verificou-se que o aumento da velocidade de rotação das palhetas, da razão entre as vazões de alimentação (vazão da fase contínua pela vazão da fase dispersa), da vazão total de alimentação e da área livre das palhetas atuam de maneira positiva na transferência de massa, para baixas velocidades de rotação das palhetas.

É importante salientar que foi verificado que nem sempre o aumento da velocidade de rotação das palhetas favorece a transferência de massa, como também acontece com o aumento da vazão de alimentação. A eficiência de separação é dependente do conjunto de condições geométricas e operacionais utilizadas e não das condições de maneira individual.

Para esta coluna, operando com o sistema líquido ternário escolhido e as condições geométricas e operacionais apresentadas, as melhores condições operacionais são:

- Área Livre das Palhetas : 14%
- Velocidade de Rotação das Palhetas : 3 rps
- Razão entre as Vazões de Alimentação : 9
- Vazão Total de Alimentação : 8,5 ml/s

Nessas condições, ocorreu um aumento mais acentuado na eficiência de transferência de massa.

NOTAÇÃO

E^* = Eficiência de Murphree

rps = rotações por segundo

V_C/V_D = razão entre as vazões de alimentação (vazão da fase contínua pela vazão da fase dispersa)

x_F = fração molar de ácido acético na alimentação

x_T = fração molar de ácido acético na fase refinado (saída)

x_T^* = fração molar de ácido acético na fase refinado no equilíbrio

REFERÊNCIAS

Hanson, C., 1968, "Solvent Extraction", *Chemical Engineering*, pp. 77 - 98.

Hanson, C., 1971, "Recent Advances in Liquid-Liquid Extraction". 1ª ed., Pergamon Press Ltd., Oxford.

Humphrey, J. L., Rocha, J. A., and Fair, J. R., 1984, "The essentials of extraction", *Chemical Engineering*, pp. : 76 - 95.

Murphree, E.V., 1925, "Rectifying Column Calculations - With Particular Reference to N Component Mixtures", *Industrial and Engineering Chemistry*, número : 17, Vol. 7, pp. 747 - 750.

Prusnitz, J., Anderson, T., Grens, E., Eckert, C., Hsieh, R., and O'Connell, J., 1980, "Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria", Prentice-Hall, New Jersey.

Treybal, R. E., 1963, "Liquid Extraction", 2ª ed., McGraw-Hill, New York.

Treybal, R. E., 1968, "Mass Transfer Operations", 2ª ed., McGraw-Hill, New York.

ABSTRACT

Owing to need to improve and to modernize industrial processes, new technologies have been developed that are technical and economically better than the conventional. So, liquid-liquid extraction emerges as a technological option very interesting. In this work, a rotating impellers mechanically agitated extraction column was studied. Agitation improves the phase contact, increasing the mass transfer. Among the equations that express the mass transfer efficiencies, the Murphree Efficiency was chosen to be used. The main objective of this work is to evaluate the mass transfer in this kind of column, by means of Murphree Efficiency, analysing the influence of geometric and operational parameters on the efficiency in the column



ISOTHERMS OF MAIZE AND SOYBEANS STUDY OF THE GAB EQUATION AT DIFFERENT TEMPERATURES

María C. Gely ^{*}, Sergio A. Giner [#]

^{*} Departamento de Ing. Química, Facultad de Ingeniería, UNC
Avda. del Valle 5737-(7400) Olavarría-Prov. de Buenos Aires-Argentina
[#] CIDCA- Fac. de Cs. Ex. UNLP y Fac. de Ing. de UNLP
Investigador CICPBA
Calle 47 y 116- (1900) La Plata-Prov. de Buenos Aires-Argentina



SUMMARY

The objective of the present work was to model the temperature (T) dependence of sorption isotherms of maize and soybeans with the GAB equation. It has three parameters, and the preliminary fittings showed that all vary irregularly with T. For this reason instead of modeling the temperature dependence of each parameter, the GAB equation was fitted to an isotherm at a reference temperature (T_r), and the parameters so obtained were considered valid at other T values. Therefore, the temperature dependence was confined to a multiplier of the whole equation whose value is 1 at T_r , and that followed a two-parameter, quadratic-dependence that decreased with T, so the final form of this modified GAB equation had five parameters. The advantages of using well-founded equations such as GAB is discussed.

INTRODUCTION

Most grains are harvested with moisture contents (m.c.) above safe storage values to decrease harvesting losses and to free the fields earlier for another crop. Therefore, grains must be artificially dried and cooled to avoid microbial development and hence spoilage.

Mathematical models for drying simulation are nowadays widely used in post-harvest research; in these models, the grain equilibrium moisture content (e.m.c.) plays a very important role in the prediction of the drying rate since grain m.c. tends to the e.m.c. after a long exposure to air of given temperature and relative humidity (RH). The e.m.c. can also be defined as the m.c. value for which water vapour pressure in the grain equals the partial pressure of vapour in the air (Parry, 1985).

Although many equations have been presented to relate e.m.c. and RH at equilibrium, few of them have a sound physical basis and even less deal successfully with the effect of temperature on e.m.c.. Examples of the last type are the equations of Henderson Thompson, Day-Nelson, Chung-Pfost, Chen Clayton and the modified Halsey (Iglesias et al., 1976a).

In contrast, the GAB equation is an improved form of the BET expression including a multiplier $k_G (<1)$ of the RH to account for the difference between the heat of sorption of multilayers and that of liquefaction (Dural and Hines, 1993a). A recent review has considered the GAB equation as the most satisfactory theoretical isotherm (Shatadal and Jayas, 1990); Peleg, (1992) indicated that this expression responds to a kinetic model and that its three parameters have physical meaning. However, despite being valid in a wide RH range ($0.1 < RH < 0.9$) (Iglesias et al., 1976b; Bizot, 1983; Aguerre et al., 1989), its usefulness is limited since it does not include the effect of temperature (Jayas and Mazza, 1993). Therefore, the GAB equation can only be used at those temperatures for which its parameters are known.

The objective of this work was to find a simple and accurate

way of including a temperature dependence in the GAB equation. To this end, we employed experimental data for maize (Hall and Rodríguez - Arias, 1958) and for soybeans (Brooker et al., 1992), being the temperature ranges of 4.4-60 °C for the former grain and 5-55 °C for the latter. In both grains, the RH covered was 0.1-0.9.

The temperature-dependent GAB equation developed in this work was compared with the empirical Henderson-Thompson equation, a widely used expression that is a function of temperature.

ISOTHERM EQUATIONS

The GAB equation is as follows

$$M = \frac{M_m C_B k_G RH}{(1 - k_G RH) (1 - k_G RH + C_B k_G RH)} \quad (1)$$

M being the m.c. (decimal, dry basis), RH the relative humidity (decimal), and M_m, C_B and k_G the parameters to be fitted by regression. M_m is the monolayer moisture content (decimal dry basis), a value for which all adsorption sites of the adsorbent are covered by a one-molecule-deep layer of adsorbate. In a review by Shatadal et al. (1990), the authors pointed out that few data was then available for GAB parameters in cereals and oilseeds. In the present work, the Eqn (1), was fitted to the data of M and RH at each temperature for soybean (Fig. 1) and maize (Fig. 2), and the resultant parameters were listed in Tables 1 and 2.

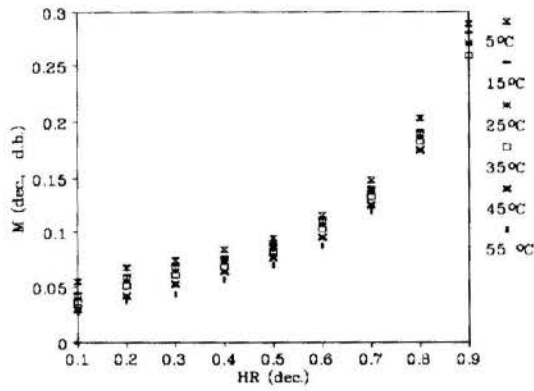


Figure 1 - Experimental isotherms for soybean

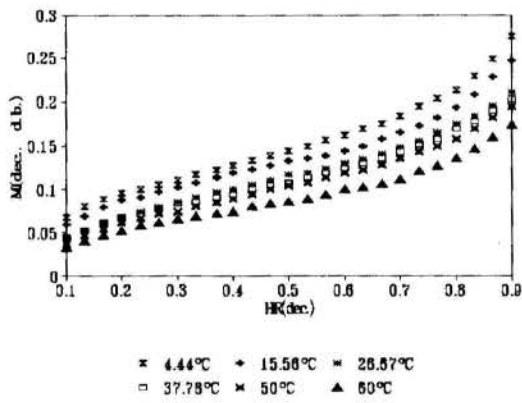


Figure 2 - Experimental isotherms for maize

Table 1 - Parameters of the GAB equation fitted to experimental data of soybean

Temperature(°C)	M_m Dec, db	C_B	k_G
5	0.055	113.164	0.902
15	0.053	39.304	0.904
25	0.052	24.129	0.902
35	0.051	17.155	0.898
45	0.043	16.081	0.947
55	0.036	19.172	1.005

Table 2 - Parameters of the GAB equation fitted to experimental data of maize

Temperature(°C)	M_m dec. db	C_B	k_G
4.4	0.097	29.849	0.711
15.6	0.089	28.308	0.704
26.7	0.087	13.77	0.665
37.8	0.080	16.098	0.687
50	0.078	12.706	0.680
60	0.059	17.399	0.734

For comparison purposes, the Henderson-Thompson equation was also fitted to the data, though, in this case to the whole data pool of M, RH, and T rather than to the data of M and RH at each of the six temperature levels. The expression is:

$$M = 0.01 \left(\frac{-L \ln(1-RH)}{K_H(T+C)} \right)^{\left(\frac{1}{N}\right)} \quad (2)$$

Where T is temperature (°C), and K_H , C and N, the fitting parameters, whose values were included in Table 3.

Table 3 - Parameters of the Henderson-Thompson equation fitted in this work for maize and soybeans

	Maize	Soybean
K_H	$6.57 \cdot 10^{-5}$	$29.8 \cdot 10^{-5}$
C	33.295	136.215
N	2.091	1.199

The statistical parameters of goodness of fit for GAB (Eqn. (1)) and Henderson-Thompson (Eqn. (2)) are listed for each temperature in Table 4 (soybeans) and 5 (Maize). They are the mean of the modulus of percentage errors (MPE) and the correlation coefficient (r^2).

Tables 4 and 5 show that the GAB model (Eqn.(1)) behaves better than the Henderson-Thompson (Eqn.(2)) at each temperature. In addition, it can be observed that both equations predicted better for maize than they did for soybeans.

Table 4 - Comparison of the GAB isotherm equation (Eqn. (1)) and the temperature-dependent Henderson-Thompson (Eqn. (2)) for soybeans

<i>Soybean</i>				
<i>Gab</i>			<i>Henderson - Thompson</i>	
<i>T</i> (°C)	<i>MPE</i>	<i>r</i> ²	<i>MPE</i>	<i>r</i> ²
5	14.59	0.935	18.71	0.879
15	2.46	0.997	16.96	0.918
25	6.09	0.972	19.29	0.905
35	2.64	0.996	14.20	0.943
45	0.87	0.999	13.21	0.934
55	1.55	0.998	15.55	0.818
Average Values	4.7	0.983	16.32	0.9

Table 5 - Comparison of the GAB isotherm equation (Eqn. (1)) and the temperature-dependent Henderson- Thompson (Eqn. (2)) for maize

<i>Maize</i>				
<i>Gab</i>			<i>Henderson-Thompson</i>	
<i>T</i> (°C)	<i>MPE</i>	<i>r</i> ²	<i>MPE</i>	<i>r</i> ²
4.4	1.64	0.993	4.53	0.967
15.6	2.93	0.984	5.37	0.957
26.7	1.41	0.997	2.47	0.989
37.8	0.91	0.999	2.16	0.987
50	1.37	0.998	3.48	0.968
60	2.58	0.993	8.35	0.911
Average values	1.81	0.994	4.39	0.963

Thus, as the GAB equation confirmed its antecedents of accuracy, it was decided to proceed by studying its temperature dependence.

STUDY OF THE EFFECT OF TEMPERATURE IN THE GAB EQUATION

The values of parameters M_m , C_B and k_G of Table 1 and 2 were plotted as a function of temperature in Figures 3,4 and 5, respectively. It can be observed that the parameters vary rather irregularly with temperature, so an independent modeling of each versus temperature would be difficult, leading to grain-specific forms of the GAB temperature dependence.

To resolve this problem, we considered that the parameters fitted at T_r (°C), a reference temperature defined as the nearest value to 25°C for which experimental data is available, are

also valid at other values of T , and that the temperature dependence is confined to a multiplier of the whole equation, F . Thus, the preliminary form of the modified GAB expression is:

$$M = F \frac{M_{mr} C_{Br} k_{Gr} RH}{(1 - k_{Gr} RH) (1 - k_{Gr} RH + C_{Br} k_{Gr} RH)} \quad (3)$$

where M_{mr} , C_{Br} and k_{Gr} are the parameters fitted at T_r , F being the temperature-dependent multiplier. As seen in Tables 1 and 2, T_r was 25°C for soybeans, and 26.7°C for maize. Such T_r values were chosen because most food isotherms are reported at 25°C or near that value.

Thus, Eqn(3) was fitted again to the data of Fig. 1 and

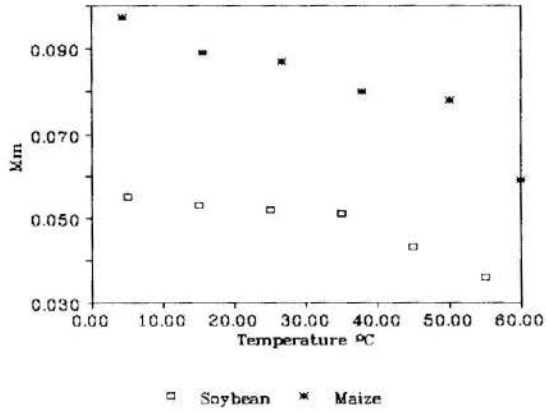


Figure 3 - M_m vs. T

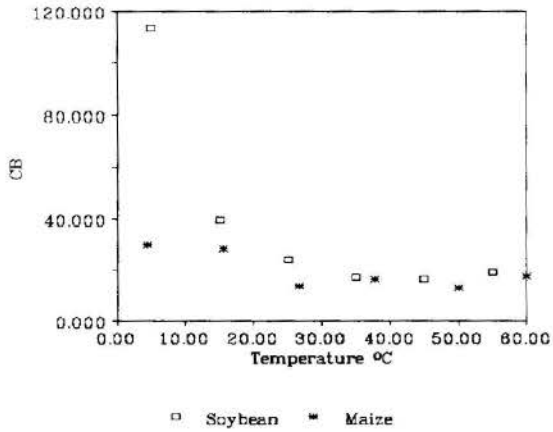


Figure 4 - C_B vs. T

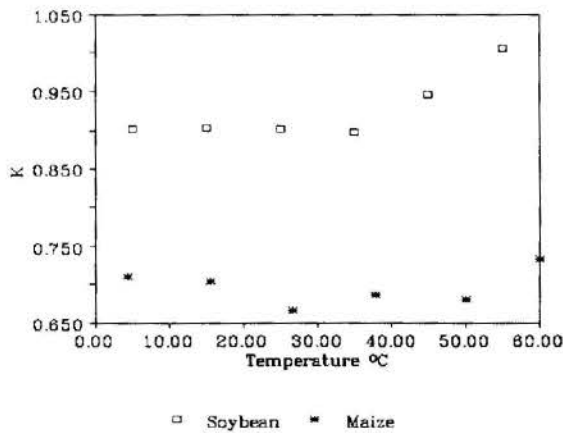


Figure 5 - k_G vs. T

2 except at T_r , where F is necessarily the unity. The values of F so obtained were plotted as a function of temperature in Fig.6, and it can be seen that, in both grains, F shows a continuous decrease

as T increases, with a somewhat nonlinear trend, particularly in soybeans. Therefore, these data can be interpreted in terms of the following adaptive model:

$$F=1+A(T-T_r)+B(T-T_r)^2 \quad (4)$$

this equation can adapt to a linear behaviour as well as to a nonlinear one. Preliminary fittings of the results of Figure 6 showed that the predictions of Eqn.(4) are better than that of a linear fit (i.e., Eqn.(4) without the quadratic term)(results not shown). On the other hand, Eqn.(4) was so written to find $F=1$ for $T=T_r$.

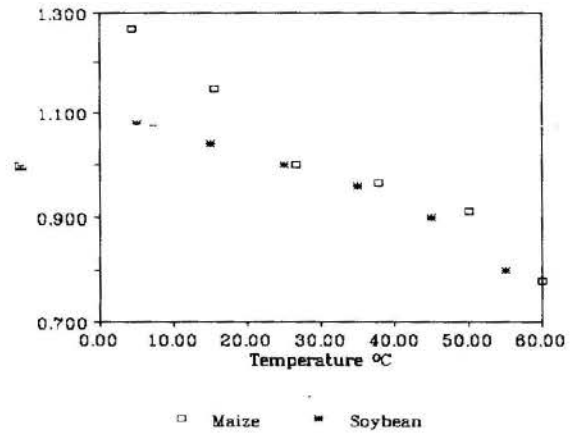


Figure 6 - F vs. T

However, instead of using the preliminary values of A and B for both grains, it was decided to combine Eqn.(3) and (4) and fit the combined equation to the complete pool of data of M , RH, and T for each grain i.e. to the same pool as that used to fit the Henderson-Thompson equation (Eqn.(2)). Thus, the final form of the modified GAB expression is:

$$M=(1+A(T-T_r)+B(T-T_r)^2) \cdot$$

$$\frac{M_{mx}C_{Bt}k_{Gr}RH}{(1-k_{Gr}RH)(1-k_{Gr}RH+C_{Bt}k_{Gr}RH)} \quad (5)$$

The values of A and B obtained by fitting Eqn. (5) to the data pool are presented in Table 6.

Table 6 - Coefficients fitted for the modified GAB model (Eqn. (5))

	Maize	Soybean
A	-0.009127	-0.004735
B	0.000114	-0.000046

Even when Tables 4 and 5 had shown that the original, three-parameter GAB equation (Eqn. (1)) was more accurate than the Henderson-Thompson (Eqn.(2)), at each of the six temperature levels and for both grains, it has to be accepted that the temperature dependence introduced in GAB (Eqn.(5)) could have made it less accurate, so a new comparison had to be made, this time between Eqn.(5) and Eqn.(2). The statistical indicators of goodness of fit for the whole data pool are listed in Table 7.

The table shown that, for maize, both temperature-dependent equations give rather similarly very good predictions while, in soybeans, the modified GAB (Eqn.(5)) was more accurate than Henderson-Thompson (Eqn.(2)). Thus, the extension of the validity of GAB to the temperature range (Eqn.(5)) do not appreciably diminish the inherent accuracy of the original GAB (Eqn.(2)). However, to confirm how even is the prediction of the modified GAB (Eqn.(5)) in the temperature range, it was used at each of the temperature levels where experimental data was available and the results of MPE and r^2 are presented in Table 8.

Table 7 - Comparison of statistical parameters for the fitting of the temperature-dependent GAB(Eqn.(5)) and the Henderson-Thompson equation (Eqn.(2))

	<i>Henderson Thompson Eqn.(2)</i>		<i>Modified Gab (Eqn. (5))</i>	
	<i>Sy (dec. d.b.)</i>	r^2	<i>Sy (Dec. d.b.)</i>	r^2
<i>Maize</i>	0.005906	0.998	0.006653	0.997
<i>Soybean</i>	0.013343	0.989	0.005618	0.999

Table 8 - Statistical parameters for the predictions of the modified GAB (Eqn. (5)) at the temperature levels for which experimental data was available

$T(^{\circ}C)$	<i>Soybean</i>		$T(^{\circ}C)$	<i>Maize</i>	
	<i>MPE(%)</i>	r^2		<i>MPE(%)</i>	r^2
5	7.85	0.955	4.4	4.24	0.969
15	3.52	0.996	15.6	5.73	0.950
25	6.02	0.972	26.7	1.39	0.997
35	2.48	0.995	37.8	5.54	0.951
45	7.53	0.967	50	6.07	0.924
55	10.57	0.931	60	7.22	0.935

The table shows that the temperature-dependence included in the modified GAB (Eqn(5)) is satisfactory, since the predictions are still good at each of the temperature levels, for both grains, and of similar order to those of Tables 4 and 5 for the original GAB at each temperature.

Figures (7) and (8) show predictions of equation (5) together with the corresponding experimental data for three selected temperature levels. This levels do not necessarily show the lowest errors.

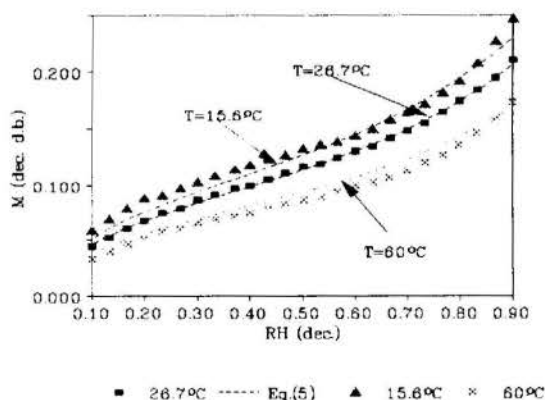


Figure 7 - Comparison of predicted and experimental data of maize

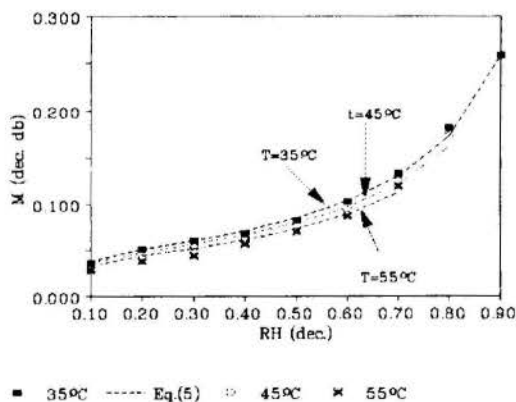


Figure 8 - Comparison of predicted and experimental data of soybean

CONCLUSIONS

- The three-parameter GAB equation fits better the experimental data of maize and soybean than the Henderson-Thompson equation at each of the six temperature levels tested.
- The three parameters of the GAB equation fitted to a reference temperature were kept valid for other values, and the temperature dependence was restricted to a multiplier (F) of the whole GAB equation. F decreased smoothly and rather nonlinearly with temperature, which allowed a further modeling to be made. By this procedure, a temperature-dependent version of the GAB equation was found, which predicted well the experimental data.
- The expression developed in this work could be used for drying models, or for predicting safe moisture conditions for grain storage.

REFERENCES

- Aguerre, R.J., Suarez, C. , and Viollaz, P.E., 1989, "New BET Type Multilayer Sorption Isotherms. Part I: Theoretical Derivation of the Model", *Lebensm.-Wiss.u.- Technol.*, 22, 188 - 191.
- Bizot H., 1983, "Using the 'G.A.B.' Model to Construct Sorption Isotherms", *Physical Properties of Foods 1.*, London, Applied Science Publishers.
- Brooker, D.N., Bakker-Arkema F.W., and Ha. C.W., 1992, "Drying and Storage of Grains and Oilseeds". Published by Van Nostrand Reinhold.
- Dural N. H. and Hines, A.L., 1993, "A New Theoretical Isotherm Equation for Water Vapor-Food Systems: Multilayer Adsorption on Heterogeneous Surfaces", *Journal of Food Engineering*, 20, 75 - 96.
- Hall C.W. and Rodríguez - Arias, J.H., 1958, "Equilibrium Moisture Content of Shelled Corn", *Agricultural Engineering* , August, pp. 466 - 470.
- Iglesias, H.A. and Chirife, J., 1976a , "Prediction of the Effect of Temperature on Water Sorption Isotherms of Food Material", *J.Fd. Technol.*, 11, 109 - 116.
- Iglesias, H.A. and Chirife, J., 1976b, "A Model for Describing the Water Sorption Behavior of Foods", *Journal of Food Science* , Volume 41, 984 - 992.
- Iglesias, H.A.; Chirife, J., *Handbook of Food Isotherms*. Academic Press, Inc. New York (1982).
- Jayas, D.S. and Mazza, G., 1991, "Equilibrium Moisture Characteristics of Safflower Seeds", *Transactions of the ASAE*, Vol 34(5), 2099 - 2103.
- Jayas, D.S. and Mazza, G., 1993, "Comparison of Five, Three-Parameter Equations for the Description of Adsorption Data of Oats", *Transactions of the ASAE*, Vol. 36(1): January - February, pp 119 - 124.
- Parry, J.L., 1985, "Mathematical Modelling and Computer Simulation of Heat and Mass Transfer in Agricultural Grain Drying: A Review", *J. Agricultural Engn. Res.*, 32, 1 - 29.
- Peleg M., 1992, "Assessment of a Semi-Empirical Four Parameter General Model for Sigmoid Moisture Sorption Isotherms", *Journal of Food process Engineering* 16, 21 - 37
- Shatadal, P. and Jayas, D.S., 1990, "Moisture Sorption Isotherms of Grains and Oilseeds", *Postharvest News and Information*, Vol 1 No 6 pp 447 - 451.
- Wilkinson, L. *SYSTAT: The System for Statistics*. Evanston, IL: SYSTAT, Inc., 1986



EVALUACION DE LA ALTURA EQUIVALENTE POR PLATO TEORICO A UN EMPAQUES ESTRUCTURADO NACIONAL



Rosa Hilda Chávez y Arquimides O. Suástegui
Departamento de Estudios del Ambiente
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Km. 36.5 Carretera México-Toluca
Salazar 52045, Estado de México
México.

SUMMARY

The structured packings show very attractive performance characteristics because they offer higher throughput capacity and separative efficiency and lower ratio of pressure drop to theoretical stage of separation than the tray internals or random packings. Those factors give a very favourable separation, low energy consumption and beside low capital and operation costs. There have been developing new equations which represent the bed columns performance. There are still low information about the general desing methods and they are based on objective evaluations of packing performance from the manufacturers. This paper shows the use of the Bravo et al model 1992, which helps to understand the mass transfer in air-water system using a national structured packing built in the Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares and to determine the convenience of to apply this model in this material. It shows graphs of height equivalent to a theoretical plate versus different gas and liquid flows using our experiment information and beside the comparison of the Bravo results.

INTRODUCCION

La separación de productos a partir de mezclas de componentes, es una de las operaciones unitarias más comunes en los procesos químicos industriales. Muchas de las operaciones de separación son del tipo difusional de contacto de fase tales como Absorción y Destilación.

La Absorción es la transferencia de uno o más componentes de una fase gas a una fase líquida en la cual es soluble. Para llevar a cabo estas operaciones se requiere de un aparato cilíndrico vertical llamado columna. Este aparato normalmente contiene dispositivos internos para efectuar el contacto gas-líquido; los dispositivos pueden ser platos o empaques (al Azar o Estructurados), los cuales juegan un importante papel en estas operaciones difusionales.

El uso de columnas empacadas data de muchas décadas. Durante la primera mitad de este siglo fueron diseñadas un tanto toscas y sus aplicaciones generalmente limitadas a sistemas corrosivos o a diámetros de columnas relativamente pequeños (como por ejemplo: en instalaciones de planta piloto). Posteriormente la situación cambió, y con el desarrollo de empaques al azar tales como el anillo Pall, por lo que los diseñadores comenzaron a considerar seriamente el uso de empaques en columnas comerciales.

En los últimos años se ha visto un desarrollo apreciable en la aplicación del empaque al azar, al mismo tiempo la geometría de los empaques ha evolucionado rápidamente desde simples formas de anillos Raschig y monturas Berl hasta multitud de formas sofisticadas ahora disponibles.

Los empaques estructurados fueron introducidos por Stedman, quien cortó piezas de gasa metálica y las colocó en forma horizontal en una columna de laboratorio y en una planta piloto. Estos empaques fueron encontrados muy eficientes para la transferencia de masa en columnas pequeñas. Posteriormente se usaron hojas metálicas en la fabricación de estos elementos estructurados para columnas grandes.

Los empaques estructurados en su forma actual, fueron introducidos a mediados de 1960 a partir del trabajo experimental de los Hermanos Sulzer, Ltd, en Suiza (Huber, 1966 y Billet, 1960), en material de malla y de hojas metálicas de diferentes tipos, formas y tamaños y ofrecidas por numerosas Compañías en el mundo; ellos muestran características muy atractivas de operación, particularmente ofrecen una mayor capacidad y eficiencia y una menor caída de presión y holdup más bajo con respecto a los platos y empaques al azar. Estos factores reducen los costos fijos y los de operación, dando como resultado una mejor separación, un alto rendimiento y un bajo consumo de energía.

Se han desarrollado modelos matemáticos que representan el comportamiento de las columnas empacadas. Hay poca información en la literatura de los métodos de diseños generalizados (Kister, 1993; Spiegel y Meier, 1987; Bravo y colaboradores, 1990 y otros), una aproximación de éstos se basa en gran parte en la experiencia y recomendaciones de los fabricantes.

Con lo anterior, surgió la necesidad de idear nuevas correlaciones y modelos que involucren parámetros fisicoquímicos y geométricos en las columnas empacadas, con el propósito de conocer las ventajas que ofrecen los empaques estructurados para aplicaciones industriales.

Las principales variables de interés que se involucran en los modelos son: capacidad, caída de presión, holdup y transferencia de masa. Los dos primeros dan el diámetro de la columna y los dos restantes la altura del empaque y a su vez la de la columna

SISTEMA DE ABSORCION

El sistema de absorción utilizado consiste en una columna vertical de vidrio pyrex, de 0.0762 m (3 pulg) de diámetro interior y una altura de 1.5 m (59.05 pulg), rellena con empaque estructurado tipo gasa construido en latón de malla del No. 60, con una altura empacada de 1.3m.

Se alimenta una corriente de aire por la parte inferior de la columna suministrada por un compresor. Por la parte superior se alimenta una corriente de agua, ambos flujos a contracorriente.

Este sistema cuenta con la instrumentación necesaria para registrar la caída de presión, los flujos gas-líquido, la temperatura y presión de operación, siendo éstas últimas de 15°C y 525 mm Hg respectivamente. La Tabla 1 muestra las características del empaque y la Tabla 2 muestra las propiedades fisicoquímicas del sistema.

Tabla 1- Información geométrica del empaque nacional

Altura del pliegue.....	h = 5 mm
Lado del canal.....	S = 6 mm
Base del canal.....	B = 8 mm
Diámetro equivalente.....	d _{ep} = 5.3333 mm
Superficie del empaque.....	a _p = 840 m ² /m ³
Fracción de vacío.....	e = 0.966
Angulo del canal de flujo a partir de la horizontal.....	q = 46° deg
Diámetro del empaque.....	D = 73 mm
Material.....	Latón
Malla.....	No. 60

Tabla 2 - Propiedades fisicoquímicas del sistema aire - agua.

Presión de operación =	525 mm Hg
Densidad :	Gas : 0.8478 Kg/m ³ Líquido : 999.13 Kg/m ³
Viscosidad :	Gas : 7.6x10 ⁻⁵ Kg/ m s Líquido : 1.14x10 ⁻³ Kg/m s
Coefficiente de difusión :	Gas : 2.7172x10 ⁻⁵ m ² /s Líquido : 2.5666x10 ⁻⁶ m ² /s

DESCRIPCION DEL MODELO

El modelo de Bravo y Colaboradores 1992 para la transferencia de masa ha sido desarrollado para la predicción y análisis de la operación de columnas de destilación conteniendo elementos de empaque estructurado de tipo regular. Las principales variables que involucran este modelo son: caída

de presión, capacidad máxima de flujo y eficiencia en la transferencia de masa.

Las correlaciones desarrolladas tienen una variable en común que enlaza a todas éstas: el holdup líquido, y son válidas para empaques de una naturaleza corrugada, basadas en la aproximación general de considerar los canales de flujo dentro del empaque, como una serie de canales de pared humedecidas con una geometría que depende del ángulo y tamaño de las corrugaciones.

El canal de flujo de pared humedecidas se considera como una sección transversal del diamante formado, como se indica en la Figura 1. El diamante es exactamente equivalente a un triángulo sin base, y el diámetro equivalente para esta geometría es el lado del triángulo S, el cual es también el lado de la corrugación.

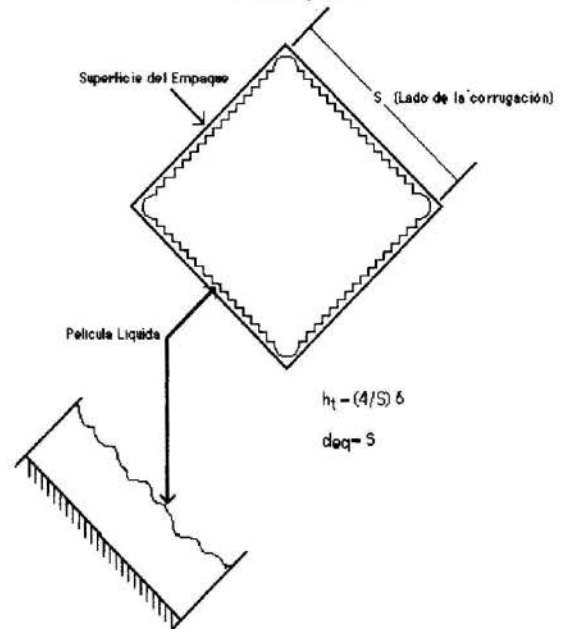


Figura 1 - Sección transversal del canal de flujo del empaque estructurado.

GRAVEDAD.EFECTIVA

La fuerza que actúa sobre el líquido en movimiento ascendente a través del empaque es denominada gravedad. Hay varias fuerzas que se oponen a la gravedad: (1) Empuje del líquido (importante a altas presiones), (2) caída de presión del vapor y (3) arrastre de la película líquida por el vapor. El flujo líquido puede ser considerado similar al flujo líquido de una columna de pared humedecida, como se muestra en la Figura 2.

Un balance de fuerzas en la película líquida como flujos bajo la superficie del empaque puede ser expresado como:

$$\text{Carga neta descendente} = \text{Gravedad de la carga} - \text{Empuje de la carga} - \text{Diferencia de la presión del gas} - \text{arrastre superficial de la carga}$$

$$\rho_L \Delta Z g_{eff} = \rho_L \Delta Z g - \rho_g \Delta Z g - \Delta P - Q \Delta P$$

(1)

donde Q es una constante que relaciona la caída de presión (o velocidad del gas) y la superficie de arrastre, g_{eff} es la gravedad efectiva discontinuada por fuerzas opuestas.

Este balance no toma en cuenta los efectos de arrastre del líquido sobre la superficie sólida. Un reordenamiento del balance de fuerza da la definición de gravedad efectiva:

$$g_{eff} = g \left[1 - \left(\frac{\rho_g}{\rho_L} \right) - K_1 \left(\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right) \left(\frac{1}{\rho_L g} \right) \right) \right] \quad (2)$$

El último término agrupa junto con los efectos de caída de presión y arrastre superficial e incluye la suposición de que el valor de K_1 depende únicamente del tipo de empaque. El valor de la gravedad efectiva tiende a disminuir a presiones altas (densidades de vapor elevadas) y altas cargas debido a altas caídas de presión y arrastre. En el límite, la inundación ocurre cuando $g_{eff} = 0$. Por lo tanto:

$$K_1 = \frac{g (\rho_L - \rho_g)}{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)_{inundacion}} \quad (3)$$

K_1 se espera ser una constante para una forma particular del empaque sin tomar en cuenta el tamaño o características superficiales. Es bien conocido que sistemas que exhiben bajas diferencias en la densidad de fase y también en la inundación, en condiciones de caída de presión más bajas, la forma de la ecuación (3) parece manejar estos factores. Combinando las ecuaciones (2) y (3):

$$g_{eff} = g \left[\frac{(\rho_L - \rho_g)}{\rho_L} \right] \left[1 - \left(\frac{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)}{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)_{inundacion}} \right) \right] \quad (4)$$

El valor seleccionado para la $\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)_{inundacion}$ tiene una fuerte influencia sobre el valor de K_1 . Sobre la base de análisis de datos y por simplicidad así como mantener valores positivos de g_{eff} en todos los tiempos, y para poder calcularla un valor de 1025 Pa/(1.25 in H₂O/ft) fue seleccionado para la caída de presión en la inundación. El valor seleccionado para K_1 adimensional es:

$$K_1 = g \left(\frac{\rho_L - \rho_g}{1025} \right) \quad (5)$$

y

$$g_{eff} = g \left[\frac{(\rho_L - \rho_g)}{\rho_L} \right] \left[1 - \left(\frac{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)}{1025} \right) \right] \quad (6)$$

Estas presiones son válidas para el sistema aire - agua y para los empaques: Intalox 2T, Flexipac, Gempak 2A, Maxpak y Sulzer BX. El valor de K_1 para otros sistemas y otros empaques se obtiene a partir de la ecuación (3.28). Para los empaques estructurados, el máximo valor de la caída de presión estará entre los valores de 900 y 1200 Pa/m.

HOLDUP LIQUIDO

La suposición hecha es que los flujos líquidos están sobre la superficie del empaque como una película. Si la superficie entera está cubierta y no existe líquido suspendido,

entonces el holdup se puede describir en términos del espesor de la película con:

$$h_t = 4 \left(\frac{\delta}{S} \right) \quad (7)$$

donde h_t es el holdup total, el cual comprende componentes estáticos y de operación:

$$h_t = h_{stat} + h_{op} = \left(\frac{4 F_s d_{stat}}{S} \right) + \left(\frac{4 F_o d_{op}}{S} \right) \quad (8)$$

El término F_s es un factor de corrección que considera para todas las superficies no siendo humedecidas cuando únicamente ocurre el holdup estático, F_o representa la corrección correspondiente cuando el flujo líquido está presente.

Para cálculos aproximados, una simplificación de la ecuación (8) es posible:

$$h_t = \frac{4 F_t \delta_{op}}{S} \quad (9)$$

donde F_t es un factor de corrección para el holdup total en términos del área interfacial disponible. La ecuación (3.34) no es válida a velocidades de flujo cero.

El valor de F_t está basado en la correlación de Shi/Mersmann y fue obtenido por ajuste de datos experimentales. La expresión resultante es:

$$F_t = \left[\frac{29.12 \sqrt{We_L Fr_L} S^{0.359}}{Re_L^{0.2} \varepsilon^{0.6} (1 - 0.93 \cos \gamma) (\text{Sen} \theta)^{0.3}} \right] \quad (10)$$

donde:

$$\cos \gamma = 0.9 \quad \text{para } s < 0.055 \text{ N/m}$$

$$\cos \gamma = 5.211 \times 10^{-16.835s} \quad \text{para } s > 0.055 \text{ N/m}$$

El espesor de la película promedio d_{op} durante la operación puede ser definido por una modificación de la ecuación clásica de la película descendente (Bird y colaboradores, 1960) que incorpora las definiciones de la velocidad líquida efectiva y la gravedad efectiva:

$$\delta_{op} = \left[3 \mu_L \frac{U_{LS}}{\left(\rho_L \varepsilon h_t g \left(1 - \left(\frac{\rho_g}{\rho_L} \right) - K_1 \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right) \left(\frac{1}{\rho_L g} \right) \right) \right) \text{Sen} \theta} \right] \quad (11)$$

Combinando la ecuación (9) con la ecuación (10) obtenemos:

$$h_t = \left(4 \frac{F_t}{S} \right)^{2/3} \left(\frac{3 \mu_L U_{LS}}{\rho_L \text{Sen} \theta \varepsilon g_{eff}} \right) \quad (12)$$

VELOCIDADES EFECTIVAS DE FASE

Las velocidades efectivas del gas y el líquido están definidas por:

$$U_{G,eff} = \frac{U_{gs}}{\varepsilon (1 - h_t) \text{Sen} \theta} \quad (13)$$

$$U_{L,eff} = \frac{U_{gs}}{C} h_L \text{ Sen } \theta \quad (14)$$

y la velocidad relativa es:

$$U_r = U_{L,eff} + U_{G,eff} \quad (15)$$

TRANSFERENCIA DE MASA

Esta correlación usa el modelo de las dos resistencias suponiendo el equilibrio termodinámico en la fase interfacial. Los ingredientes básicos del modelo son: el coeficiente de transferencia de masa de la fase gas (o vapor), el coeficiente de la fase líquida y el área efectiva interfacial. El modelo ha sido estructurado de tal manera que las nuevas geometrías del empaque son introducidos y ellos puedan ser acomodados sin mayores cambios en el modelo básico.

El coeficiente de transferencia de masa de la fase gas está basado en el modelo de transporte de la fase gaseosa en columnas de pared humedecidas. Así, combinando los números adimensionales de Sherwood, Reynolds y Schmidt:

$$\left(\frac{k_g S}{D_g} \right) = 0.054 \left[\frac{(U_{L,eff} + U_{G,eff}) \rho_g S}{\mu_g} \right]^{0.8} \left(\frac{\mu_g}{D_g \rho_g} \right) \quad (16)$$

donde la longitud característica S es la dimensión del lado de la corrugación de la sección transversal.

El coeficiente de transferencia de masa de la fase líquida se fundamenta en el modelo de la penetración, pero se reconoce que para algunos sistemas el tiempo de exposición no puede ser tomado como una simple función de la velocidad líquida y del lado de la corrugación, porque la contribución del líquido a la resistencia total es generalmente pequeña en operaciones de destilación. Algunos investigadores han asumido que la resistencia del lado líquido puede ser omitida (ejemplo, Spiegel y Meier, 1987).

Para los casos donde la resistencia es significativa, puede ser utilizada la aproximación de la penetración y modificar el tiempo de exposición:

$$t_e = \frac{C_E S}{U_{L,eff}} \quad (17)$$

donde C_E es un factor ligeramente menor que la unidad y cuantifica aquellas partes del lecho empacado que no estimula una rápida renovación superficial. Experimentos realizados con el sistema oxígeno-aire-agua muestran que para varios empaques conocidos, el coeficiente de transferencia de masa de la fase líquida puede ser calculada por la siguiente relación:

$$k_L = \sqrt{\frac{D_L U_{L,eff}}{\pi S C_E}} \quad (18)$$

AREA INTERFACIAL

La cantidad de superficial disponible en el sistema está directamente relacionado con el holdup líquido y en particular el holdup de operación. La conexión entre el área interfacial y el holdup hace posible una relación entre la eficiencia en transferencia de masa y el holdup. La relación para determinar

el área interfacial esta basada en las investigaciones de Shi/Mersmann:

$$\frac{a_e}{a_p} = F_{SE} \left[\frac{29.12 (We_L Fr_L)^{0.15} S^{0.359}}{Re_L^{0.2} \epsilon^{0.6} (1 - \cos \gamma) (\text{Sen } \theta)^{0.3}} \right] \quad (19)$$

VELOCIDAD DE LA TRANSFERENCIA TOTAL

Sobre las bases de las definiciones convencionales de unidad de transferencia:

$$H_{OG} = H_G + \lambda H_L \quad (20)$$

$$H_{OG} = \frac{U_{gs}}{k_g a_e} + \lambda \left(\frac{U_{Lr}}{k_L a_e} \right) \quad (21)$$

El término λ es la relación de pendientes: línea de equilibrio y línea de operación. Para un punto en la columna donde ambas líneas puedan ser consideradas rectas, un valor de HETP (altura equivalente por plato teórico) puede ser calculado por:

$$HETP = HOG \left(\frac{\ln \lambda}{1 - \lambda} \right) \quad (22)$$

Y el Número de Etapas Teóricas por Altura de Empaque, N/Z , es el inverso de la Ec. (22):

$$\frac{N_t}{Z} = \frac{1}{HETP} \quad (23)$$

ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La eficiencia en transferencia de masa de los empaques estructurados se estudió bajo condiciones de un total mojado en toda su superficie. Se encontró que las relaciones en transferencia de masa desarrollados para flujos a contracorriente en columnas tubulares de pared humedecidas (teoría de la doble película), fueron adecuados para describir los valores de HETP, ya que permitió cuantificar la reducción del HETP en términos del incremento del flujo líquido. Esto confirma la mejora en la capacidad y en la eficiencia separativa de este material estructurado.

En otro sentido se pudo comprobar la misma tendencia en el comportamiento que presenta con los resultados de Bravo y colaboradores.

El modelo de Bravo 1992 ha sido comprendido y desarrollado para predecir el holdup líquido, caída de presión, capacidad de inundación y eficiencia en transferencia de masa para empaques estructurados del tipo metal corrugado. El modelo toma en cuenta la textura de la superficie del empaque y es capaz de diferenciar entre las áreas interfaciales generadas por sistemas acuosos o bien orgánicos.

NOMENCLATURA

- a_e =Superficie efectiva del empaque, m^2/m^3
- a_p =Superficie total del empaque, m^2/m^3
- C_E =Factor de corrección para la renovación superficial.
- d_{eq} =Diámetro equivalente del canal, m
- D_G =Coeficiente de difusión para el gas, m^2/s
- D_L =Coeficiente de difusión para el líquido, m^2/s
- FS =Factor F del flujo gaseoso, $U_{gs} \tau_L^{0.5} / (Kg/m)^{0.5}/s$
- Fo =Factor de corrección del holdup de operación.

F_i =Factor de corrección para el holdup total debido a el área efectiva humedecida.

g =Aceleración de la gravedad, 9.8 m/s^2

g_{eff} =Gravedad efectiva, m/s^2

h_t =Holdup total.

h_{op} =Holdup de operación.

h_{sta} =Holdup estático.

H_G =Altura de una unidad de transferencia de la fase gas, m

H_L =Altura de una unidad de

transferencia de la fase

líquida, m

H_{OG} =Altura de una unidad de transferencia total, en base a la concentración del gas, m

HETP=Altura equivalente por plato teórico

k_g =Coeficiente de transferencia de masa de la fase gas, m/s

k_L =Coeficiente de transferencia de masa de la fase, líquida, m/s

K_1 =Constante.

Q = Constante que relaciona la caída de presión y la gravedad.

S =lado de la corrugación, m

t_e =Tiempo de exposición, modelo de la penetración, s

$U_{G,eff}$ =Velocidad efectiva del gas a través del canal, m/s

U_{gs} =Velocidad superficial del gas a través de la torre, m/s

$U_{L,eff}$ =Velocidad efectiva del líquido a través del canal, m/s

U_r =Velocidad relativa, m/s.

Z =Altura empacada, m.

ΔP = Caída de presión, Pa/m.

ΔZ = Incremento de altura, m.

LETRAS GRIEGAS

γ = Angulo de contacto entre el sólido y la película líquida, grados.

δ = Espesor de la película, m.

Δ =Incremento

ϵ =Fracción de vacío del empaque

θ =Angulo del canal con respecto a la horizontal

grados

λ =Relación de pendientes, línea de operación y línea de equilibrio

μ_G =Viscosidad del gas, Kg/m s

μ_L =Viscosidad del líquido, Kg/m s

ρ_G =Densidad del gas, Kg/m³

ρ_L =Densidad del líquido, Kg/m³

σ =Tensión superficial, N/m.

GRUPOS ADIMENSIONALES

$Fr_L = U_L^2 / (S g)$ =Número de Froude para el líquido.

$Re_g = (U_{gs} S \rho_g) / \mu_g$ = Número de Reynolds para el gas.

$We_{L1} = (U_L^2 \rho_L S) / (\sigma g_c)$ =Número de Weber para el líquido.

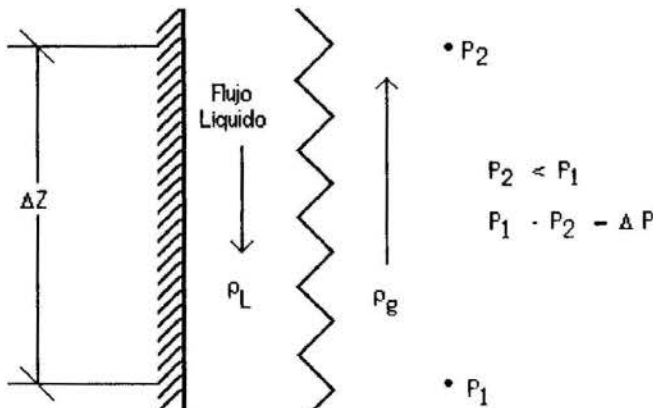


Figura 2 - Flujo de la película líquida bajo la superficie de un elemento de empaque estructurado.

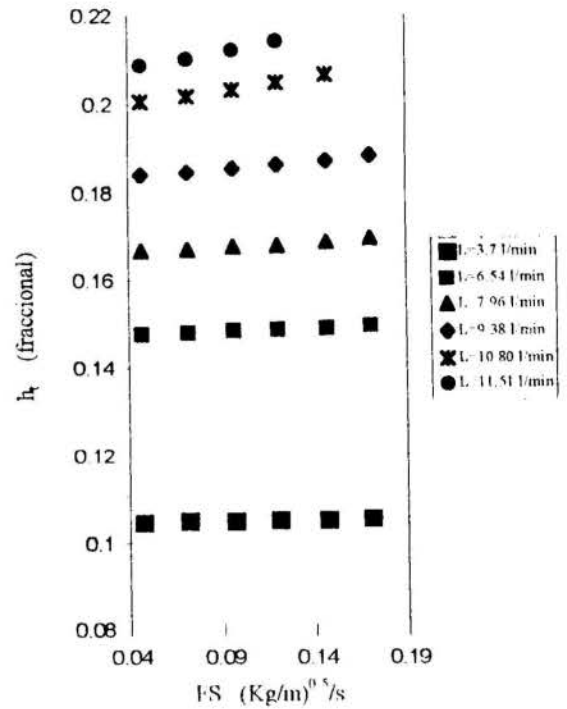


Figura 3 - Holdup líquido vs Factor FS del flujo gaseoso.

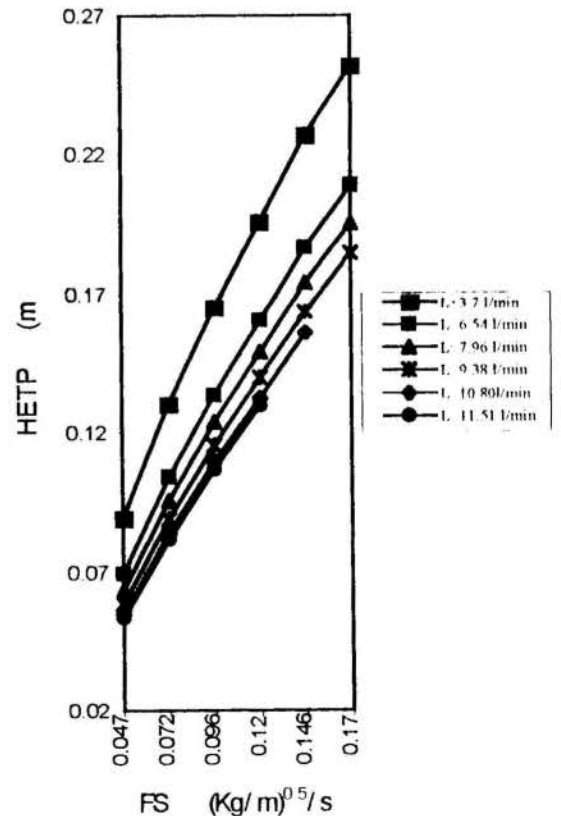


Figura 4 - Altura equivalente por plato teórico vs Factor FS flujo gaseoso.

LITERATURA CITADA

- G. K. Chen, L. Kitterman, 1983. "High-efficiency packings for product separation", CEP.
- W. L. McCabe, J. C. Smith, 1985. "Unit Operations of Chemical Engineering", Mc Graw Hill.
- R. H. Perry, C. H. Chilton, "Chemical Engineer Handbook", Mc Graw Hill.
- R.W. Rousseau, 1987. "Handbook of Separation Process Technology", John Wiley & sons
- J. R. Fair, J. L. Bravo, 1990. "Distillation columns containing structured packing" CEP
- K. J. McNulty, "Hydraulic performance and efficiency of Koch Flexipac Structured", Koch Engineering Company.
- H. Z. Kister, D. R. Hill, 1991. "Predict flood point and pressure drop for modern random packing", Chemical Engineering Progress
- J. R. Hufton, J. L. Bravo, J. R. Fair, 1988. "Scale up of laboratory data for Distillation columns containing corrugated metal-plate structured packing", Ind. Eng. Res.
- M. Henriques de Brito, U. V. Stockai, 1994. "Effective mass-transfer area in a pilot column equipped with structured packing and ceramic rings", Ind. Chem. Res.
- J. R. Fair, J. L. Bravo. 1987. "Prediction of mass transfer efficiencies and pressure drop for structured tower packing in vapor/liquid service", Distillation y absorption, 1, No. 104
- P. A. Nawrocki, Z. P. Xu, 1991. "Mass transfer in structured corrugated packing", The Canadian Journal of Chemical Engineering.
- R. Billet, 1987. "Modelling of fluidynamics in packed columns", Distillation y Absorption, 1, No. 104.
- J. A. Rocha, E. M. Escamilla, G. Martínez, "Basic Design of distillation columns filled with metallic structured packings", Instituto Tecnológico de Celaya, México.
- J. Stichlmair, J. L. Bravo, J. R. Fair, 1989). "General Model for prediction of pressure drop and capacidad of countercurrent gas/liquid packed columns", Gas separation & Purification.
- Bravo J. L., Rocha J. A., Fair J. R.. 1992. "A comprehensive model for the performance of columns containing structured packings" IChE Symposium Series No. 128.



MODELO DE ORDEM REDUZIDA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO
EXTRATIVA SALINA
ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA ESCOLHA DO SAL



Paulo R. Alves Reis, Sergio Persio Ravagnani
DTP/FEQ/UNICAMP
13083-970 - Campinas - SP - Brasil
E-Mail: Ravag@turing.unicamp.br

RESUMO

Um modelo de ordem reduzida para colunas de destilação multicomponente, usando o efeito salino para quebrar a azeotropia, é desenvolvido através do método de colocação ortogonal. As descontinuidades nos perfis da coluna introduzidos pelas alimentações são contornadas dividindo-se a coluna em seções. Como agentes de separação para o sistema Etanol/Água, foram utilizados os sais cloreto de lítio, cloreto de cálcio e acetato de potássio. O modelo termodinâmico empregado para descrever o coeficiente de atividade na mistura sal/solvente é o modelo UNIQUAC estendido. Os resultados obtidos demonstram a viabilidade da aplicação do método.

INTRODUÇÃO

A modelagem de uma coluna de destilação em regime estacionário conduz a um complexo modelo matemático de grandes dimensões, que envolve as equações de balanço de massa, as relações de equilíbrio líquido-vapor e, conforme o caso, as equações de balanço de energia. A necessidade de modelos eficientes que requeiram um menor esforço em sua solução tem motivado o desenvolvimento de técnicas para a redução do tamanho do modelo. A técnica da aproximação polinomial ou método da colocação ortogonal tem sido empregada para esta redução. As funções discretas dos estágios que representam os perfis originais de composição e vazão são aproximados por polinômios ortogonais. As variáveis do modelo tornam-se funções contínuas da altura adimensionalizada da coluna. As descontinuidades nos perfis da coluna, provocadas pelas alimentações e/ou retiradas laterais são contornadas através de uma formulação que divide a coluna em seções, delimitadas pelos pontos de descontinuidades, onde podem ser aplicados diferentes polinômios interpoladores.

A utilização de sais como agente de separação possibilita, frente aos processos convencionais de separação, a redução das dimensões da coluna de fracionamento, do consumo específico de energia e da quantidade de agente de separação empregado. A adição de determinados sais ao sistema etanol-água altera substancialmente a composição da fase vapor em equilíbrio, deslocando com isso, o ponto de azeotropia desse sistema para um valor maior de composição de etanol na fase vapor. Dependendo do sal utilizado e de sua quantidade, este ponto pode ser totalmente eliminado. A não idealidade da fase líquida é considerada através de um modelo de composição local do tipo UNIQUAC/Debye-Hückel (Sander, 1986) para a determinação do coeficiente de atividade dos solventes. Os sais utilizados na simulação foram o cloreto de cálcio, o cloreto de lítio e o acetato de potássio, todos eles apresentando intenso efeito salino.

MODELO MATEMÁTICO NO ESTADO ESTACIONÁRIO

O modelo matemático que descreve a coluna de destilação em estado estacionário é obtido do sistema de equações formado pelas equações de balanço de massa e as equações de equilíbrio líquido-vapor. As hipóteses adotadas para o equacionamento são:

as vazões molares de líquido e vapor nas seções de coluna são consideradas constantes; a alimentação é feita na forma de líquido saturado; os efeitos térmicos de mistura são desprezíveis; a fase gasosa é considerada ideal; foi desprezada a correção de Poynting (Prausnitz, 1969); a pressão é considerada constante ao longo da coluna; a Eficiência de Murphree é considerada constante ao longo da coluna, a Eficiência de Murphree no refeedor foi considerada igual a 1; condensador total e refeedor parcial. Diante das hipóteses adotadas podemos considerar desnecessária a utilização do balanço energético no desenvolvimento do modelo. A fim de garantir a conservação de massa do sistema envolvido, deve ser obedecida a restrição do somatório das frações molares ser igual a unidade:

$$\sum_{i=1}^{NC} x_{i,k} = 1 \quad \sum_{i=1}^{NC} y_{i,k} = 1 \quad (1)$$

$$k = 1, \dots, n$$

onde NC é o número de componentes da mistura e k o estágio considerado.

Considerando uma coluna de destilação com n pratos conforme representado pela figura (1), temos:

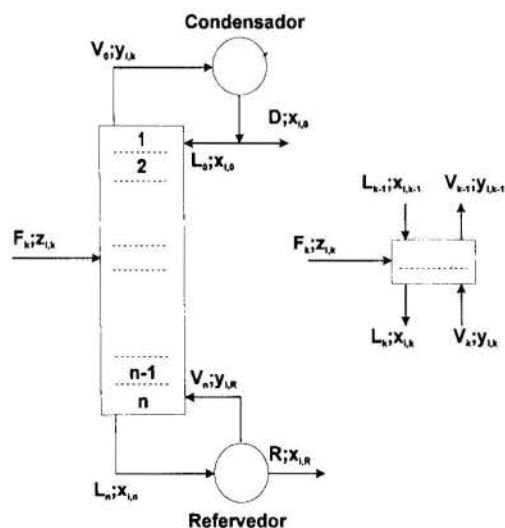


Figura 1 - Fluxograma de uma coluna de destilação

Balanço de massa do componente i no prato k:

$$L_{k-1}x_{i,k-1} + V_k y_{i,k} + F_k z_{i,k} = L_k x_{i,k} + V_{k-1} y_{i,k-1} \quad (2)$$

Balanco de massa do componente i no refeedor:

$$L_n x_{i,n} = R x_{i,r} + V_n y_{i,r} \quad (3)$$

Balanco de massa global e do componente i no condensador:

$$\begin{aligned} V_0 &= L_0 + D \\ V_0 y_{i,0} &= L_0 x_{i,0} + D x_{i,0} \end{aligned} \quad (4)$$

ou seja:

$$y_{i,0} = x_{i,0} \quad (5)$$

Para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor do componente i que deixa o prato k, será utilizada a equação de Eficiência de Murphree:

$$E_{i,k}^m = \frac{y_{i,k-1} - y_{i,k}}{y_{i,k-1}^* - y_{i,k}} \quad (6)$$

com o valor de $y_{i,k-1}^*$ igual a:

$$y_{i,k-1}^* = K_{i,k} x_{i,k} \quad (7)$$

Combinando as equações (6) e (7) temos:

$$y_{i,k-1} - y_{i,k} = E_{i,k}^m (K_{i,k} x_{i,k} - y_{i,k}) \quad (8)$$

A equação para a constante de equilíbrio $K_{i,k}$ é dada por :

$$K_{i,k} = \frac{y_{i,k-1}^*}{x_{i,k}} = \frac{Y_{i,k} P_{i,k}^m}{P} \quad (9)$$

A equação de Antoine (Reid et al., 1985) e a equação UNIQUAC/Debye-Hückel proposta por Sander et al. (1986), foram utilizadas para o cálculo da pressão de vapor e do coeficiente de atividade respectivamente.

APLICAÇÃO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL

O modelo de ordem reduzida é desenvolvido para o caso de uma única alimentação na fase líquida e sem retiradas laterais. Entretanto, o procedimento pode ser estendido para o caso de múltiplas alimentações e retiradas laterais. O método consiste em dividir a coluna em seções, onde serão aplicadas, distintamente, a colocação ortogonal. O objetivo desse procedimento é contornar as descontinuidades nos perfis de vazão da coluna, provocada pela introdução da alimentação.

Em nosso caso teremos, então, a seção de enriquecimento que compreende os estágios acima da alimentação, e a seção de esgotamento, composta pelos demais estágios. Os perfis de concentração das frações molares do líquido e vapor e de vazões serão considerados, em cada seção, como funções contínuas ao longo da coluna, aproximados por polinômios que são função da variável espacial z. Deste modo, podemos expandir as funções das frações molares através de uma série de Taylor em relação à variável espacial z, truncada nos termos de primeira ordem.

Com a utilização do polinômio de Jacobi, que é ortogonal no intervalo de 0 a 1, é necessário normalizar a variável z em cada seção da coluna de modo que, no topo da seção considerada, z seja igual a zero e na base, igual à unidade. Deste modo, Δz assume, para cada seção, o valor numérico do inverso do número de estágios da seção correspondente. Empregando-se as técnicas de colocação ortogonal (Finlayson, 1980) temos, nos j pontos de colocação interno em cada seção:

$$\sum_{i=1}^{N+2} A_{j,i} (L_i x_{i,j} - V_i y_{i,j}) = 0, \quad j = 2, \dots, N+2 \quad (10)$$

$$y_{i,j} - K_{i,j} x_{i,j} + \frac{\Delta z}{E^m} \sum_{i=1}^{N+2} A_{j,i} y_{i,j} = 0, \quad j = 1, \dots, N+1 \quad (11)$$

Os coeficientes $A_{j,i}$ são determinados pela escolha do número de pontos de colocação e por suas localizações. Em Finlayson (1980) podemos encontrar os algoritmos e subrotinas para o cálculo desses coeficientes. As equações (10) e (11) têm como condição de contorno, em cada seção, as frações molares de líquido e vapor dos componentes entrando nas respectivas seções. As duas seções se interligam através das equações de continuidade que compreendem as equações de balanço de massa global e as equações de balanço de massa por componente no prato de alimentação. Estando a alimentação no estado de líquido saturado, a fração molar de vapor do componente i na saída da seção de esgotamento e a fração molar de vapor que entra na seção de enriquecimento se igualam. Os sistemas de equações provenientes de cada seção são resolvidos simultaneamente, através do método de Newton-Raphson.

MODELO TERMODINÂMICO

A adaptação de modelos termodinâmicos para o coeficiente de atividade em sistemas isentos de sal, com boa aceitação, tais como os de composição local ou de contribuição de grupo, unidos às teorias clássicas sobre eletrólitos tem sido utilizada com grande sucesso em aplicações de engenharia, permitindo a simulação e o estudo prévio de diferentes processos que envolvam eletrólitos.

A adição de um sal a um sistema composto por dois solventes líquidos, miscíveis e voláteis, ocasiona a alteração do ponto de ebulição da solução, da solubilidade mútua dos solventes e modifica a composição da fase vapor em equilíbrio, devido a formação de complexos de associação ou pela ocorrência de modificações na estrutura da fase líquida, com conseqüente alteração na atividade de ambos os solventes. No cálculo do ELV de sistemas salinos é aplicado o critério da isofugacidade para os solventes. É através do termo da fugacidade do solvente n na fase líquida (f_n^L) que o efeito salino é representado matematicamente, em razão do sal não ser volatilizado ao longo da coluna, permanecendo inteiramente dissolvido na fase líquida, nas condições de operação da coluna.

A não idealidade da fase líquida será considerada através de um modelo termodinâmico do tipo UNIQUAC/Debye-Hückel (Sander et al., 1986). O cálculo do coeficiente de atividade dos solventes compreende a soma de três contribuições:

$$\ln \gamma_n = \ln \gamma_n^{DH} + \ln \gamma_n^C + \ln \gamma_n^R \quad (12)$$

onde γ_n^{DH} é o termo Debye-Hückel; γ_n^C termo Combinatorial e γ_n^R é o termo Residual.

Para misturas isentas de sais, essa equação se reduz à equação UNIQUAC original.

O termo γ_n^{DH} representa o efeito das interações de longo alcance entre os íons sobre o coeficiente de atividade dos solventes, descrito pela equação de Debye-Hückel, para sistemas com mais de um solvente:

$$\ln \gamma_n^{DH} = \frac{2 \cdot M_n \cdot A}{b^3} \left[1 + b \cdot \sqrt{I} - \frac{1}{1 + b \cdot \sqrt{I}} - 2 \cdot \ln(1 + b \cdot \sqrt{I}) \right] \quad (13)$$

Os termos são dados por uma equação UNIQUAC modificada, correspondendo as interações de curto alcance entre todas as espécies presentes. É composto por um termo residual (γ_n^R), que descreve as interações energéticas entre as moléculas, e por um termo combinatorial (γ_n^C), que leva em consideração as diferenças de tamanho e forma das moléculas.

Termo combinatorial:

$$\ln \gamma_n^C = \ln \frac{\phi_n}{x_n} + 1 - \frac{\phi_n}{x_n} - 0,5 \cdot q_n \cdot z \cdot \left[\ln \frac{\theta_n}{\phi_n} + 1 - \frac{\phi_n}{\theta_n} \right] \quad (14)$$

Termo Residual:

$$\ln \gamma_n^R = q_n \cdot \left[1 - \ln \left(\sum_i \theta_i \cdot \psi_{ni} \right) - \sum_i \frac{\theta_i \cdot \psi_{ni}}{\sum_i \theta_i \cdot \psi_{ni}} \right] - \frac{2 \cdot q_n}{T} \cdot \sum_m \sum_j \theta_m \cdot \theta_j \cdot \delta_{nm} \cdot \theta_i \cdot \left[\frac{\theta_i \cdot \psi_{ni}}{\sum_i \theta_i \cdot \psi_{ni}} + \frac{\theta_i \cdot \psi_{ni}}{\sum_i \theta_i \cdot \psi_{ni}} \right] \quad (15)$$

onde:

$$I = 0,5 \cdot \sum_i m_i \cdot z_i^2 \quad (16) \quad \theta_i = \frac{x_i \cdot q_i}{\sum_i x_i \cdot q_i} \quad (17)$$

$$\psi_{ni} = \exp\left(\frac{-a_{ni}}{T}\right) \quad (18) \quad \phi_n = \frac{x_n \cdot r_n}{\sum_i x_i \cdot r_i} \quad (19)$$

O índice n refere-se a um determinado solvente; m refere-se a todos os solventes; j refere-se a um determinado íon; i refere-se a todos os íons; k e l referem-se a todas as espécies químicas presentes.

Nas equações acima, a fração molar da fase líquida de um dado componente k é dada em base de total dissociação do sal e seus parâmetros podem ser encontrados nas publicações de Sander et al. (1986).

Os coeficientes de atividade dos íons não são necessários para o cálculo do efeito salino no ELV.

FLUXOGRAMA DO PROCESSO

Diversos são os fluxogramas propostos para a destilação salina (Galindez et al., 1987). O fluxograma utilizado neste trabalho é aquele que representa um processo no qual o sal isento do produto de fundo é dissolvido na corrente de refluxo; no topo da coluna de fracionamento é obtido o etanol anidro isento de sal; a solução aquosa salina retirada no fundo da coluna é enviada a um sistema de evaporação e secagem do sal.

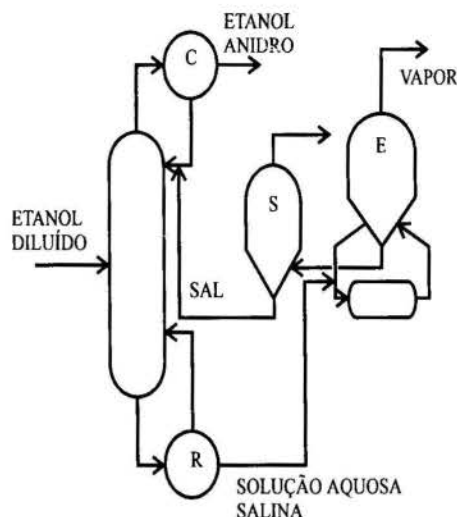


Figura 2 - Processo de Destilação Extrativa Salina para o Sistema Etanol/Água

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA ESCOLHA DO SAL

A escolha de um sal como agente de separação é influenciada por vários fatores, em particular, a intensidade do efeito do sal no equilíbrio líquido-vapor do sistema. Este critério, denominado "salting-out", ocorre, de um modo geral, em relação ao solvente no qual o sal apresenta menor afinidade, o que pode ser traduzido como no solvente onde ele é menos solúvel. Tan (1987) propôs um método para a seleção de sais através do critério de "salting-out", aplicando-o a diversos dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor para sistemas salinos Etanol/Água

Dentre os sais apresentados na literatura, foram utilizados neste trabalho o cloreto de cálcio e o acetato de potássio por serem reconhecidos experimentalmente como eficientes agentes de separação, e o cloreto de lítio, em função do critério dado por Tan (1987).

RESULTADOS E CONCLUSÕES

Como exemplo é apresentada a simulação de uma coluna de destilação para o sistema Etanol/Água/Cloreto de cálcio. A tabela (1) apresenta as condições de operação da coluna. As vazões estão em mol/s.

Tabela 1 - Condições de operação da coluna

Nº de pratos = 30	Razão de Refluxo = 6
Prato da Alimentação = 10	Vazão da Alimentação = 100
Composição da Alimentação :	Etanol = 0,20 / Água = 0,80
Pressão = 101,235 kPa	Eficiência de Murphree = 0,7
Vazão de Destilado = 21	Vazão de sal na corrente de refluxo = 1

Os resultados da aplicação do modelo reduzido são apresentados na tabela (2). DXS representa a média dos desvios absolutos das frações molares dos componentes da mistura de solventes no topo e na base em relação ao modelo prato-a-prato (Jiménez, 1995). O tempo de processamento do modelo prato-a-prato foi da ordem de 0,60 s em um microcomputador do tipo 586 DX 100.

Tabela 2 - Resultados do Modelo de Ordem Reduzida

SEÇÃO 1		SEÇÃO 2		DXS	t. CPU [s]
NP	α/β	NP	α/β		
2	0,7	2	0,6	0,0007	0,16
2	0,6	2	0,6	0,0009	0,16
2	0	4	0	0,0012	0,21
2	0	4	1	0,0025	0,21
3	-0,5	3	-0,9	0,0008	0,21
3	1	3	-0,8	0,0009	0,21
5	1,1	5	0,9	0,0004	0,27
6	1	5	1	0,0009	0,32
6	1,1	6	-0,3	0,0005	0,32
7	1	4	0	0,0000	0,32
7	1	7	1	0,0005	0,43
8	1	5	1	0,0009	0,43
9	1	3	0	0,0008	0,32
9	1,8	9	1	0,0006	0,43

Como salientado por Ravagnani (1988) e através da análise da tabela (2), podemos notar que a escolha do número e localização dos pontos de colocação são de extrema importância para a representação do perfil da coluna. Então, a escolha dos parâmetros α e β , como também a escolha dos pontos de colocação devem ser feitos com muito cuidado.

A figura (3) apresenta os perfis de composição do etanol e temperatura, para uma vazão de 1 mol/s de cloreto de cálcio com um número de dois pontos de colocação por seção e α e β assumindo o valor 1, demonstrando uma boa resposta do modelo reduzido em relação ao modelo prato-a-prato.

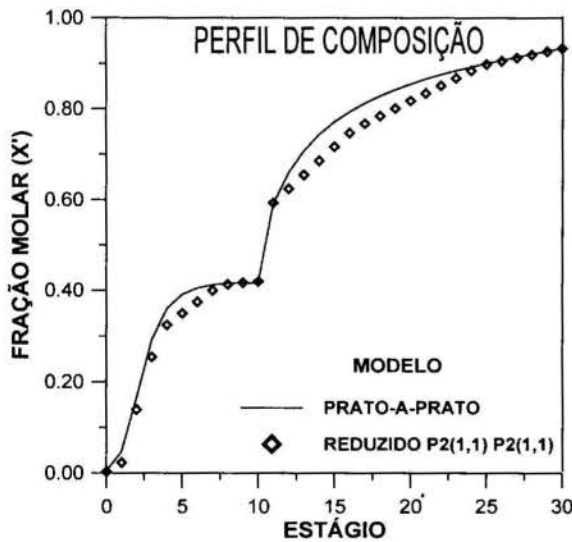


Figura 3a - Perfil de composição do etanol para o sistema Etanol/Água/Cloreto de Cálcio.

O tempo de processamento foi consideravelmente reduzido e as composições nas saídas da coluna, topo e base, tiveram um bom ajuste a nível de engenharia, o que demonstra a viabilidade da aplicação da técnica de redução.

A influência da intensidade do efeito salino dos sais em estudo em relação ao número de estágios da coluna é demonstrada na tabela (3). São mostrados a pureza do destilado (fração molar de Etanol) em função do número de estágios. As condições de operação da coluna são as mesmas apresentadas na tabela (1),

exceto as vazões dos sais, que foram fixadas em 3,5 mol/s, e o número de estágios.

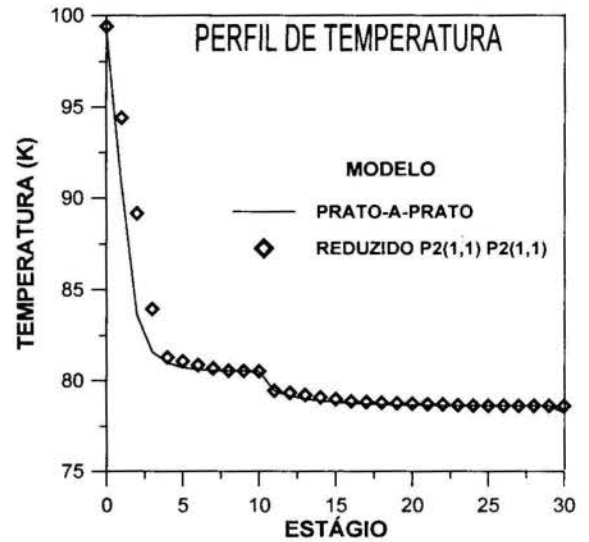


Figura 3b - Perfil de temperatura para o sistema Etanol/Água/Cloreto de Cálcio.

Tabela 3 - Influência no número de estágios

Número de Estágios	CaCl ₂	KC ₂ O ₂ H ₃	LiCl
25	0,991	-	-
30	0,997	0,970	0,961
35	0,999	0,978	0,971
40	-	0,984	0,978
45	-	0,987	0,983

Da mesma forma, podemos verificar a influência da quantidade de sal dissolvido no refluxo sobre a pureza do destilado (fração molar de Etanol). As condições de operação da coluna são aquelas apresentadas na tabela (1), exceto as vazões dos sais, que foram alteradas progressivamente. O efeito dessa alteração em relação a pureza do destilado está ilustrado na Tabela (4)

Tabela 4 - Influência da quantidade de sal dissolvido no refluxo

Vazão de Sal (mol/s)	CaCl ₂	KC ₂ O ₂ H ₃	LiCl
0.0	0.871	0.871	0.871
0.5	0.904	0.889	0.886
1.0	0.909	0.905	0.900
1.5	0.909	0.908	0.908

Com isso, poderíamos posicionar os sais, em ordem decrescente de intensidade do efeito salino, de acordo com: $ClCa_2 \gg KC_2O_2H_3 > ClLi$

Utilizando o modelo termodinâmico de Sander (1986) para o cálculo da temperatura do ponto de bolha, já que não se dispõe de dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor nas concentrações de sal estipuladas para os sistemas em estudo, pode-se verificar que esses resultados são condizentes com o critério de seleção proposto por Tan (1987).

Dentre os três sais, o cloreto de cálcio se destaca como o melhor agente de separação para o sistema Etanol/Água, requerendo uma coluna com menor número de estágio, ou uma

menor razão de refluxo externa, para efetuar uma separação equivalente à dos outros sais.

A figura (4) ilustra a aplicação da redução do modelo para o cloreto de cálcio, cloreto de lítio e acetato de potássio, todos a uma vazão de 0,5 mol/s.

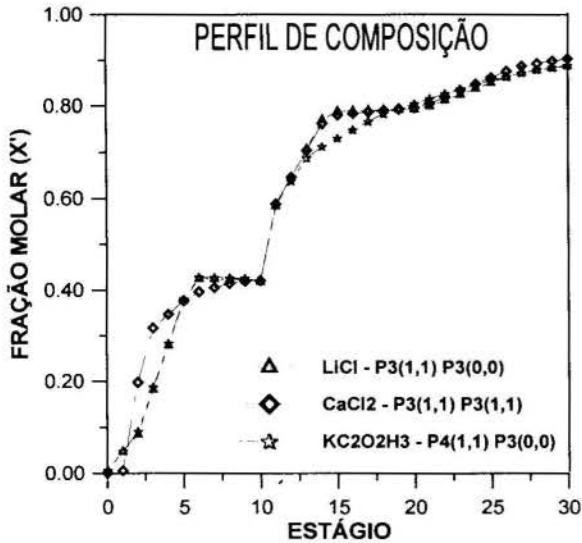


Figura 4 - Perfil de composição do etanol para o sistema Etanol/Água/Sais.

NOMENCLATURA:

- A parâmetro Debye-Hückel
- $A_{j,i}$ coeficientes matriciais para o cálculo da derivada de primeira ordem de acordo com o método da colocação ortogonal
- a_{kl} parâmetro de iteração Debye-Hückel
- b parâmetro de iteração Debye-Hückel
- D vazão molar de destilado
- $E_{i,k}^m$ eficiência de Murphree do componente i no prato k
- F_k vazão molar da alimentação no prato k
- I força iônica do meio líquido
- $K_{i,k}$ constante de equilíbrio líquido-vapor para o componente i no prato k
- L_k vazão molar de líquido que deixa o prato k
- M_n molalidade do componente n
- N número de pontos internos da colocação ortogonal
- P pressão de operação da coluna
- $P_{i,k}^{sat}$ pressão de saturação do componente puro i no prato k
- q_n parâmetro de área superficial
- R vazão molar do produto de fundo
- T temperatura absoluta
- V_k vazão molar de vapor que chega ao prato k
- x'_n fração molar de líquido do componente n em base livre de sal
- x_n fração molar de líquido do componente n em base de total dissociação do sal
- y_n fração molar de vapor do componente n
- z numero de carga do ion

LETRAS GREGAS:

- γ_n coeficiente de atividade do solvente n
- γ_n^{DH} termo Debye-Hückel;
- γ_n^C termo Combinatorial;
- γ_n^R termo Residual

- $\delta_{ij,m}$ parâmetro de iteração
- θ_n fração de área superficial do componente n
- ϕ_n fração de volume do componente n

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

FINLAYSON, B. A. *Nonlinear Analysis, in Chemical Engineering*, New York, McGraw-Hill, Inc., 1980.

GALINDEZ, H. R. and FREDENSLUND, Distillation Using Salt Effects, *Institution of Chemical Engineering Series*, 55 (3) : 229-239, 1987.

JIMÉNEZ, A. P. C., *Modelagem e Simulação de Colunas de Destilação Extrativa Salina*, Tese de Mestrado, UNICAMP, 1995.

PRAUSNITZ, J. M. *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*, New Jersey, Prentice-Hall, Inc., 1969.

RAVAGNANI, S. P. *Modelos de Ordem Reduzida para Processos de Separação por Destilação Multicomponente em colunas de Pratos. Aplicação a Sistemas Complexos*, Tese de Doutorado, USP, 1988.

REID, R. C. et Alii, *Properties of Gases and Liquids*, New York, McGraw-Hill, Inc., 1985.

SANDER, B. et Alii, Calculation of Vapor-Liquid Equilibria in Mixer Solvent/Salt Systems Using an Extended UNIQUAC Equation, *Chemical Engineering Science*, 41 (5) : 1171-1183, 1986.

TAN, T.C. Model for Predicting the Effect of Dissolved Salt on the Vapor Liquid Equilibrium of Solvent Mixtures, *Chemical Engineering Research and Design*, 65 (5): 421-425, 1987.

ABSTRACT

Reduced order model steady-state for distillation columns multicomponent using salt effects for breaking the azeotrope are developed using the approximation method (orthogonal collocation). The discontinuities in column profiles introduced by feeds are contoured divided the column into sections, each of which the composition and flow profiles are approximating using continuous polynomials. The thermodynamic model employed to describe the activity coefficients in the mixed solvent/salt systems is a extended UNIQUAC model



DIFUSIÓN DE AGUA LIGADA EN BIOPOLÍMEROS

Marcela P. Tolaba, Constantino Suárez y Roberto J. Aguerre

Departamento de Industrias
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
1428 - Buenos Aires - Argentina



RESUMEN

En base a la teoría de la difusión de Babbitt (1950) se desarrolló un modelo de difusión isotérmico en régimen variable. A partir del cálculo de la energía de activación del proceso difusivo se obtuvo la dependencia de la difusividad con la humedad. La ecuación de transporte se resolvió numéricamente y la solución simuló satisfactoriamente los datos de secado de maíz. La difusividad media en función del contenido de humedad se obtuvo a partir de los perfiles de humedad predichos a distintos tiempos de secado.

INTRODUCCIÓN

El mecanismo difusivo ha sido ampliamente utilizado para describir el movimiento del agua que tiene lugar durante la deshidratación de biopolímeros. Sin embargo en no pocas situaciones las predicciones obtenidas a partir del modelo difusivo basado en la segunda ley de Fick con difusividad constante, resultaron poco satisfactorias. Por ejemplo, es sabido que dicho modelo presenta limitaciones cuando se aplica a productos ricos en almidón y/o proteínas (Leslie y col., 1991).

La hipótesis de coeficiente de difusión variable ha dado lugar al uso de distintas expresiones empíricas que modelan la dependencia del coeficiente de difusión con el contenido de humedad. Así por ejemplo se han propuesto dependencias de tipo exponencial decreciente con el contenido de humedad (Chu y Hustrulid, 1968; Aguerre y col., 1985), de tipo lineal con el contenido de humedad y la temperatura (Young, 1969) y potencial e hiperbólico (Aguerre y col., 1985).

Nelson (1986), basándose en la teoría física de las resistencias para la difusión desarrollada por Babbitt (1950), consideró que las energías asociadas a cada resistencia constituían las componentes de la energía de activación del proceso difusivo. A partir de esta idea Nelson (1986) obtuvo una ecuación que predice la dependencia del coeficiente de difusión con el contenido de humedad, la cual fue usada para simular el proceso de adsorción de agua en madera, en condiciones isotérmicas y estacionarias.

El objetivo de este trabajo es estudiar la aplicación del modelo difusivo formulado por Babbitt (1950) a la deshidratación de productos amiláceos bajo condiciones isotérmicas y no estacionarias. La aplicación del mencionado modelo permite obtener una expresión analítica que vincula el coeficiente de difusión del agua con el contenido de humedad del material. La ecuación de transporte resultante se integra mediante el método de diferencias finitas, comparándose sus resultados con los obtenidos experimentalmente a partir de curvas de cinética de secado de granos en capa delgada. Los perfiles de humedad predichos por el modelo se usarán para calcular la dependencia del coeficiente de difusión con el contenido de humedad del grano y el valor medio de dicha difusividad.

NOMENCLATURA.

D = coeficiente de difusión, (m²/s)
D₀ = coeficiente de difusión para θ = 0, (m²/s)
H_D = entalpía del agua en el estado disociado, (kJ/mol)
H_S = entalpía del agua en fase adsorbida, (kJ/mol)
H_V = entalpía del agua en fase vapor, (kJ/mol)
m = contenido de humedad, decimal (base seca), (g/g)
m₀ = contenido inicial de humedad, decimal (base seca), (g/g)
m_e = humedad de equilibrio, decimal (base seca), (g/g)
Q_{ST} = calor isostérico de sorción, (kJ/mol)
R = constante universal de los gases, (kJ/(K mol))
R₀ = radio de la esfera, (m)
T = temperatura absoluta, (K)
ρ = coordenada radial, (m)
θ = tiempo, (s)

DESARROLLO DEL MODELO

La difusión no estacionaria de agua en un sólido de forma esférica es según la ley de Fick la siguiente:

$$\frac{\partial m^*}{\partial F_0} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[D^* r^2 \frac{\partial m^*}{\partial r} \right] \quad (1)$$

dónde se han introducido las siguientes variables adimensionales:

$$F_0 = D_0 \theta / R_0^2 ; \quad r = \rho / R_0$$

$$m^* = \frac{m - m_e}{m_0 - m_e} ; \quad D^* = \frac{D(m^*)}{D_0}$$

donde D(m^{*}) es la expresión que da la dependencia del coeficiente de difusión con el contenido de humedad. Las condiciones iniciales y de contorno son:

$$(i) F_0 = 0 ; 0 \leq r \leq 1 ; m^* = 1$$

$$(ii) F_0 > 0 ; r = 0 ; \frac{\partial m^*}{\partial r} = 0$$

$$(iii) F_0 > 0 ; r = 1 ; m^* = 0$$

La dependencia del coeficiente de difusión con el contenido de humedad se calculó en base al modelo de Babbitt (1950). Este modelo considera que las moléculas adsorbidas pasan en una primer etapa al estado líquido, requiriendo para ello de una energía equivalente al calor isostérico de sorción. En una segunda etapa las moléculas deben alcanzar el estado disociado para finalmente llegar al estado activado o móvil. Las energías asociadas a estas tres etapas constituyen la energía de activación del proceso difusivo y por lo tanto la expresión que da la dependencia del coeficiente de difusión con el contenido de humedad es:

$$D (m) = D_1 \exp \left[- \frac{(Q_{ST} + E_D + E_A)}{(RT)} \right] \quad (2)$$

Donde D_1 es un parámetro de ajuste del modelo, Q_{ST} es el calor isostérico de sorción y E_D, E_A las energías asociadas a los estados disociado y activado respectivamente. El cálculo de los mismos se realizará en la sección de resultados y discusión.

MATERIALES Y MÉTODOS

Las isotermas de desorción de maíz, correspondiente a la variedad DEKALB 3F21, se determinaron a 40°, 50°, 60° y 70°C (Tolaba y Suárez, 1990). Los datos de cinética de secado en capa delgada a las temperaturas mencionadas se obtuvieron de bibliografía (Tolaba y col., 1991).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Cálculo del calor isostérico. El calor isostérico se calculó según la ecuación de Clausius - Clapeyron. Para ello los datos de equilibrio sorcional se ajustaron mediante la isoterma G.A.B. Los calores isostéricos así calculados se modelaron según la siguiente expresión:

$$Q_{ST} = Q_0 \exp[-am] \quad (3)$$

dónde Q_0 y a son parámetros calculados por regresión no-lineal. Los valores de los mismos son $Q_0 = 104,74$ kJ / mol y $a = 21,6$.

Estimaciones de las energías de activación. A partir de consideraciones termodinámicas Nelson (1986) obtuvo la siguiente expresión que da la variación de entalpía asociada a la transición agua disociada - vapor de agua:

$$H_V - H_D = \lambda - \frac{R T^2}{n} \quad (4)$$

donde λ es el calor de vaporización del agua pura y n es un parámetro que se obtiene de la relación potencial empírica entre la presión superficial y la actividad de agua (Tolaba y col., 1995). Por otro lado es sabido que la variación entálpica corresponde a la transición agua adsorbida - vapor de agua es:

$$H_V - H_S = Q_{ST} + \lambda \quad (5)$$

Luego restando la ec. (4) de la ec. (5) se obtiene

$$H_D - H_S = Q_{ST} + \frac{R T}{n} \quad (6)$$

donde el término $R T / n$ corresponde a la energía requerida para que el agua líquida alcance el estado disociado:

$$E_D = R T/n \quad (7)$$

Los valores de n en función de la temperatura se dan en la Tabla 1.

La energía asociada al estado de agua activada se consideró equivalente a la energía de activación del proceso de autodifusión del agua, $E_A = 22,175$ kJ/mol.

Tabla 1 -Valores de los parámetros n (ec. 7) y D_1 (ec. 2) en función de la temperatura.

T (°C)	n	$D_1 \times 10^6$ (m ² /s)
40	0,5961	1,70
50	0,6883	1,70
60	0,7566	2,25
70	0,7817	3,20

En base a los cálculos previamente mencionados la ec. (2) se puede reescribir:

$$D = D_1 \exp \left[\left[Q_0 \exp(-am) + \frac{RT}{n} + 22,175 \frac{KJ}{mol} \right] / (RT) \right] \quad (8)$$

Esta ecuación junto con la ec. (1) y sus respectivas condiciones iniciales y de contorno se integraron numéricamente mediante el método implícito de Crank - Nicolson (Crank - Nicolson, 1947). La evaluación del parámetro D_1 se hizo por prueba y error, comparando los valores de humedad predichos con los experimentales. En la Tabla 1 se dan los valores de D_1 para las distintas temperaturas de trabajo.

La comparación entre curvas de cinética de secado experimentales y predichas, se dan en las Figuras 1 y 2. En la Figura 3 se muestran los perfiles de humedad correspondientes a 40° C para distintos tiempos de secado. Puede observarse que el frente de secado alcanza el centro del grano después de 200 minutos, aproximadamente.

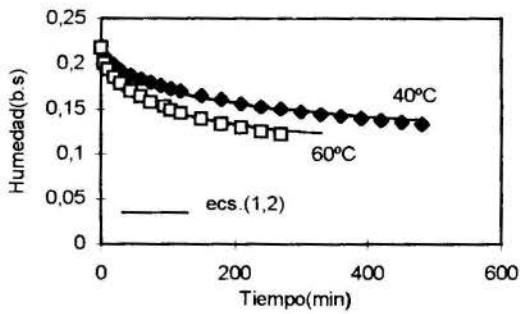


Figura 1 -Cinética de secado: comparación entre valores experimentales y predichos.

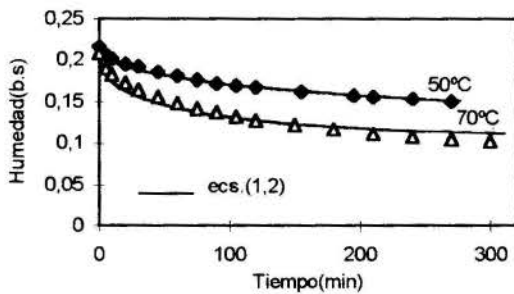


Figura 2 -Cinética de secado: comparación entre valores experimentales y predichos.

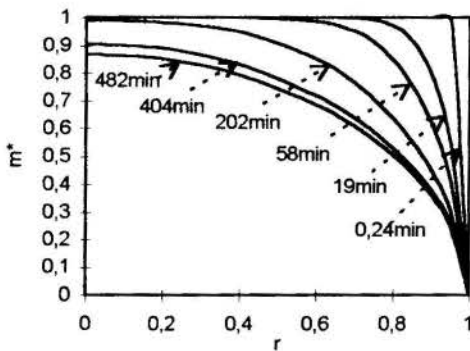


Figura 3 -Perfiles de humedad predichos para el secado de maíz a 40° C.

El valor medio del coeficiente de difusión se calculó en base a la ecuación (Aguerre y col., 1985):

$$\bar{D}^* = \frac{\int_0^1 D^* m^* r^2 dr}{\int_0^1 m^* r^2 dr} \quad (9)$$

La variación del mismo con el contenido de humedad se visualiza en la Figura 4. En línea de puntos se indican los valores del coeficiente de difusión para la solución de la ecuación de difusión con difusividad constante obtenidos de bibliografía (Tolaba y col., 1991).

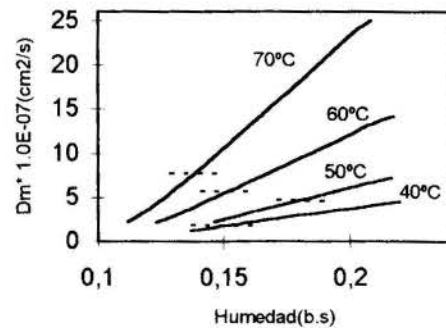


Figura 4 -Variación de la difusividad media con el contenido de humedad.

CONCLUSIONES

A partir de la teoría de difusión de Babbitt (1950) se ha obtenido una expresión semi-empírica que da la dependencia del coeficiente de difusión con el contenido de humedad. La misma asociada a la ecuación de transporte proporciona un modelo cuya solución numérica ha permitido simular satisfactoriamente la cinética de secado en capa delgada de maíz. De los resultados obtenidos se desprende que dentro del rango de humedades estudiado la difusividad media decrece a medida que progresa el secado.

REFERENCIAS

- Aguerre, R. J.; Gabitto, J. F. and Chirife, J. 1985, "Utilization of Fick's second law for the evaluation of diffusion coefficients in food processes controlled by internal diffusion", *J. of Food Technol.*, 20, 623-629.
- Babbitt, J. D., 1950, "On the differential equations of diffusion", *Can. J. Res.*, 28A: 449-474.
- Chu, S. T. and Hustrulid, A., 1968, "Numerical solution of diffusion equations", *Trans. of the ASAE*, 11, 705-708.
- Crank, J. & Nicolson, P., 1947, "A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type", *Proceedings of the Cambridge Society*, 43, 50-55.
- Leslie, R. B., Carillo, P. J., Chung, T. Y., Gilbert, S. G., Hayakawa, K., Marousis, S., Saravacos, G. D. and Solberg, M., 1991, "Water diffusivity in starch-based systems", in *Water Relationships in Food* Ed. Levine, H. and Slade, L. Plenum Press - N. Y. and London, 365-390.
- Nelson, Jr. R. M., 1986, "Diffusion of bound water in wood", *Wood Sci. Technol.*, 20, 235-251.
- Tolaba, M. P., Suárez, C. and Viollaz, P. E., 1995, "Spreading pressure - water activity and moisture relationships in starchy materials", *Drying Technol.*, 13 (8-9), 2097-2111.
- Tolaba, M. P., Suárez, C. and Viollaz, P. E., 1991, "Diffusion coefficient estimation for shelled corn", *Lebensm.-Wiss. u. - Technol.*, 24, 303-306.
- Tolaba, M. P. & Suárez, C., 1990, "Desorption isotherms of shelled maize: whole, dehulled and hulls", *Int. J. of Food Science and Technol.*, 25, 435-441.
- Young, J. H., 1969, "Simultaneous heat and mass transfer in a porous, hygroscopic solid", *Trans. of the ASAE*, 12, 720-725.

ABSTRACT

Based on the diffusion theory of Babbitt (1950) it was developed a model for isothermal unsteady-state diffusion. From the calculations of the activation energy of diffusion process a non linear expression was obtained for moisture dependence of diffusivity. In such equation the term corresponding to the isosteric heat of sorption becomes preponderant as moisture content decreases. The resulting transport equation and boundary conditions were numerically solved and the numerical solution was used to simulate the drying process of corn. An accurate fitting of the experimental data was obtained using the model. Predicted values of the moisture profiles at different drying times were used to estimate the mean diffusivity as function of moisture content.



ABSORÇÃO NÃO-ISOTÉRMICA COM REAÇÃO QUÍMICA

Andréa Selene E. X. Stragevitch, Alberto L. de Andrade
 Faculdade de Engenharia Química
 Universidade Estadual de Campinas
 Caixa Postal 6066, 13083-970, Campinas, SP, Brasil.



SUMÁRIO

Um modelo matemático é apresentado, visando a obtenção de parâmetros que determinem a velocidade de transferência de massa de um componente em um processo de absorção com borbulhamento. O sistema considerado é não-isotérmico com a vaporização do líquido, transiente, e com a ocorrência de uma reação química da espécie absorvida com o meio líquido. Uma montagem experimental foi desenvolvida para estudar a absorção do SO_2 em água pura de uma mistura gasosa de SO_2 e N_2 . Os resultados do modelo teórico foram comparados com os dados experimentais.

INTRODUÇÃO

Um modelo baseado na teoria do filme para a fase contínua e em um mecanismo difusivo para o interior da bolha, considerando-se uma absorção gasosa não-isotérmica, com reação instantânea e reversível, será apresentado. No desenvolvimento do modelo, é assumida a volatilidade do reagente líquido. O modelo também poderá descrever um processo onde haja superaquecimento, ou seja, o caso onde a temperatura da fase gasosa ultrapassa o ponto de ebulição do líquido. Neste caso, o efeito da vaporização do líquido se torna mais evidente.

Os efeitos térmicos sobre as taxas de transferência de massa são uma consequência da variação de entalpia devido à mudança de fase e à reação química. Neste trabalho será discutido o problema da absorção gasosa com reação em condições exotérmicas.

Quando um gás se difunde no interior de um líquido, poderá haver uma elevação de temperatura na interface gás - líquido, devido a liberação do calor de solução e do calor da reação química. Associado a este efeito térmico, existe um fator de aumento que representa a influência da temperatura na interface sobre o comportamento da: i) solubilidade do componente dissolvido, ii) da taxa de reação química e iii) das difusividades das espécies transferidas para a fase líquida. Assim, o aquecimento do líquido aumenta a taxa de reação e de difusão, elevando o gradiente de concentração nas proximidades do filme, permitindo um aumento da força motriz. Por outro lado, existe a tendência de diminuir a solubilidade na interface, portanto diminuindo a força motriz do processo de transferência de massa. Dessa forma, o fator de aumento relevante é um resultado da combinação desses dois efeitos opostos. Também serão considerados os efeitos térmicos correspondentes à vaporização do líquido, e como consequência, a volatilidade do solvente poderá também contribuir para uma diminuição de temperatura na interface.

Esta multiplicidade de aspectos, os quais interferem no fator de aumento, será considerada diante das interações existentes no fenômeno, em estudo, através da proposição de um modelo matemático e a consequente solução numérica das equações.

Uma comparação entre os resultados teóricos e experimentais é realizada através da medida da variação de concentração do SO_2 e da temperatura na fase líquida com o tempo de borbulhamento.

É utilizada uma montagem experimental que consta basicamente de uma célula de borbulhamento que funciona como uma unidade de absorção de um componente gasoso, através de uma injeção direta de uma mistura de SO_2 e N_2 de composição conhecida.

MODELO

O desenvolvimento da modelagem matemática é direcionado para descrever o comportamento dinâmico de um processo de absorção não-isotérmico de uma bolha isolada. O problema considerado trata da situação na qual um componente gasoso A, é absorvido por uma fase líquida, reagindo reversivelmente com o solvente, o qual é volátil.

Um diagrama esquemático do modelo do filme com perfis de concentração e de temperatura é mostrado na figura 1. Considera-se as concentrações e temperaturas como valores médios temporais assim como todas as variáveis que estiverem representadas com uma barra superior.

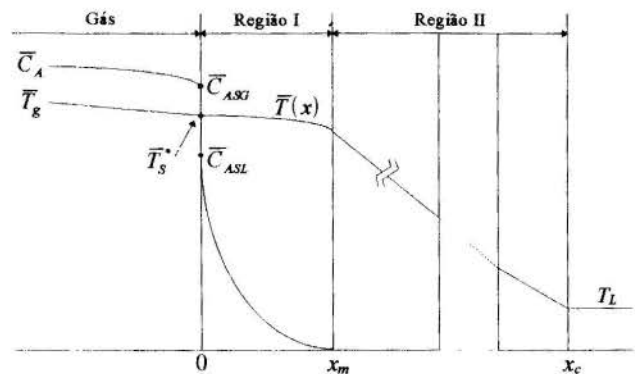


Figura 1 - Perfis de concentração e temperatura.

Na figura 1, \bar{T}_g é a temperatura média do gás; \bar{T}_s^* é a temperatura média na interface gás-líquido; \bar{C}_A é a concentração média do componente A na fase gasosa; \bar{C}_{ASG} é a concentração

média do componente A da fase gasosa na interface; \bar{C}_{ASL} é a concentração média do componente A da fase líquida na interface; T_L é a temperatura do solvente líquido; \bar{T} é a temperatura média do filme de transferência de massa; x_m é a espessura do filme de transferência de massa e x_c é a espessura do filme de transferência de calor da fase líquida.

O modelo matemático é baseado nas seguintes considerações:

1 - A reação na fase líquida é completada essencialmente no interior do filme líquido;

2 - As propriedades físicas no interior do filme líquido são funções da temperatura na interface;

3 - A fase líquida consiste de um líquido reagente cujas perdas de massa e de energia existentes são devidas à evaporação;

4 - Assume-se que o calor de solução e de reação são independentes da temperatura e são calculados a uma temperatura de referência de 25°C;

5 - O modelo baseado na teoria do filme define que a zona estagnante para os processos de transferência de calor é bem maior que a espessura de processos de transferência de massa, assim $x_c \gg x_m$;

6 - A resistência à transferência de massa na interface é desprezível.

À respeito da primeira consideração, a espécie dissolvida A reage tão rapidamente que a reação é completada no interior do filme. Dessa forma, o perfil de temperatura na região $x_m < x < x_c$ é linear e o fluxo de calor na extremidade do filme de transferência de massa é dado por:

$$-\lambda_L \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=x_m} = -\lambda_L \frac{T_L - \bar{T}^*}{x_c} \quad (1)$$

em que λ_L é a condutividade térmica do filme líquido. \bar{T}^* é a temperatura média do filme de transferência de massa, resultante do efeito térmico da mudança de fase e da reação química. Neste trabalho, considera-se que a espessura do filme x_c , sobre o qual existe um gradiente de temperatura, é muito superior à espessura do filme x_m . Em outras palavras, desde que $x_c \gg x_m$, \bar{T}^* é agora considerada constante através do filme de transferência de massa, logo $\bar{T}_s^* = \bar{T}^*$.

Por definição, o coeficiente de transferência de calor convectivo médio da fase líquida é dado por:

$$\bar{h}_L = \frac{\lambda_L}{x_c} \quad (2)$$

Para o presente problema, um fator de aumento da massa transferida, não-isotérmico, médio, pode ser definido como:

$$\bar{\phi}^* = \frac{\bar{N}_A^*}{\bar{N}_A^0} \quad (3)$$

em que \bar{N}_A^* é a taxa de absorção química média, considerando-se um processo com transferência de calor e vaporização do solvente e \bar{N}_A^0 é a taxa de absorção física média, considerando-se um processo isotérmico sem a vaporização do solvente.

O sistema de equações diferenciais, o qual descreve o comportamento de um processo isotérmico de difusão, com reação, baseia-se na equação de balanço de massa para o interior da bolha e na relação de fluxo de massa na interface gás-líquido.

Algumas hipóteses simplificadoras são utilizadas na metodologia proposta, as quais podem ser aplicadas plenamente dentro do domínio operacional que será adotado. Considera-se o modelo de uma bolha esférica e estagnado. Neste caso, despreza-

se o perfil de velocidade interno à bolha, onde a transferência de massa passa a ocorrer somente por difusão, como se fosse uma partícula sólida. Torna-se conveniente esta consideração, uma vez que o modelo para o interior da bolha fica reduzido simplesmente à equação da difusividade mássica e o tratamento matemático se torna mais simplificado. Esta aproximação condiz com o próprio modelo físico. De fato, trabalha-se com a célula de borbulhamento com uma profundidade pequena de líquido em seu interior, de tal forma que o tempo de residência da bolha em contato com a fase contínua é tão pequeno, que se pode considerar insuficiente para o desenvolvimento de um perfil interno de velocidade. Outra consideração feita é que a concentração da fase líquida é constante no intervalo de tempo de residência.

A equação de balanço de massa no interior da bolha pode ser escrita na forma:

$$\delta_{AG} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) \right] = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (4)$$

em que δ_{AG} é a difusividade do componente A na fase gasosa, t é o tempo e r é a coordenada radial.

Associada a esta equação, temos as seguintes condições inicial e de contorno:

$$C. I: \quad t = 0, \quad C_A = C_{A0} \quad (5)$$

$$C. C. 1: \quad r = R, \quad C_A = C_{ASG}(t) \quad (6)$$

$$C. C. 2: \quad r = 0, \quad C_A < \infty \quad (7)$$

em que C_{A0} é a concentração inicial da bolha.

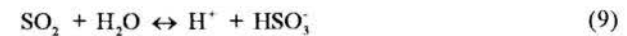
Na interface, consideraremos a seguinte relação de fluxo de massa:

$$N_A = -\delta_{AG} \left. \frac{\partial C_A}{\partial r} \right|_{r=R} = K_L (C_{ASL}(t) - C_{AL}(t)) \quad (8)$$

em que $C_{AL}(t)$, é a concentração do componente A na fase líquida e K_L é o coeficiente de transferência de massa da fase líquida.

O modelo teórico considera um comportamento transiente na interface. Também é admitido que o reagente gasoso se solubiliza na interface em sua concentração de saturação. As concentrações nas fases líquida e gasosa na interface obedecem a uma relação de solubilidade entre si segundo a lei de Henry, para qualquer tempo.

Quando o dióxido de enxofre é absorvido pela água, a seguinte reação de hidrólise acontece na fase líquida:



A reação é classificada como instantânea e reversível. Pressupõe-se que as concentrações molares dos ions são iguais, assim como as respectivas difusividades.

Evidentemente que a solução do nosso problema depende do valor de K_L , o qual incorpora o efeito da reação química. O desenvolvimento do cálculo de K_L é baseado na solução analítica exata das equações que descrevem o modelo do filme, proposto por Higbie. O resultado obtido desta solução é utilizado na equação (8), e a expressão para o fluxo de massa na interface fica na forma apresentada a seguir, compreendendo também o fator de aumento ϕ devido à hidrólise, ou seja:

$$N_A = -\delta_{AG} \left. \frac{\partial C_A}{\partial r} \right|_{r=R} = 2\phi \sqrt{\frac{\delta_{AL}}{\pi t}} (C_{ASL}(t) - C_{AL}) \quad (10)$$

e a expressão de ϕ para as condições isotérmicas é dada por:

$$\phi = 1 + \frac{\delta_{EL}}{\delta_{AL}} \frac{\sqrt{K}}{\sqrt{C_{ASL}(t)} + \sqrt{C_{AL}}} \quad (11)$$

em que K é a constante de equilíbrio da reação, escolhida do trabalho de Rabe e Harris (1963), δ_{AL} é a difusividade mássica do SO_2 na fase líquida e δ_{EL} é a difusividade mássica do HSO_3^- (ou do H^+) na fase líquida.

Então, o problema representado pelas equações (4) a (7) e a relação (10), será resolvido numericamente para a absorção física, isto é, considerando-se $K = 0$ (consequentemente $\phi = 1$). Neste caso, o fluxo de massa em função do tempo é definido como N^*_A . O intervalo de tempo de integração escolhido, corresponde ao tempo de residência \mathcal{T}_R . Serão considerados valores médios temporais para os coeficientes e fluxos de massa, calculados em relação a \mathcal{T}_R . O método da colocação ortogonal, Villadsen e Michelsen (1978), é utilizado para a resolução das equações (4) e (10), com as mesmas condições inicial e de contorno. A equação diferencial para o interior da bolha foi integrada pelo método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem. A condição de contorno (6) é aplicada à equação (8) para se determinar a concentração na interface, através do método numérico de Newton-Raphson. A teoria dos dois últimos métodos citados, encontra-se detalhada no Carnahan et al. (1969). A partir dos resultados numéricos da variação da concentração do líquido na interface com o tempo, obtém-se uma correlação através do método de ajuste dos simplex modificados, Press et al. (1988). Dessa forma, o valor de \bar{N}^*_A é calculado a partir da integração numérica de N^*_A , através do método numérico de Simpson (Press et al., 1988), no intervalo de tempo de zero ao tempo de residência.

Como já foi mencionado, deve-se calcular o valor de $\bar{\phi}^*$ para uma avaliação dos perfis de transferência de massa, com a inclusão dos efeitos térmicos e da reação sobre o filme. A expressão para o fator de aumento não-isotérmico, médio, deve ser escrita da mesma forma da equação (11), considerando-se as propriedades físicas e a constante de equilíbrio como funções de \bar{T}^* , assim como a concentração \bar{C}_{ASL} do SO_2 da fase líquida na interface, a qual será uma média no intervalo do tempo de residência. Portanto, a expressão para $\bar{\phi}^*$ é escrita como:

$$\bar{\phi}^* = 1 + \frac{\delta_{EL}(\bar{T}^*)}{\delta_{AL}(\bar{T}^*)} \frac{\sqrt{K(\bar{T}^*)}}{\sqrt{\bar{C}_{ASL}(\bar{T}^*)} + \sqrt{C_{AL}}} \quad (12)$$

A temperatura \bar{T}^* , desconhecida, é obtida do seguinte balanço de calor global na interface gás-líquido (Al-Ubaidi e Selim, 1992):

$$\begin{aligned} (-\Delta H_S) [\bar{\phi}^* \bar{N}^*_A] + (-\Delta H_R) [(\bar{\phi}^* - 1) \bar{N}^*_A] = \\ \bar{h}_L (\bar{T}^* - T_L) + \bar{h}_g (\bar{T}^* - \bar{T}_g) + (\Delta H_V) \bar{N}_B \end{aligned} \quad (13)$$

$$\text{com a condição inicial } t = 0, \bar{T}_g = T_{g0}; T_L = T_{L0} \quad (14)$$

O primeiro termo do lado esquerdo da equação (13), significa a energia devido a dissolução do componente A. Este efeito é calculado através das entalpias parcial molar do componente A em ambas as fases H_A , definida por:

$$H_A = H_{A,T_{REF}} + C_{P,A} (T - T_{REF}) \quad (15)$$

em que $C_{P,A}$ é o calor específico do componente A e T_{REF} é uma temperatura de referência.

Na equação (15) é considerado que H_A é uma função linear da temperatura, portanto $H_{A,T_{REF}}$ e $C_{P,A}$ são constantes e são diferentes entre si para a fase líquida e gasosa. Para efeito de cálculo, será desconsiderado o segundo termo do lado direito da equação (15), assim neste caso, o calor de solução ΔH_S pode ser expresso como:

$$\Delta H_S = H^{gas}_{A,T_{REF}} - H^{liq}_{A,T_{REF}} \quad (16)$$

o qual é independente da temperatura. O valor de ΔH_S para o caso da dissolução do SO_2 na água pura foi extraído do trabalho de Johnstone e Leppla (1934) à diluição infinita, cuja temperatura de referência, T_{REF} , é igual a 25°C.

O segundo termo do lado esquerdo da equação (13) representa o calor liberado pela reação química. Este efeito pode ser incorporado nas entalpias de formação parcial molar, considerando-se todos os calores específicos do gás ideal para os produtos e reagentes iguais a zero. Portanto assume-se apenas os calores de formação à temperatura de referência de 25°C. Em consequência, tem-se a expressão para o calor de reação:

$$\Delta H_R = \sum_{i=A,B,E} \nu_i H_{i,T_{REF}} \quad (17)$$

ν_i é o coeficiente estequiométrico do componente i (para reagente, é negativo, para produto é positivo), B e E são os componentes água e ácido sulfuroso, respectivamente.

O primeiro termo do lado direito da equação (13) representa a energia condutiva na fase líquida, o segundo termo representa a perda de calor por convecção para a fase gasosa, e o terceiro termo representa a energia consumida na evaporação do reagente líquido B , sendo que:

\bar{h}_g^* é o coeficiente convectivo médio de transferência de calor para a fase gasosa;

ΔH_V é o calor latente de vaporização do reagente líquido à temperatura da fase líquida T_L ;

\bar{N}_B é o fluxo de massa médio do vapor.

Retornando-se à equação de balanço de energia na interface gás-líquido (13), temos agora todos os seus parâmetros definidos, e podemos observar que é uma relação implícita de \bar{T}^* . Dessa forma, iremos calcular o seu valor, utilizando-se o método numérico da Falsa Posição (Press et al., 1988), para a resolução de equações algébricas não lineares.

Os fluxos de massa do SO_2 e do vapor de água foram determinados considerando-se a influência do comportamento de um sobre o outro. As equações que representam os fluxos de massa do SO_2 e do vapor de água são resolvidas simultaneamente através da solução numérica da equação de fluxo de calor na interface, referente à equação (13). Eles dependem da temperatura na interface que uma vez calculada, somam-se os efeitos do fenômeno difusivo do SO_2 e do vapor de água.

Para a determinação da temperatura e concentração do soluto na fase líquida, utilizamos uma sistemática de cálculo que inclui o solvente líquido evaporado no decorrer de cada intervalo de integração do acúmulo de massa, logo a massa inicial do solvente deve ser subtraída da massa do vapor produzida.

Considera-se que na interface da bolha, o vapor d'água se encontra a uma pressão de equilíbrio que é função de \bar{T}^* . O vapor e o líquido se apresentam saturados a uma pressão relativamente pequena, por isso a lei do gás ideal pode ser utilizada para descrever a relação entre a pressão de vapor do solvente e sua concentração na interface.

A modelagem proposta estuda como um processo de

absorção física se comporta isotermicamente quando submetido a uma dada força motriz, e a partir daí, os efeitos térmicos devido à reação química e vaporização do solvente são introduzidos e mensurados através de um fator de aumento.

EXPERIMENTO

Neste trabalho, efetuaram-se medidas experimentais da temperatura e da concentração do soluto na fase líquida, variando com o tempo de borbulhamento.

A operação consiste fundamentalmente na injeção do gás na célula através de um distribuidor situado na sua base, sendo mantido o borbulhamento até que se atinja a condição de equilíbrio entre as fases dispersa e contínua.

O gás injetado é aquecido previamente em banho de óleo de silicone, cuja serpentina é confeccionada com aço inox 316, seguindo por um tubo para a célula, de aço inox, revestido com uma fita de aquecimento. A fim de se diminuir as perdas para o ambiente, a parede externa da célula é revestida com isopor.

A unidade de absorção é construída em acrílico, com um formato retangular com cerca de 30 cm de altura, e dimensão da base de (13,5 x 14,5) cm. A base possui um cone coletor da fase dispersa e sobre este cone, existe uma placa perfurada. Esta funciona como um distribuidor da fase dispersa em forma de bolhas. A placa tem diâmetro de 10 cm e apresenta cinco orifícios com diâmetros em torno de 1 mm.

A figura 2 mostra um diagrama esquemático da montagem experimental e suas respectivas dimensões.

O método de análise do teor de dióxido de enxofre total que se encontra na fase líquida, adotado neste trabalho, foi extraído das normas da ABNT, referência NBR 12979 de setembro de 1993. A determinação da concentração de dióxido de enxofre é realizada através do método do peróxido de hidrogênio, o qual reage com o SO₂, formando o ácido sulfúrico que é quantificado através de uma análise de titulação com uma solução de tetraborato de sódio.

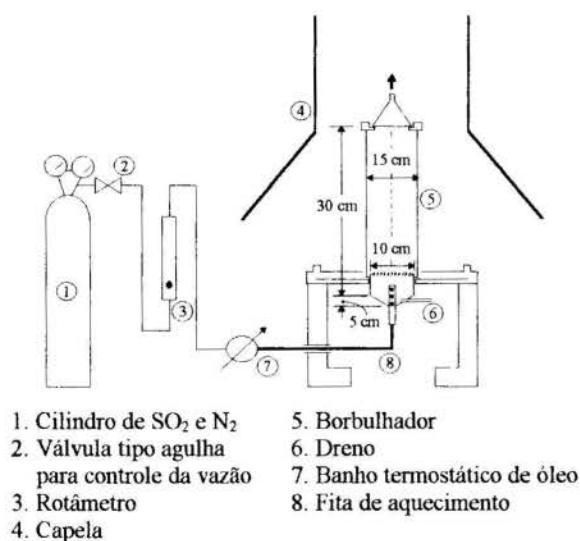


Figura 2 - Montagem experimental.

RESULTADOS E CONCLUSÕES

Uma comparação entre os resultados teóricos e experimentais é feita através da medida da temperatura e da variação de concentração do SO₂ na fase líquida com o tempo de borbulhamento. As figuras 3 e 4 tratam da absorção não-

isotérmica de uma mistura gasosa de SO₂ (50% molar) e N₂ à temperatura da fase gasosa de 51,8°C. As figuras 5 e 6 tratam da absorção não-isotérmica de uma mistura gasosa de SO₂ (30% molar) e N₂ à temperatura da fase gasosa de 60,9°C.

O volume de água utilizado na célula de borbulhamento foi de 1 litro para os dois casos estudados.

Comparou-se os resultados de concentração quando o sistema se comporta isotermicamente e quando existe transferência de calor, conforme as figuras 3 e 5. O objetivo consiste em avaliar o efeito da temperatura sobre a variação de concentração com o tempo. Considerou-se para o caso isotérmico, uma simulação em que o sistema se encontra a uma temperatura igual a temperatura inicial da fase líquida.

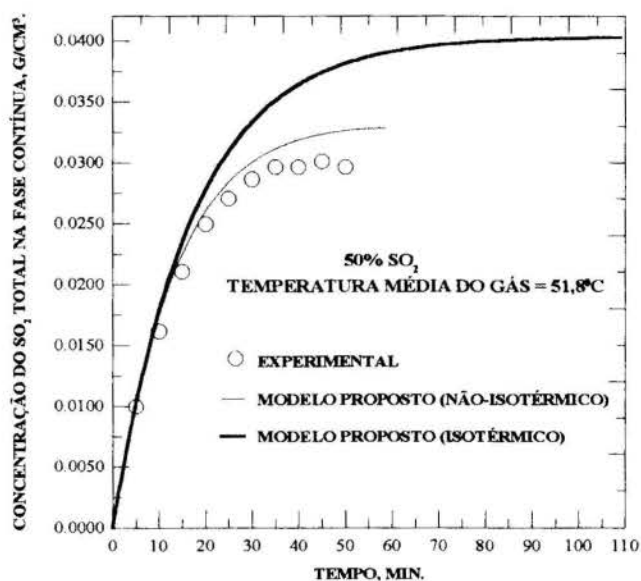


Figura 3 - Variação da concentração do SO₂ na fase líquida.

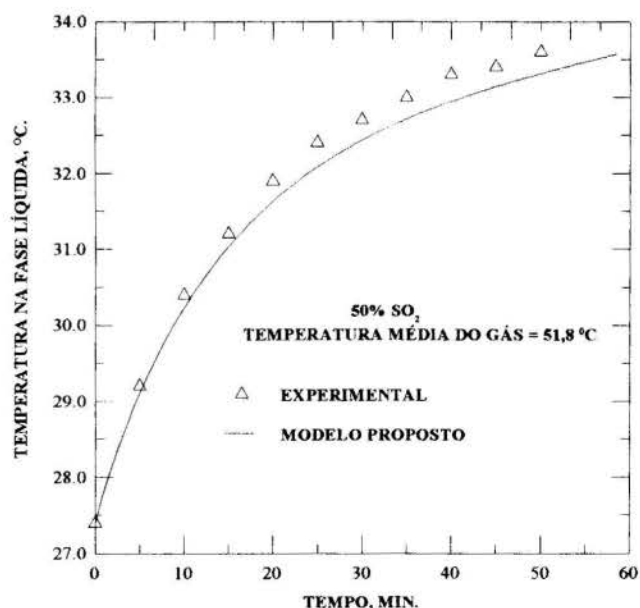


Figura 4 - Variação da temperatura da fase líquida.

Tendo em vista os resultados mostrados nas figuras 3 e 5, e levando-se em conta as naturais dificuldades encontradas para a realização de medidas experimentais em transferência de massa,

podemos considerar que a modelagem matemática proposta representa de uma forma bastante satisfatória o fenômeno estudado. O desvio médio entre os resultados do modelo não-isotérmico e do experimento corresponde ao valor de 6,7 % para a figura 3, enquanto para a figura 5, o desvio encontrado é de 14,5 %.

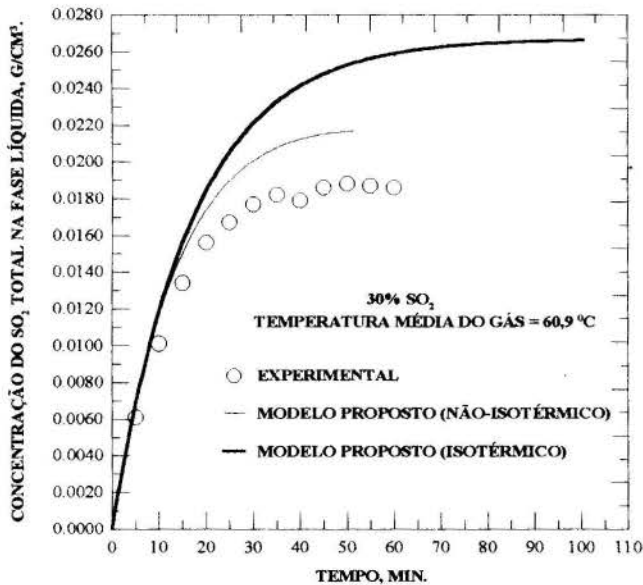


Figura 5 - Variação da concentração do SO₂ na fase líquida.

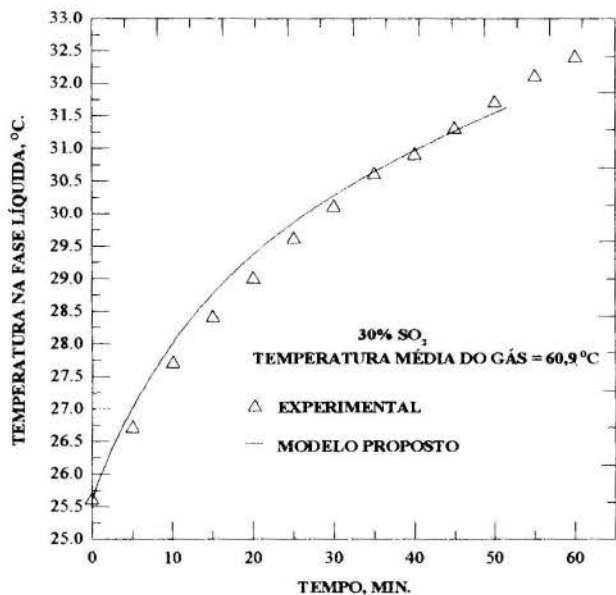


Figura 6 - Variação da temperatura da fase líquida.

Em relação as figuras 4 e 6, podemos observar uma concordância excelente entre os valores experimentais e teóricos. O modelo representa as condições reais eficientemente, apesar da complexidade do equacionamento envolvido. Avalia os efeitos térmicos devido à volatilidade do reagente líquido e à transferência de calor entre as fases, sobre a taxa de absorção química em condições não-isotérmicas. Os desvios médios relativos encontrados para as figuras 4 e 6 respectivamente são 0,8 % e 0,7 %.

A saturação da fase líquida com o SO₂ é atingida mais rapidamente quando o sistema é submetido a um aquecimento do que o sistema trabalhando isotermicamente, conforme as figuras 3 e 5. À medida em que a temperatura da fase líquida aumenta, a diferença entre as curvas fica mais acentuada. A concentração de saturação do caso isotérmico é maior, indicando uma maior inclinação da curva. Portanto, podemos observar que a capacidade de absorção também é superior. A importância de se verificar esses resultados se deve ao fato de serem fundamentais para o projeto de reatores gás-líquido. Obtém-se coeficientes de transferência de massa maiores para o caso não-isotérmico, devido a concentração da fase líquida aumentar mais lentamente. A partir daí, um estudo pode ser desenvolvido para avaliar a vantagem econômica de um procedimento isotérmico, à temperatura ambiente, com uma maior capacidade de absorção do solvente, sobre um processo com aquecimento, onde teremos maiores taxas de absorção gasosa.

Analisou-se o comportamento do valor de $\bar{\phi}^*$ variando com o tempo. As figuras 7 e 8 apresentam esses resultados para os dois casos estudados, 50 % de SO₂ na mistura gasosa e 30 % de SO₂, respectivamente. O valor de $\bar{\phi}^*$ decresce com o tempo pois a concentração do SO₂ na fase líquida aumenta, diminuindo a força motriz do processo de transferência de massa. Além disso, à medida que decorre o tempo, a temperatura da interface aumenta proporcionando um efeito conjunto da solubilidade do SO₂, das difusividades e da constante de equilíbrio sobre o fator de aumento. O somatório do calor liberado pela dissolução do gás, pela reação química e pela transferência convectiva são relevantes para o aumento da temperatura na interface com o tempo, como podemos verificar nas figuras 9 e 10 para os dois sistemas trabalhados. O aumento da temperatura na interface pode resultar na dissipação de calor da superfície do líquido para a fase gasosa.

A temperatura alcançada pela fase líquida não foi grande, dessa forma não se espera que a volatilidade do líquido influencie significativamente o fator de aumento. No caso de superaquecimento, a vaporização do líquido pode reduzir drasticamente o aumento da temperatura na interface, possibilitando efeitos térmicos mais complexos sobre o fator de aumento. Perdas de calor para a fase gasosa reduz o aumento de temperatura interfacial.

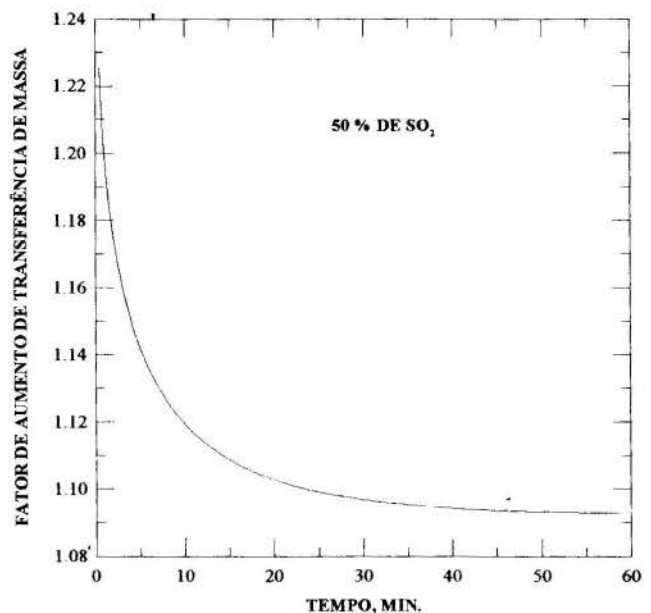


Figura 7 - Variação do fator de aumento com o tempo.

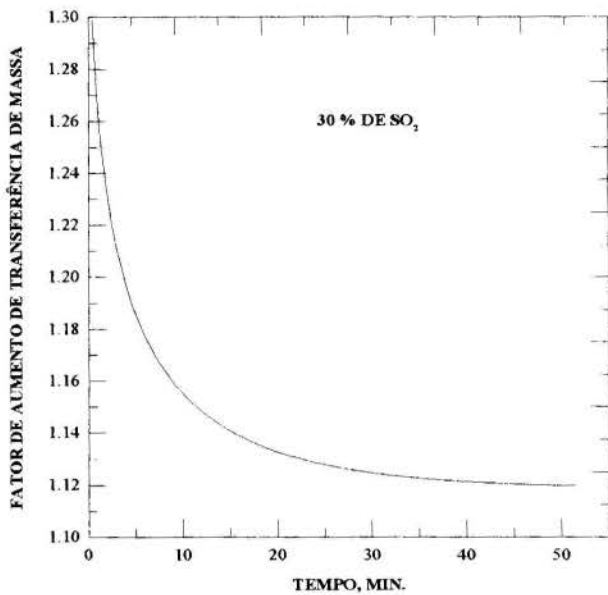


Figura 8 - Variação do fator de aumento com o tempo.

A teoria do filme foi aplicada para descrever a absorção gasosa e o comportamento da temperatura na interface em condições exotérmicas. Estudou-se a influência do calor de reação e de solução no processo de transferência de massa. Os resultados experimentais obtidos são comparados com a teoria, comprovando uma boa representação do modelo com o fenômeno estudado. Os resultados são muito importantes para um projeto que utiliza o presente sistema físico, pois temos definida a tendência da redução da solubilidade do SO_2 com o aumento da temperatura interfacial.

Uma outra contribuição importante deste trabalho se refere a consideração da volatilidade do líquido nos cálculos do modelo. Existe uma grande escassez de trabalhos na literatura que tratem desse aspecto. É fundamental essa consideração pois a vaporização do líquido, em determinadas condições, é um fator que reduz significativamente a taxa de absorção gasosa.

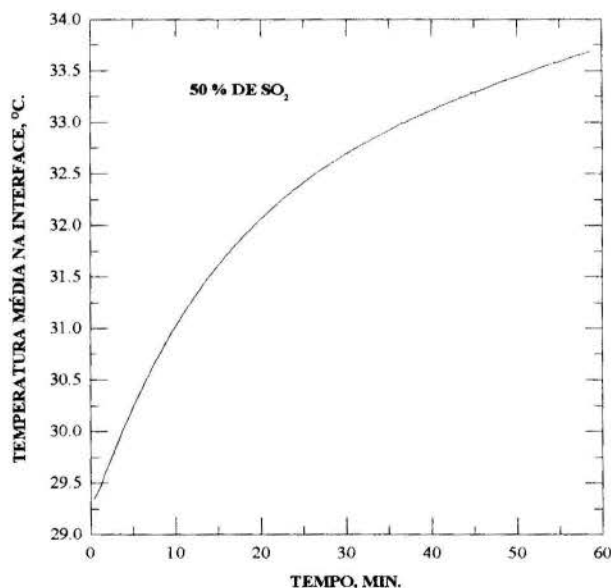


Figura 9 - Variação da temperatura média na interface.

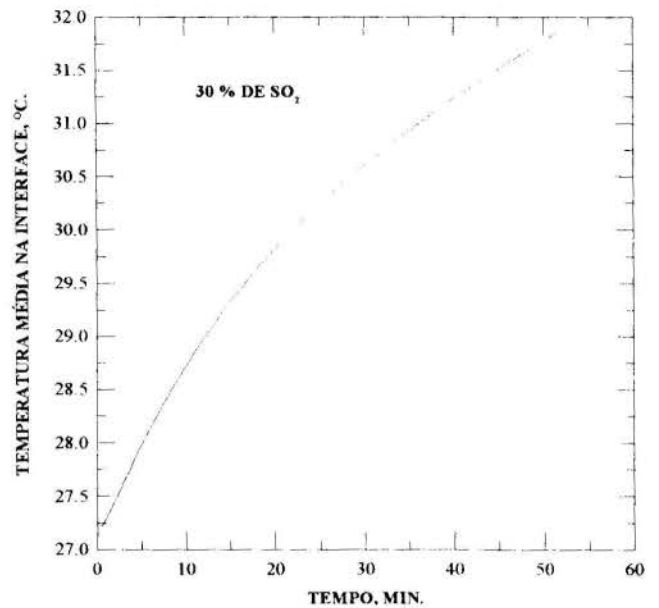


Figura 10 - Variação da temperatura média na interface.

O modelo físico considerado é de grande importância industrial, principalmente em controle de resíduos para a despoluição do ar atmosférico. A solubilidade do SO_2 na água é adequada para o estudo dessa natureza. Por essa razão, os coeficientes de transferência de massa de ambas as fases podem ser determinados simultaneamente.

REFERÊNCIAS

- Al-Uzaidi, B. H. and Selim M. S., 1992, "Role of Liquid Reactant Volatility in Gas Absorption with an Exothermic Reaction", *AIChE Journal*, Vol. 38, pp. 363-376.
- Carnahan, B. et al., 1969, "Applied Numerical Methods", John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Jonhstone, H. F. and Leppla, P. W., 1934, "The Solubility of Sulfur Dioxide at Low Partial Pressures. The Ionization Constant and Heat of Ionization of Sulfurous Acid", *Journal of American Chemical Society*, Vol. 56, pp. 2233-2238.
- Press, W. H. et al., 1988, "Numerical Recipes in FORTRAN. The Art of Scientific Computing", Cambridge University Press, New York.
- Rabe, A. E. and Harris, J. F., 1963, "Vapor Liquid Equilibrium Data for Binary System, Sulfur Dioxide and Water", *Journal of Chemical and Engineering Data*, Vol. 8, pp. 333-336.
- Villadsen, J. and Michelsen, M. L., 1978, "Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation", Prentice-Hall, Inc., New Jersey.

ABSTRACT

A mathematical model is presented to predict the mass transfer velocity of a component in a process of absorption by bubbling. The system considered is non-isothermal with vaporization of the liquid, transient, and with the occurrence of a chemical reaction between the absorbed component and the liquid. An experimental apparatus was developed to study the absorption of SO_2 in pure water from a N_2/SO_2 mixture. The theoretical model was compared to the experimental data.



ABSORPTION OF AMMONIA FROM A GASEOUS MIXTURE WITH HYDROGEN IN A WETTED WALL ABSORBER IN LAMINAR NATURAL CONVECTION



Gilberto Martins
 Department of Mechanical Engineering
 Methodist University of Piracicaba
 13450-000-S.B. D'Oeste-SP-Brazil

José Tomáz Vieira Pereira
 Department of Energy
 Campinas State University
 13083-970 - Campinas - SP- Brazil

SUMMARY

This work investigates the laminar, counter-current, natural convection flow, heat and mass transfer resulting from the combined effects of thermal and mass diffusion occurring in a vertical open tube with its inside surface covered by a thin falling liquid film of ammonia-water solution, immersed in an ambient atmosphere of a gaseous mixture of ammonia and hydrogen. A numerical method is presented to solve the coupled transport equations of both, liquid and gaseous phase.

INTRODUCTION

Absorption refrigeration systems with inert gas require no mechanical work for operation, only a thermal source of relatively low temperature (around 180°C). All the fluid circulation of the cycle is maintained because of density variations due to temperature and concentration differences. In most of the refrigerators of this type the pair used is ammonia-water (refrigerant-absorbent) and the inert gas is either hydrogen or helium.

The absence of moving part, the silent operation and the possibility of use of different thermal sources to power the cycle makes this system appropriate for various uses such as in remote areas where no electricity is available, in hotel rooms or in trailers and motor-homes.

Despite its more than seventy years of commercial utilization, a critical review of the patents related to this area reported by Narayankhedkar and Prakash Maiya (1985) concluded that the development of the system has occurred by a process of shrewd design rather than by a systematic scientific approach.

This way, the effort to model the heat, mass and momentum transfer in each component of the equipment could greatly help to assess the influence of various geometrical, initial and boundary conditions in its performance, saving time and costly experimental apparatus.

Most of the literature about film absorption deals with the case where the mass transfer phenomenon is controlled mainly by the liquid phase resistance, that is, the absorption of a pure vapor with constant pressure into a liquid solution (Yih and Seagrave, 1980, Grossman, 1983, Andberg and Vliet, 1983, Yang and Wood, 1992, Ibrahim and Vinnicombe, 1993). In this case the mass transfer resistance is due to the difficulty of the vapor absorbed at the interface to diffuse into the liquid film, so, only the liquid phase is considered.

Yang and Chen (1991) demonstrate how the presence of non-condensable gases, even in very small quantities, influence the absorption process. They consider the gas flux co-current with the liquid film and in external developed flow.

In this work we consider the influence of the presence of non-condensable gases in an internal natural laminar convection flow of the gaseous mixture in counter-current with the liquid solution film in the flow development region.

ANALYSIS

The problem we analyse is the gas and liquid fluxes, heat and

mass transfer inside a vertical tube of radius R and length L. The liquid is a weak solution film of NH₃-H₂O with ammonia mass concentration c_{l0} and temperature T_{l0}, that wets the inside wall of the tube flowing down. Outside the tube there is a convective condition with ambient temperature T_∞ and global heat exchange coefficient U.

Both ends of the tube are open to an infinite reservoir with constant total pressure P, containing a gaseous mixture of NH₃-H₂ with ammonia mass concentration w_{g0} and temperature T_{g0}.

As the partial pressure of NH₃ in the gaseous mixture is higher than the vapor pressure of the NH₃ in the solution, absorption of the ammonia vapor occurs at the film surface. The difference between the bulk and interface concentrations of ammonia both, in the gas and liquid phases generate a diffusive flux of ammonia. In the gas it is from the bulk to the interface, while in the liquid it is from the interface to the bulk. The mass transfer from the gas to the liquid, as well as the associated heat transfer generate density variations in the gas that promote its movement upwards.

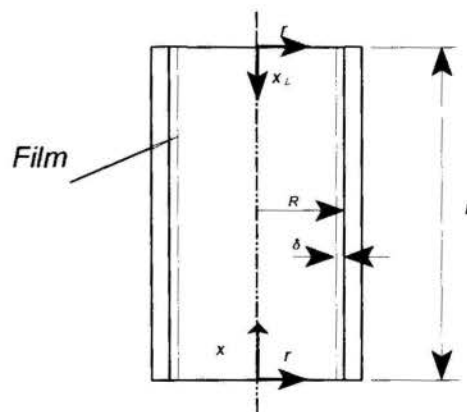


Figure 1 - Control Volume with the two domains: for the liquid and gas phase.

The heat generated by the absorption is transferred both to the gas and liquid.

The flow generated by this heat and mass transfer process is counter-current, with the liquid film flowing down next to the inside wall and the gas rising in the center of the tube according to Figure 1.

The control volume above is divided into two domains: the liquid film domain, with coordinates $0 \leq x_L \leq L$ and $(R-\delta) \leq r \leq R$, with the x_L axis ordinated from the top to the bottom of the tube; and the gas phase domain, with coordinates $0 \leq x \leq L$ and $0 \leq r \leq (R-\delta)$, with the x axis ordinated from the bottom of the tube to its top.

THE MODEL FOR THE LIQUID FILM

For the liquid phase, the major simplifying assumptions were:

1. The physical properties of the liquid solution are constant and independent of temperature and concentration.
2. The film is laminar and at steady-state.
3. The mass of vapor absorbed per unit time is small compared to the mass flow rate of liquid. Therefore it is assumed that the latter is constant, and so are the film thickness and average velocity.
4. Axial mass diffusion and heat conduction and radial convection in the film are not considered.
5. No shear forces are exerted on the liquid film by the vapor.
6. Equilibrium conditions exist at the interface between the vapor partial pressure in the mixture and the vapor pressure of the solution.

Under the above assumptions, the axial Momentum equation becomes:

$$\frac{v_L}{r} \frac{\partial u_L}{\partial r} + v_L \frac{\partial^2 u_L}{\partial r^2} + g = 0 \quad (1)$$

The boundary conditions of no-slip at the solid wall and negligible shear stress at the interface gas-liquid give:

$$\begin{aligned} r = R : \quad u_L &= 0 \\ r = (R-\delta) : \quad \frac{\partial u_L}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Integrating twice:

$$u_L = \frac{g}{2v_L} \left[\frac{R^2 - r^2}{2} + (R-\delta)^2 \ln\left(\frac{r}{R}\right) \right] \quad (3)$$

The mass flux is obtained integrating:

$$\dot{m}_L = 2\pi\rho_L \int_{R-\delta}^R u_L r dr \quad (4)$$

which results:

$$\dot{m}_L = \frac{\pi\rho_L g}{2v_L} \left\{ \frac{R^4}{4} - R^2(R-\delta)^2 + \frac{3(R-\delta)^4}{4} + \left[(R-\delta)^4 \ln\left(\frac{R}{R-\delta}\right) \right] \right\} \quad (5)$$

Under the same assumptions, the simultaneous heat and mass transfer in the system at steady-state is described by the energy and diffusion equations:

energy:

$$u_L \frac{\partial T_L}{\partial x_L} = \frac{\alpha_L}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_L}{\partial r} \right) \quad (6)$$

diffusion:

$$u_L \frac{\partial c_L}{\partial x_L} = \frac{D_L}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_L}{\partial r} \right) \quad (7)$$

THE MODEL FOR THE GASEOUS MIXTURE

For the gas phase, the major simplifying assumptions were:

1. The flow is laminar and at steady state.
2. Boundary-layer approximations are valid.
3. Viscous dissipation and pressure work are negligible.
4. Secondary phenomena effects are not considered, only the energy transport through the interdiffusion of species is accounted for.

The properties of the gaseous mixture are considered variable with temperature, concentration and total pressure and are calculated from the equations presented by Kouremenos and Stegou-Sagia (1988).

With these assumptions, the steady natural convection flow of the gaseous mixture in the vertical tube resulting from the combined buoyancy effects of heat and mass transfer can be described by the following equations:

Continuity:

$$r \frac{\partial(\rho_g u_g)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_g r v_g)}{\partial r} = 0 \quad (8)$$

Axial Momentum:

$$\begin{aligned} \rho_g u_g \frac{\partial u_g}{\partial x} + \rho_g v_g \frac{\partial u_g}{\partial r} = \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_g \frac{\partial u_g}{\partial r} \right) - \frac{dp_m}{dx} - (\rho_g - \rho_{g0})g \end{aligned} \quad (9)$$

Energy:

$$\begin{aligned} \rho_g c_{p_g} u_g \frac{\partial T_g}{\partial x} + \rho_g c_{p_g} v_g \frac{\partial T_g}{\partial r} = \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + \left[\rho_g D_g (c_{p_v} - c_{p_n}) \frac{\partial T_g}{\partial r} \frac{\partial w_g}{\partial r} \right] \end{aligned} \quad (10)$$

Concentration:

$$\rho_g u_g \frac{\partial w_g}{\partial x} + \rho_g v_g \frac{\partial w_g}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho_g D_g \frac{\partial w_g}{\partial r} \right) \quad (11)$$

The parameter p_m in Eq. (9) is known as pressure defect or motion pressure, which is the imbalance between the pressure within the channel and that which would exist in the same position if the concentration and temperature were kept constant (w_{g0} , T_{g0}) and no motion existed, according to Gebhart et al (1988).

The second term on the right side of Eq. (10) is the energy transport due to interdiffusion of species, and the parameters c_{p_v} and c_{p_n} are the specific heats of the pure vapor and non-absorbable gas respectively and were considered constant.

The total pressure is considered constant along the whole tube, since it is of the order of 2,5 MPa, while the pressure defect is smaller than 1 Pa for most of the cases studied.

The global mass conservation equation for the gas phase must be

satisfied for every axial location:

$$\int_0^{R-\delta} \rho u r dr = \int_0^{R-\delta} \rho_0 u_0 r dr - R \int_0^L \rho v_w dx \quad (12)$$

This equation is used in the iterative procedure to check whether the pressure gradient was correctly guessed.

BOUNDARY CONDITIONS

For the liquid phase we have:

At the entrance of the tube:

$$x_L = 0 : T_L = T_{L0}; c_L = c_{L0} \quad (13)$$

At the interface wall-liquid, the general boundary conditions can be stated as:

$$r = R : \frac{\partial c_L}{\partial r} = 0; T_L = T_w \quad (14)$$

Where T_w is evaluated from an energy balance at the wall, according to the external condition imposed to the tube. For a convective condition, when the overall heat transfer coefficient U and the ambient temperature T_w are known, the heat balance is given by:

$$k_L \left(\frac{\partial T_L}{\partial r} \right)_{r=R} = U(T_w - T_w) \quad (15)$$

For the gas phase we have:

At the entrance of the tube:

$$x = 0 : u_g = u_{g0}; T_g = T_{g0}; w_g = w_{g0}; p_m = -\rho_{g0} \frac{u_{g0}^2}{2} \quad (16)$$

At the exit of the tube:

$$x = L : p_m = 0 \quad (17)$$

At the center line of the tube:

$$r = 0 : \frac{\partial u_g}{\partial r} = \frac{\partial T_g}{\partial r} = \frac{\partial w_g}{\partial r} = 0; v_g = 0 \quad (18)$$

At the gas-liquid interface the equilibrium conditions and a local mass and energy balance between liquid and gas phase gives:

energy:

$$\frac{\dot{m}}{A} h_{abs} = k_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \Big|_{r=R-\delta} + k_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \Big|_{r=R-\delta} \quad (19)$$

mass:

$$\frac{\dot{m}}{A} = \rho_L D_L \frac{\partial c_L}{\partial r} \frac{1}{(1-c)} \Big|_{r=R-\delta} = \rho_g D_g \frac{\partial w_g}{\partial r} \frac{1}{(1-w)} \Big|_{r=R-\delta} \quad (20)$$

The radial velocity of the gas phase at the interface can be calculated, according to Eckert and Drake (1959) as:

$$v_i = - \frac{D_{gi}}{(1-w_{gi})} \frac{\partial w}{\partial r} \Big|_{r=R-\delta} \quad (21)$$

The axial velocity for the gas phase at the interface must be equal to the axial velocity of the liquid phase, due to the no-slip condition.

The other condition that must be satisfied is the thermodynamic equilibrium at the interface, which implies the equality of temperatures and between the pressure of ammonia vapour in equilibrium with the solution and the partial pressure of the ammonia in the gaseous mixture. These conditions are calculated using the equations for the NH_3-H_2O solution presented by Ziegler and Trepp (1984)

SOLUTION METHOD

Since the equations for the liquid and gas phase are coupled by the boundary conditions at $r=R-\delta$ and the flow is counter-current, the solution of each set of equations proceeds separately, using an iterative procedure and up-dating the boundary conditions at each run.

Starting with the liquid phase, and with the initial values of temperature, concentration and mass flux of liquid, Eq. (5) is used to discover the liquid film thickness (which is considered constant along the whole tube).

The control volume is then divided in two domains: the liquid film ($(R-\delta) \leq r \leq R$ and $0 \leq x_L \leq L$) and the gaseous phase domain: ($0 \leq r \leq (R-\delta)$ and $0 \leq x \leq L$). Irregular grids are then generated for both domains. In the axial direction the grid was generated using a PG ratio of 1/0.95 for the gas and 0.95 for the liquid, (80 points were used in the axial direction) since the strongest variations occur at the gas entry and the ratios must be inverse to obtain correspondence of points. For the radial direction the ratios used were 0.93 for the gas (29 points) and 1.0 for the liquid (15 points).

A fully implicit finite difference numerical method marching in the downstream direction was chosen and Eq. (6) and (7) for the liquid domain and (9), (10) and (11) for the gas domain were then transformed in their finite difference form approximating the axial convection terms by upwind differences and radial diffusion and convection terms by central differences. The discretization procedure used was proposed by Hirsch (1988) so as to permit the use of irregular grids. Each equation then formed a system of finite difference equations which is efficiently solved by the TDMA algorithm.

The continuity equation for the gas phase, Eq. (8) can be integrated numerically in r to find the radial velocity v :

$$v = - \frac{1}{r \rho_g} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^r \rho_g u_g r dr \quad (22)$$

A brief outline of the solution procedure is given below:

(a) Assume a partial pressure of NH_3 distribution in the axial direction (a uniform distribution can be used) and solve the liquid film equations (6) and (7) as if the gas were pure NH_3 at a total pressure equal to its partial pressure.

(b) This will give a temperature and gas concentration distribution at the interface which is used to solve the gas phase equations.

(c) The gas phase solution provides now the temperature and concentration gradients along the interface which will, from this moment on, substitute the boundary conditions of the first run of equations for the liquid phase.

(d) procedures (b) and (c) are then repeated until the conditions at the interface (temperature, gas and solution concentrations) converge to a predetermined precision.

Details of the solution of the equations for the gas phase are given in Martins (1996) and Martins and Pereira (1995).

RESULTS AND DISCUSSION

Due to space limitations only one case is presented in this work. The values of the main parameters used in this solution are presented in table 1 below:

Table 1 - Values of the main parameters for the case presented.

Parameter	symbol	unit	value
tube length	L	m	0.5
tube radius	R	m	0.005
solution mass flux	\dot{m}	kg/s	0.0003
solution concentration	c_{L0}	kg/kg	0.15
solution temperature	T_{L0}	°C	35
total pressure	P	bar	25
gas concentration	w_{g0}	kg/kg	0.55
gas temperature	T_{g0}	°C	30
global heat exc. coef.	U	W/m ² K	50
external temperature	T_{∞}	°C	32

The model presented has been solved for the parameters in table 1. Figures 2, 3 and 4 show respectively the axial velocity, concentration and temperature profiles for the gas phase at various axial positions along the tube.

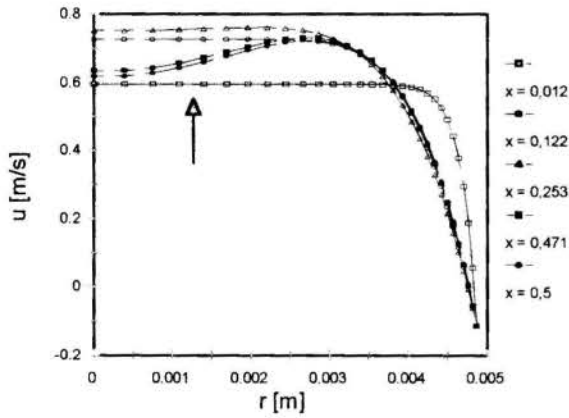


Figure 2 - Axial velocity profiles for the gas phase at various axial positions along the tube.

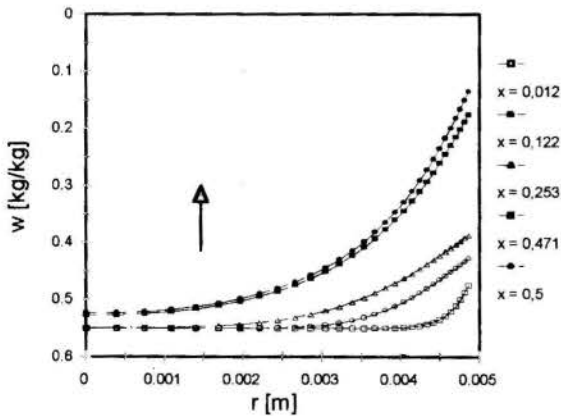


Figure 3 - Concentration profiles for the gas phase at various axial positions along the tube.

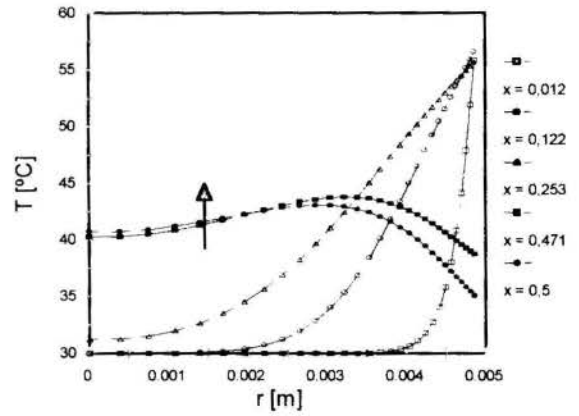


Figure 4 - Temperature profiles for the gas phase at various axial positions along the tube.

As can be seen from Figure 2, the velocity profile, which is uniform at the entrance of the gas (bottom of the tube), tends to a profile with maximal velocity near the interface, not parabolic as would be expected for laminar flow inside a duct.

Since the gas flow is induced by the concentration and temperature differences, and, as Figures 3 and 4 show, these differences are higher near the interface (in the case of concentration, the condition at the center of the tube remains almost unchanged until its exit), the resulting velocity profile tends to this side development.

Figure 5 shows the axial velocity profile for the liquid phase, which is considered constant along the whole tube.

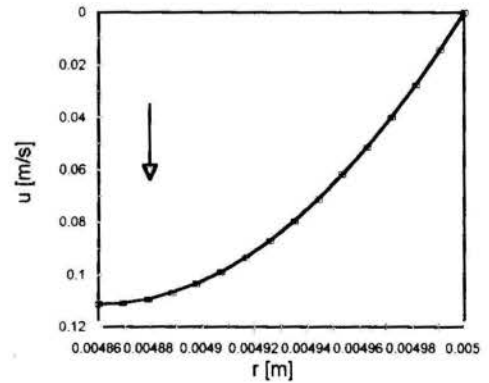


Figure 5 - Velocity profile for the liquid film.

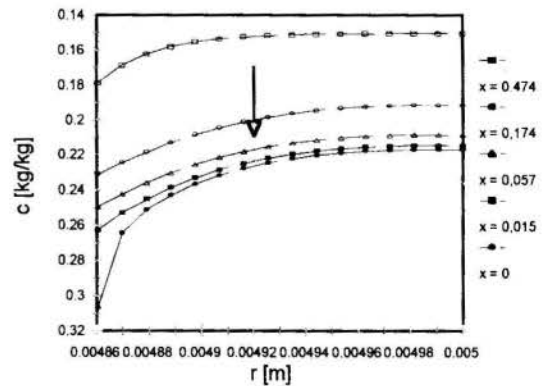


Figure 6 - Concentration profiles for the liquid film at various axial positions along the tube.

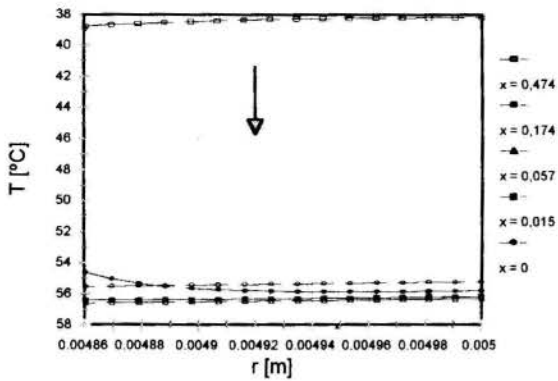


Figure 7 - Temperature profiles for the liquid film at various axial positions along the tube.

Figures 6 and 7 show respectively the concentration and temperature profiles for the liquid film at different positions along the tube.

The axial coordinate represented in the figures above (even for the liquid film) is the one for the gas domain, which means that $x = 0$ is the bottom of the tube (gas entry and liquid exit), while $x = 0.5$ is the top of the tube (gas exit and liquid entry).

It can be observed from Figure 6 that even for very thin films, as is the case, the concentration gradients near the interface are rather steep along the whole tube, which indicates the importance of the resistance to mass transfer in the liquid phase.

From the temperature profiles, presented in Figure 7, we notice that the resistance to heat transfer is not so important, since the gradients are much milder.

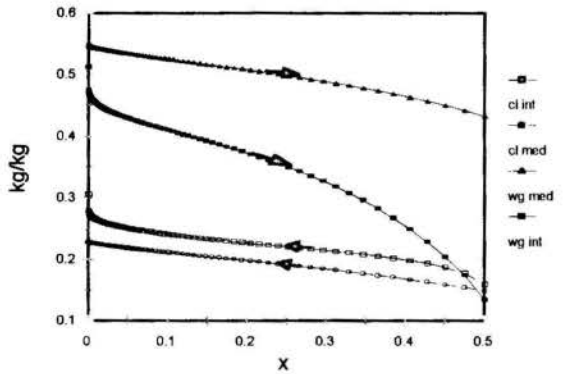


Figure 8 - Interface and bulk concentrations of gas and liquid phases along the tube.

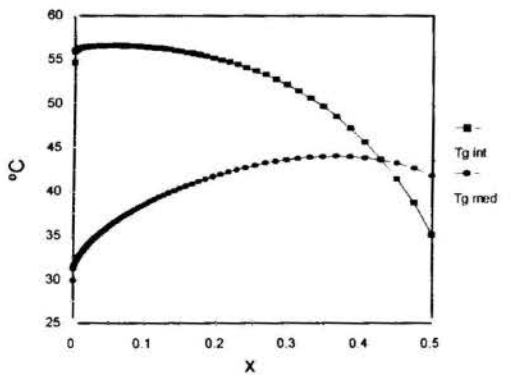


Figure 9 - Interface and bulk temperatures of the gas phase along the tube.

Figure 8 presents the interface and bulk concentrations for both phases along the tube and Figure 9 presents the interface and bulk temperatures for the gas phase (the bulk temperature of the liquid film is practically the same as the interface, which is common for both phases).

Figure 9 shows that the higher temperatures at the interface are located near the gas entry (bottom of the tube) indicating that it is the place of higher mass transfer density.

Figure 8 demonstrates that, for the liquid film, the concentration profile develops quickly, near the entrance of the liquid, then, for most of the tube length, the difference between bulk and interface concentration keeps practically constant, increasing a little near the liquid exit. This can also be observed in Figure 6.

Figures 10 and 11 show the mass and heat flux densities along the tube.

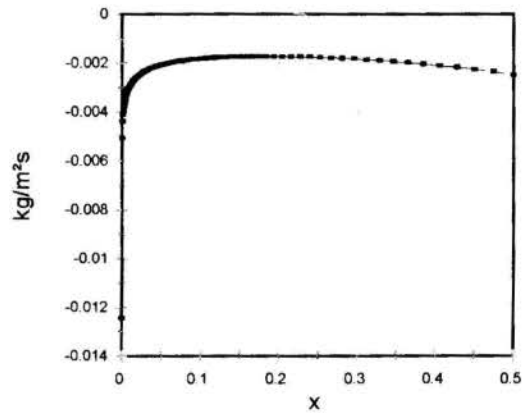


Figure 10 - Mass flux density at interface along the tube.

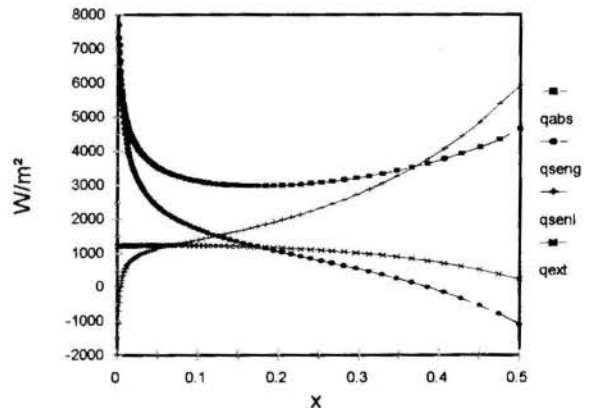


Figure 11 - Heat flux densities along the tube.

We can observe from Figure 10 that near the gas entry there is really a higher mass flux density, which stabilizes in the central region of the tube and increases again near the gas exit.

From Figure 11 we observe that the absorption heat flux (q_{abs}) has a very similar behaviour to the mass flux, since it is directly proportional to it. This heat flux, generated at the interface, is transferred both to gas (q_{seng}) and liquid (q_{senl}) by conduction. In fact, for every axial location, the sum of these two heat fluxes (q_{seng} and q_{senl}) equals the heat generated by the absorption (q_{abs}). This Figure presents also the density of heat flux exchanged to the external ambient (q_{ext}), which is higher near the gas entry due to the higher temperatures of this region.

Finally, Figures 12 and 13 show the concentration and temperature profiles at various axial positions along the liquid film for the case of absorption from pure ammonia vapor at a total pressure

corresponding to the partial pressure of the case we analyzed so far, which corresponds to 3.16 bar. All the other parameters were kept constant.

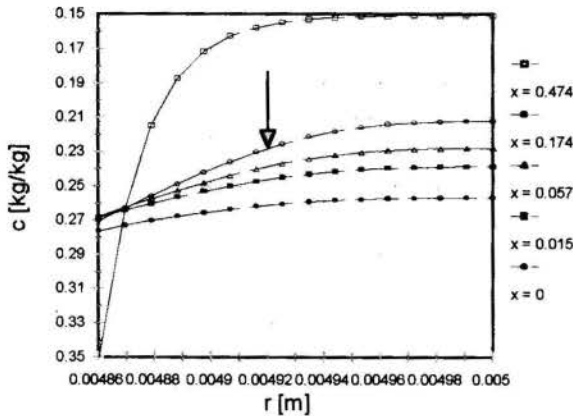


Figure 12 - Concentration profiles for the liquid film at various axial positions for absorption of pure ammonia.

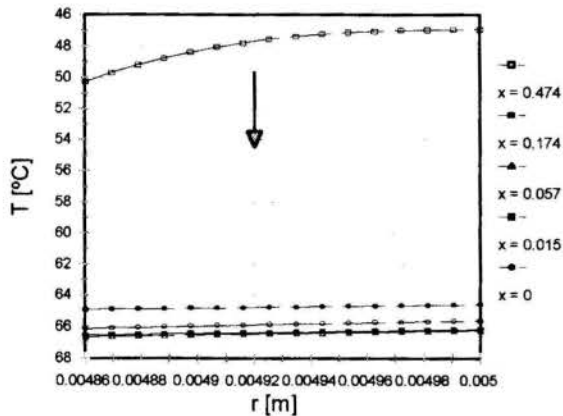


Figure 13 - Temperature profiles for the liquid film at various axial positions for absorption of pure ammonia.

Comparing Figures 12 and 13 to Figures 6 and 7, we notice that the presence of the hydrogen decreases the absorption of ammonia by the solution. The higher absorption rates obtained in the case of pure ammonia vapor, though, causes higher temperatures at the interface, which increases the equilibrium pressure of the solution, slowing down the process.

CONCLUSIONS

The presence of hydrogen as inert gas in the absorber of triple-fluid absorption refrigeration systems represents a considerable resistance to the mass transfer process.

In the case analyzed, the resistance to mass transfer of the liquid film cannot be neglected, since it is of the same magnitude of the previous.

In the case of absorption of pure ammonia vapor, the process is

highly sensitive to the external heat exchange coefficient, since the increase of film temperature inhibits the absorption. This effect is also noticeable in the presence of hydrogen.

The model presented here can be used as a tool for design for absorbers, and, coupled with similar models for the evaporator (Martins, 1996), for the design of the whole gas circulation circuit in absorption refrigeration systems with inert gas.

REFERENCES

- Andberg, J. W. and Vliet, G. C., 1987, "A Simplified Model for Absorption of Vapor into Liquid Films Flowing over Cooled Horizontal Tubes", (NT 87-29-5), pp. 2454-2462.
- Eckert, E. R. G. and Drake, R. M., 1959, "Heat and Mass Transfer" 2nd ed. McGraw-Hill Book Company, inc., Tokyo, 530 pages. p. 453.
- Gebhart, B.; Jaluria, Y.; Mahajan, R. L.; Sammakia, B., 1988, "Buoyancy-Induced Flows and Transport" 1st ed. Hemisphere Publishing Corporation, New York, 971 pages. p. 20.
- Grossman, G., 1983, "Simultaneous Heat and Mass Transfer in Film Absorption under Laminar Flow", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 26, n. 3, pp. 357-371.
- Hirsch, C., 1988, "Numerical Computation of Internal and External Flows", 1st ed. John Wiley & Sons Ltd., Vol. 1: Fundamentals of Numerical Discretization in Wiley Series in Numerical Methods in Engineering, 515 p. (p.196).
- Ibrahim, G. A. and Vinnicombe, G. A., 1993, "A Hybrid Method to Analyse the Performance of Falling Film Absorbers", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 36, n. 5, pp. 1383-1390.
- Kouremenos, D. A. and Stegou-Sagia, A., 1988, "Modelling of Thermodynamic and Transport Properties of NH_3-H_2 Gas Mixtures for Pressures between 17.5 and 27.5 bar", *Proceedings of the International AMSE Conference*, Sorrento, Vol. 3 (2, Modelling & Simulation, sept.29-oct.1), pp. 117-130.
- Martins, G. and Pereira, J. T. V., 1995, "Evaporation and Diffusion of Ammonia in Hydrogen Inside a Vertical Open Tube Induced by the Buoyancy Effects of Thermal and Mass Diffusion", *Proceedings, III Congresso Ibero-Americano de Ar Condicionado e Refrigeração*, Vol I, pp. 29-37. São Paulo.
- Martins G., 1996, "Modelagem dos Fenômenos de Transporte no Circuito de Gás de um Sistema de Refrigeração por Absorção de Amônia com Hidrogênio como Gás Inerte", Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, SP.
- Narayankhedkar, K. G. and Prakash Maiya, M., 1985, "Investigations on Triple Fluid Vapour Absorption Refrigerator", *International Journal of Refrigeration*, Vol. 8, pp. 335-342.
- Yang, R. and Wood, B. D., 1992, "A Numerical Modeling of an Absorption Process on a Liquid Falling Film", *Solar Energy*, Vol. 48, pp. 195-198.
- Yih, Siu-M. and Seagrave, R. C., 1980, "Mass Transfer in Laminar Falling Liquid Films with Accompanying Heat Transfer and Interfacial Shear", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 23, pp. 749-758.
- Ziegler, B. and Trepp, C., 1984, "Equations of State for Ammonia-Water Mixtures", *International Journal of Refrigeration*, Vol. 7, n. 2, pp. 101-106.
- Acknowledgement* - The authors wish to acknowledge the financial support for the presentation of this work by the FAPESP.



A SERIES SOLUTION FOR THE FILM MODEL OF MULTICOMPONENT DIFFUSION

Claudio Olivera-Fuentes

Departamento de Termodinámica y Fenómenos de Transferencia
Universidad Simón Bolívar
AP 89000, Caracas 1086-A, Venezuela



SUMMARY

The series method of solution of ordinary differential equations is applied to steady-state one-dimensional multicomponent diffusion problems typical of the film model of mass transfer. Initial-value problems with known compositions and fluxes at the phase boundary require from 5 to 15 terms to reproduce the results of the analytical matrix solution with precision better than 10^{-6} mole fraction. Boundary-value problems with unknown transport fluxes require iterative "shooting", and are parameterized into initial-value form by iterating on the net transport fluxes, or on the composition gradients at the film boundary, taking from 4 to 11 iterations to match the appropriate boundary condition to better than 10^{-6} mole fraction.

INTRODUCTION

Molecular diffusion in multicomponent systems is described by the Maxwell-Stefan constitutive equations (Hirschfelder *et al.*, 1954; Taylor and Krishna, 1993). For ideal gas systems at constant T and P , the equations may be written in term of net and diffusive transport fluxes as

$$\nabla y_i = \sum_{k=1}^n \frac{y_i \mathbf{N}_k - y_k \mathbf{N}_i}{cD_{ik}} = \sum_{k=1}^n \frac{y_i \mathbf{J}_k - y_k \mathbf{J}_i}{cD_{ik}} \quad (1)$$

where D_{ik} is the ordinary (Fick's law) diffusion coefficient of the binary system of components i and k . The highly coupled nature of these equations makes analytical solution of multicomponent problems difficult. One approximate method defines "effective" diffusivities for each component and reduces Eq. (1) to a set of pseudo-binary diffusion cases; since these diffusivities depend not only on system properties, but also on the fluxes, this approach can be used mainly when flux ratios are known or fixed in advance. Exact algebraic solutions exist for a limited number of steady-state problems subject to specially simple boundary conditions and flux constraints, e.g. one component diffusing through a stagnant mixture, several trace species diffusing through a common solvent, and a few other, mostly ternary, cases (Toor, 1957; Hsu and Bird, 1960; Sherwood *et al.*, 1975; Zazicky and Chacuk, 1993). Otherwise, general methods of solution must resort to mathematical tools of matrix algebra and calculus.

The best known of the exact matrix solutions was obtained for the case of steady-state one-dimensional transport across a film of thickness δ by Krishna and Standart (1976), who defined the binary film mass transfer coefficients

$$K_{ik} \equiv \frac{cD_{ik}}{\delta} \quad , \quad i, k = 1, \dots, n \quad , \quad i \neq k \quad (2)$$

and solved the continuity and constitutive equations

$$\frac{dN_i}{d\eta} = \frac{dJ_i}{d\eta} + N \frac{dy_i}{d\eta} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{dy_i}{d\eta} = \sum_{k=1}^n \frac{y_i N_k - y_k N_i}{K_{ik}} = \sum_{k=1}^n \frac{y_i J_k - y_k J_i}{K_{ik}} \quad (4)$$

with boundary conditions

$$y_i = y_i^0 \quad \text{at} \quad \eta = 0 \quad , \quad y_i = y_i^\delta \quad \text{at} \quad \eta = l \quad (5)$$

where $\eta \equiv z/\delta$ is a dimensionless coordinate. Only $n-1$ of each of Eq. (4) and (5) are independent, because compositions must sum to unity and their derivatives must sum to zero. Thus, the above set of equations can formally be solved for the composition profiles, but one additional piece of information or "determinacy condition" is required to compute the transport fluxes. Krishna and Standart (1979) assumed this to be in general a linear dependence among the net fluxes,

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i N_i = 0 \quad (6)$$

where the numerical constants α_i express some external constraint on the fluxes, e.g. $\alpha_1 = \dots = \alpha_{n-1} = 0$, $\alpha_n = 1$ for diffusion of component n through $n-1$ stagnant species; $\alpha_1 = \dots = \alpha_n = 1$ for equimolar counterdiffusion; $\alpha_i = \nu_i$ (stoichiometric coefficients) for diffusion with heterogeneous chemical reaction, *etc.* The Krishna-Standart solution gives the composition profiles in matrix form as

$$(y - y^0) = \{ \exp[\Phi] \eta - \langle I \rangle \} \{ \exp[\Phi] - \langle I \rangle \}^{-1} (y^\delta - y^0) \quad (7)$$

where $[\Phi]$ is a $(n-1) \times (n-1)$ matrix function of the net fluxes (see Appendix), and $\langle I \rangle$ is the identity matrix.

In the present work, the classical method of solution of ordinary differential equations by power series expansion (e.g. Kreyszig, 1972) is applied to the above problem. The recursion formula that generates the series coefficients is derived, and the solution is shown to be equivalent to the analytical results. Numerical implementation of the solution is developed, both for the initial-value problem of known initial compositions and net fluxes, and for the more important boundary-value problem of known compositions at both ends of the gas film.

DEVELOPMENT OF THE POWER SERIES SOLUTION

Diffusive fluxes are not essential to the solution, and can always be computed afterwards if desired. Leaving them out of the analysis, the system to be solved involves the constitutive equations

$$y_i \equiv \frac{dy_i}{d\eta} = \sum_{k=1}^n \frac{y_i v_k - y_k v_i}{D_{ik}} \quad (8)$$

where

$$v_i \equiv \frac{N_i \delta}{c} = \text{constant} \quad (9)$$

as required by the continuity Eq. (3). Thus, Eq. (8) forms a system of first-order ODEs with constant coefficients. Assume that its general solution can be represented as an infinite power series

$$y_i = \beta_{i0} + \beta_{i1}\eta + \beta_{i2}\eta^2 + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} \beta_{im} \eta^m \quad (10)$$

In particular, notice for later reference that

$$y_i(0) = \beta_{i0} \quad , \quad y_i(1) = \sum_{m=0}^{\infty} \beta_{im} \quad (11)$$

The composition gradient is then given by

$$y_i = \beta_{i1} + 2\beta_{i2}\eta + 3\beta_{i3}\eta^2 + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)\beta_{i,m+1}\eta^m \quad (12)$$

and, in particular,

$$y_i(0) = \beta_{i1} \quad , \quad y_i(1) = \sum_{m=1}^{\infty} m\beta_{im} \quad (13)$$

Substituting Eq. (10) and (12) into Eq. (8) and regrouping terms gives

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+1)\beta_{i,m+1}\eta^m = \sum_{m=0}^{\infty} \left[\sum_{k=1}^n \frac{v_k \beta_{im} - v_i \beta_{km}}{D_{ik}} \right] \eta^m \quad (14)$$

On equating coefficients of like powers of η , the recursion formula for the series expansion coefficients is obtained as

$$\beta_{i,m+1} = \frac{1}{m+1} \sum_{k=1}^n \frac{v_k \beta_{im} - v_i \beta_{km}}{D_{ik}} \quad (15)$$

Although this equation is valid for all values of i and m , it should be clear that the series coefficients are not linearly

independent. The constraint that compositions sum to zero means that

$$\sum_{i=1}^n y_i(\eta) = \sum_{i=1}^n \sum_{m=0}^{\infty} \beta_{im} \eta^m = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{i=1}^n \beta_{im} \right) \eta^m = 1 \quad (16)$$

therefore

$$\sum_{i=1}^n \beta_{i0} = 1 \quad , \quad \sum_{i=1}^n \beta_{im} = 0 \quad (m = 1, 2, \dots) \quad (17)$$

It is easy to verify that Eq. (11) and (15) satisfy Eq. (17) implicitly and are thus consistent with this requirement. It is also straightforward to show that the present series solution is equivalent to the analytical matrix solution independently derived by Turevskii *et al.* (1974), and by Krishna and Standart (1976). The proof is given in the Appendix.

Solution of the multicomponent film model is thus simply a matter of obtaining the complete set of series coefficients, β_{im} . We see from Eq. (15) that for this to be possible, the flux constants v_i and the zero-order coefficients β_{i0} must first be available. Two important cases are analyzed next.

KNOWN FLUXES: INITIAL-VALUE PROBLEM

Consider the boundary (initial-value) conditions

$$y_i(0) = y_i^0 \quad (18)$$

and the determinacy conditions

$$v_i = v_i^0 \quad (19)$$

i.e. the net fluxes are known or assigned *a priori*. Solution is then direct. Eq. (11) gives the zero-order coefficients simply as

$$\beta_{i0} = y_i^0 \quad (20)$$

and the remaining coefficients follow from Eq. (15). Composition profiles can now be computed up to the outer film boundary.

The only practical aspect to be worked out is the number M of actual terms ($m = 0, \dots, M$) that must be computed for the power series to converge to within a given precision. This is best investigated by means of representative numerical examples taken from the literature. In these examples, summarized in Table 1, the net fluxes are in fact those computed by the original authors using the exact matrix

Table 1. Mass transfer examples for test of the series solution

	Example 1	Example 2	Example 3
Components			
(1)	acetone	ethanol	pentane
(2)	benzene	tert-butanol	ethanol
(3)	helium	water	water
Boundary conditions			
$y_1^0 - y_1^\delta$	0.10 - 0.02	0.65 - 0.50	0.630 - 0.590
$y_2^0 - y_2^\delta$	0.00 - 0.28	0.13 - 0.14	0.165 - 0.095
$y_3^0 - y_3^\delta$	0.90 - 0.70	0.22 - 0.36	0.205 - 0.315
Flux constants, mm ² /s			
v_1	-0.39	2.695	1.32
v_2	-9.43	0.1448	0.873
v_3	0	-2.840	-1.55
Diffusivities, mm ² /s			
D_{12}	4	8	7.27
D_{13}	41	21	14.40
D_{23}	39	17	20.90
Determinacy			
$\alpha_1 : \alpha_2 : \alpha_3$	0 : 0 : 1	1 : 1 : 1	22.5 : 40.5 : 42.0

method solution of Krishna and Standart (1976) for assigned compositions at $\eta = 0$ and at $\eta = 1$. Hence, the accuracy of the present series solution can be judged from how closely it reproduces these already known boundary compositions, as shown in Table 2.

Table 2. Convergence of power series expansion for the initial-value problems of Examples 1-3

	Example 1	Example 2	Example 3
M	14	5	5
$y_1(I)$	0.020027	0.500011	0.590087
$y_2(I)$	0.279968	0.139996	0.094950
$y_3(I)$	0.700005	0.359993	0.314963

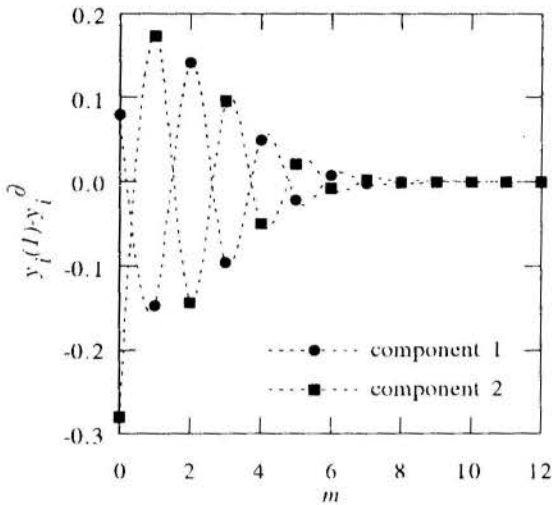


Figure 1. Convergence of boundary compositions for the initial-value problem of Example 1.

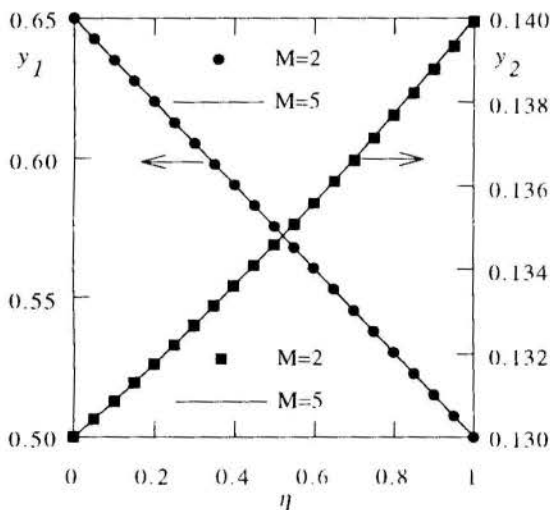


Figure 2. Composition profiles for the initial value problem of Example 2.

Example 1 concerns transfer of acetone (1) and benzene (2) through stagnant helium (3) (Krishna and Standart, 1976). This is a relatively difficult problem in which compositions vary from a binary benzene-free mixture at $\eta = 0$, to a mixture of benzene and helium with only a small fraction of acetone at η

$= 1$. The sequence of mole fractions $y_i(I)$, computed from Eq. (11) as each term is added to the series, is shown in Figure 1, which clearly depicts the oscillatory nature of the convergence process in this case. Fifteen terms (*i.e.* $M = 14$) are necessary for the boundary compositions to stabilize at their final values with precision better than 10^{-6} mole fraction. A less demanding criterion would naturally be satisfied in fewer iterations, *e.g.* $M = 8$ is sufficient for convergence to 10^{-3} mole fraction.

Example 2 corresponds to equimolar mass transfer of ethanol(1), tert-butanol (2) and water (3) (Taylor and Krishna, 1993). Convergence in this case proceeds steadily to the final values. Computations were stopped when the series coefficients first dropped below 10^{-6} in absolute value, but a second-order expansion would be adequate for most practical purposes, as may be seen from Figure 2, in which composition profiles for $M = 2$ are shown to be virtually identical with the final converged profiles for $M = 5$.

Example 3 involves non-equimolar mass transfer in a ternary mixture of pentane (1), ethanol (2) and water (3) with externally set flux ratios (Krishna, 1981; Taylor and Smith, 1982). Convergence of the series is again quite fast, similar to Example 2; taking $M = 2$ will give composition profiles accurate to better than 10^{-3} mole fraction, and $M = 5$ improves this to better than 10^{-6} .

UNKNOWN FLUXES: BOUNDARY-VALUE PROBLEMS

The more usual situation in engineering involves known compositions at both ends of the film (*e.g.* "interface" and "bulk" mole fractions),

$$y_i(0) = y_i^\theta, \quad y_i(1) = y_i^\delta \quad (21)$$

plus a determinacy condition of the general form of Eq. (6),

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i v_i = 0 \quad (22)$$

Solution of the problem must now yield the composition profiles and the unknown transport fluxes. Some sort of iterative procedure, *e.g.* "shooting", is clearly required, as happens also with the matrix methods of solution in these cases. A first obvious alternative is to parameterize the problem into initial-value form by assuming a vector of transport fluxes N_i ($i = 1, \dots, n$), to solve this as explained in the preceding section, and to repeat the entire procedure with new fluxes until the computed bulk-phase compositions $y_i(1)$ match the assigned boundary condition. Generating improved sets of fluxes in a consistent manner is of course no trivial matter; in the "bootstrap" method developed by Krishna and Standart (1976) for the analytical matrix solution, this is done by solving at each step for the vector of diffusion fluxes (J) at either $\eta = 0$ or $\eta = 1$, the net fluxes being then obtained with help of the determinacy condition as

$$N_i = J_i - y_i \frac{\sum_{k=1}^n \alpha_k J_k}{\sum_{k=1}^n \alpha_k y_k} \quad (23)$$

Adapting this method for the present purposes gives the following algorithm:

(1) Assume an initial set of net transport fluxes. In the present work, this is obtained from an analogue of the linearized theory of multicomponent diffusion proposed by Foor (1964) and Stewart and Prober (1964), *i.e.* Eq. (8) is solved for the net fluxes under assumptions of linear composition profiles and average film compositions,

$$y_i^\delta - y_i^\theta = \sum_{k=1}^n \frac{\bar{y}_i v_k - \bar{y}_k v_i}{D_{ik}}, \quad \bar{y}_i \equiv \frac{y_i^\theta + y_i^\delta}{2} \quad (24)$$

Since only $n-1$ of these equations are independent, the determinacy condition, Eq. (22) must also be invoked.

(2) Compute the series expansion coefficients β_{im} for the resulting initial-value problem. Calculate the bulk-phase compositions $y_i(l)$ and check against the corresponding boundary conditions y_i^δ .

(3) If boundary conditions are not satisfied to the required accuracy, obtain new flux estimates from the composition gradients $y_i'(l)$ by solving Eq. (8) and (13b)

$$y_i'(l) \approx \sum_{m=1}^M m \beta_{im} \approx \sum_{k=1}^n \frac{y_i^\delta v_k - y_k^\delta v_i}{D_{ik}} \quad (25)$$

once again complemented by Eq. (22).

(4) Repeat from step (2) as necessary.

Eq. (25) assumes that the composition gradients computed at $\eta = l$ are good estimates of the true values, even when the corresponding mole fractions have not yet converged. Because of the nature of the series solution, the equivalent equation at $\eta = 0$ is satisfied identically (*i.e.* the series expansion is exact at this point) and cannot be used for shooting purposes.

The results of applying this bootstrap technique to the three example problems of Table 1 are summarized in Table 3.

The convergence criterion on the boundary compositions was set at 10^{-6} mole fraction. For Example 1, this was achieved in 17 iterations, although only 5 of these were required for a less demanding precision of 10^{-3} mole fraction and for the fluxes to attain essentially definitive values, as shown in Figure 3.

The bootstrap procedure did not converge for Examples 2 and 3. Even though the initial flux estimates supplied by Eq. (24) were very close to the correct values, compositions diverged slowly but steadily away from the solution. These two Examples were however solved simply by switching the boundary conditions, *i.e.* by reversing the z axis to point from the bulk phase to the interface, a procedure originally suggested for the matrix method of solution by Taylor and Webb (1981), who noticed that one direction of integration was usually stable when the opposite one failed (diverging even if the initial flux estimates were in fact the exact values), apparently as a result of the reversal in sign of the transport fluxes. Although Table 3 indicates a fairly large number of iterations for these two problems, it should be noted that the very good initial guesses provided by Eq. (26) resulted in computed compositions that were correct to four significant digits even at the first iteration, the remaining iterations being spent only in refining these values to the final accuracy imposed on the procedure, as shown in Figure 4 for the particular case of Example 3.

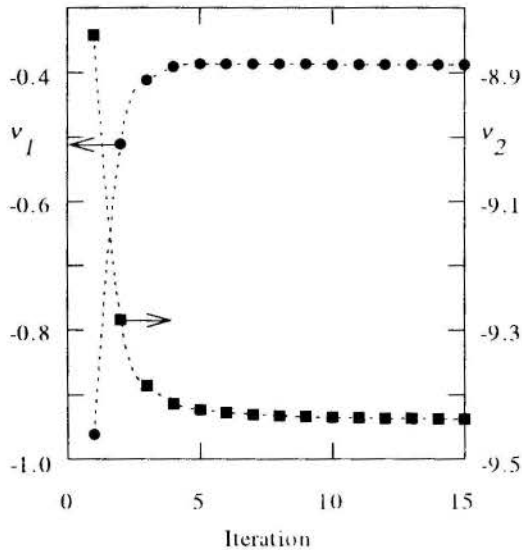


Figure 3. Convergence of net fluxes in the bootstrap solution of Example 1.

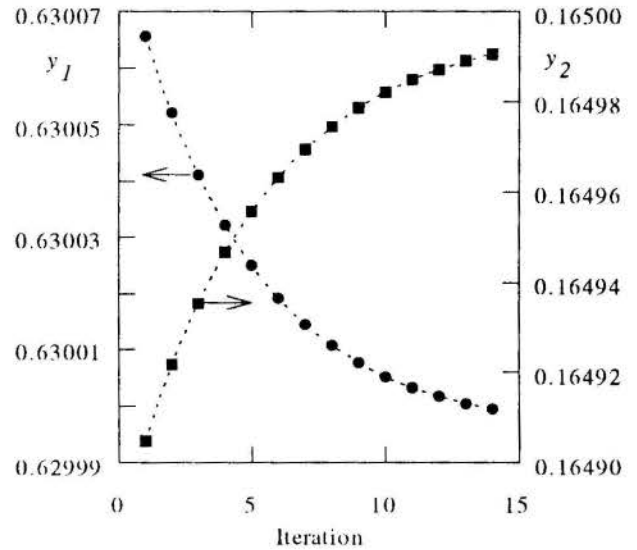


Figure 4. Convergence of boundary compositions in the bootstrap solution of Example 3.

Table 3. Convergence of fluxes and boundary compositions for the boundary-value problems of Examples 1 - 3.

Method	Example 1	Example 2	Example 3
BOOTSTRAP	(Direct)	(Reverse)	(Reverse)
Iterations	17	11	14
v_1 mm ² /s	-0.389035	-2.695173	-1.321984
v_2 mm ² /s	-9.430697	-0.144882	-0.872828
v_3 mm ² /s	0	2.840055	1.549861
Number of terms M	14	5	5
y_1	0.020000	0.649992	0.650000
y_2	0.279991	0.130007	0.164990
y_3	0.700009	0.220001	0.205010
BALLISTIC	(Reverse)	(Direct)	(Direct)
Iterations	28	4	4
v_1 mm ² /s	0.389080	2.695240	1.322086
v_2 mm ² /s	9.430972	0.144781	0.872948
v_3 mm ² /s	0	-2.840021	-1.550031
Number of terms M	12	5	5
y_1	0.099997	0.500001	0.589999
y_2	0.000007	0.140002	0.094999
y_3	0.899996	0.359997	0.315001

Given the stability problems observed in the bootstrap algorithm, it was considered of interest to explore alternative shooting techniques that could improve on this performance. Since it was obvious from Eq. (24) and (25) that iteration on the fluxes depends on the availability of increasingly accurate values of the composition gradients, the new algorithm was conceived as an iteration directly on the gradients $y_i'(0)$ at $\eta = 0$. This may be described graphically as an attempt to "aim" the composition profiles in the correct direction from the shooting point, so that they "hit" the target compositions at $\eta = 1$. Thus, if for example a computed composition $y_i(1)$ comes out too high, it may be reasoned that the initial "elevation" at which the profile was pointed was correspondingly too high, and a proportional correction may be applied to the assumed gradient. Eq. (11) and (13), combined as

$$\frac{y_i(1) - y_i(0)}{y_i'(0)} = \frac{1}{\beta_{i1}} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_{im} \quad (26)$$

show that, even if the series coefficients are not the correct ones, the ratio of computed composition differences to assumed initial gradients may well be close to the true value, because of an approximate compensation of errors. The following correction formula thus suggests itself:

$$[y_i'(0)]^{new} = y_i'(0) \frac{y_i^\delta - y_i^0}{y_i(1) - y_i^0} \quad (27)$$

which is very similar to the empirical iteration scheme proposed, on an entirely intuitive basis, by Olivera-Fuentes and Pasquel-Guerra (1987) in their numerical solution of the multicomponent penetration model. The present "ballistic" algorithm may now be summarized as follows:

(1) Assume an initial set of composition gradients $y_i'(0)$ at $\eta = 0$. An obvious choice is that of linear profiles,

$$y_i'(0) = y_i^\delta - y_i^0 \quad (28)$$

(2) Compute the corresponding fluxes from Eq. (8),

$$y_i'(0) = \sum_{k=1}^n \frac{y_i^0 v_k - y_k^0 v_i}{D_{ik}} \quad (29)$$

together with the determinacy condition, Eq. (22).

(3) Compute the series expansion coefficients β_{im} for the resulting initial-value problem. Calculate the bulk-phase compositions $y_i(1)$ and check against the corresponding boundary conditions y_i^δ .

(4) If boundary conditions are not satisfied to the required accuracy, obtain new gradient estimates from Eq. (27).

(5) Repeat from step (2) as necessary.

Application of this procedure to the rebellious Examples 2 and 3 proved quite successful. Convergence for the original "direct" problems was achieved in only 4 iterations, as reported in Table 3; exactly the same number of iterations was required for the corresponding "reverse" problems, showing the method to be equally stable in both directions.

The ballistic algorithm failed however to converge for Example 1. As shown in Table 3, it did converge for the corresponding reverse problem in 28 iterations, 15 of which were necessary to match the boundary compositions to better than 10^{-3} mole fraction. Figure 5 shows that the convergence pattern of the composition gradients was oscillatory; gradient averaging between iterations, *i.e.* applying only half the correction indicated by Eq. (27),

$$[y_i'(0)]^{new} = \frac{1}{2} y_i'(0) \left(1 + \frac{y_i^\delta - y_i^0}{y_i(1) - y_i^0} \right) \quad (30)$$

was tried as a possible way of accelerating convergence, but failed to reduce the number of iterations, whether introduced right from the start, or after a few preliminary iterations had been performed. Since it was clear that in this case the "bootstrap" procedure performs much better, no further attempts were made to improve the algorithm at this exploratory stage.

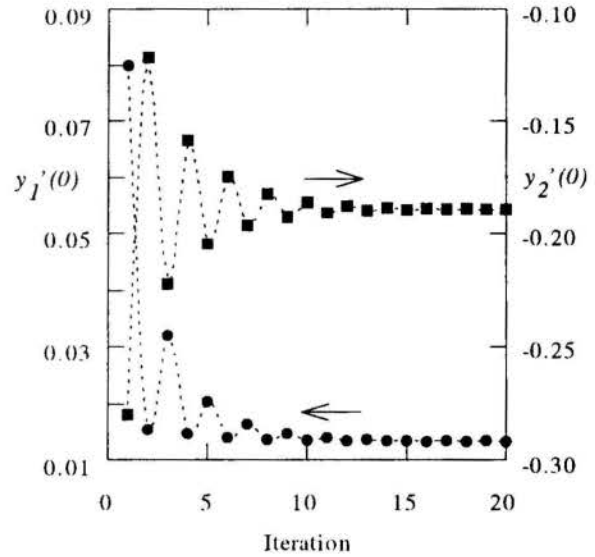


Figure 5. Convergence of composition gradients in the ballistic solution of Example 1.

COMMENTS AND CONCLUSIONS

The series method for solving ordinary differential equations has been applied to the film model of multicomponent diffusion. The method is fully equivalent to the analytical solution developed by Krishna and Standart (1976), but explicitly avoids the use of matrix computations. In addition to the "bootstrap" technique based on iteration of the net fluxes, a "ballistic" algorithm has been proposed that involves iteration on the composition gradients, and which serves as a useful alternative when the former procedure is unstable or slowly convergent. The main emphasis has been placed on demonstrating the feasibility and usefulness of the method, rather than on refining the numerical techniques, which are left open to further improvement.

The series method of solution should not be confused with Picard's method of successive substitution, a procedure for solving differential equations with constant or variable coefficients that gives solutions in terms of an infinite series of iterated integrals. For systems of differential equations, this generates the iterated matrix integral known as the "matrizant" (Amundson, 1966; Taylor and Krishna, 1993). Matrizant solutions of multicomponent diffusion problems have been presented by Burghardt (1984) for the film model, and by Olivera-Fuentes and Pasquel-Guerra (1987) for the penetration model. While theoretically significant, these solutions are of little practical use because of their acute computational difficulties. By contrast, the present work shows that the series solution is not only practicable, but computationally simple, and should be equally applicable to other multicomponent mass transfer problems. As a further example of the potential of this technique, the series solution has also been obtained for the penetration model of unsteady-state one-dimensional diffusion of a multicomponent mixture in a semi-infinite region. A computational method for this solution is currently being developed, and will be the subject of a future communication.

REFERENCES

- Amundson, N. R., 1966, *Mathematical Methods in Chemical Engineering. I: Matrices and their Applications*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., and Lightfoot, E. N., 1960, *Transport Phenomena*, Wiley, New York.
- Burghardt, A., 1984, "On the Solutions of Maxwell-Stefan Equations for Multicomponent Film Model", *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 39, pp. 447-453.
- Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F., and Bird, R. B., 1954, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York.
- Hsu, H. W. and Bird, R. B., 1960, "Multicomponent Diffusion Problems", *AIChE J.*, Vol. 6, pp. 516-524.
- Kreyszig, E., 1972, *Advanced Engineering Mathematics*, 3rd Edn., Wiley, New York.
- Krishna, R., 1981, "An Alternative Linearized Theory of Multicomponent Mass Transfer", *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 36, pp. 219-221.
- Krishna, R. and Standart, G. L., 1976, "A Multicomponent Film Model Incorporating an Exact Matrix Method of Solution to the Maxwell-Stefan Equations", *AIChE J.*, Vol. 22, pp. 383-389.
- Krishna, R. and Standart, G. L., 1979, "Mass and Energy Transfer in Multicomponent Systems", *Chem. Eng. Commun.*, Vol. 3, pp. 201-275.
- Olivera-Fuentes, C. G. and Pasquel-Guerra, J., 1987, "The Exact Penetration Model of Diffusion in Multicomponent Ideal Gas Mixtures. Analytical and Numerical Solutions", *Chem. Eng. Commun.*, Vol. 51, pp. 71-88.
- Sherwood, T. K., Pigford, R. L., and Wilke, C. R., 1975, *Mass Transfer*, McGraw-Hill, New York.
- Stewart, W. E. and Prober, R., 1964, "Matrix Calculation of Multicomponent Mass Transfer in Isothermal Systems", *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, Vol. 3, pp. 224-235.
- Taylor, R. and Krishna, R., 1993, *Multicomponent Mass Transfer*, Wiley, New York.
- Taylor, R. and Smith, L. W., 1982, "On Some Explicit Approximate Solutions of the Maxwell-Stefan Equations for the Multicomponent Film Model", *Chem. Eng. Commun.*, Vol. 14, pp. 361-370.
- Taylor, R. and Webb, D. R., 1981, "Film Models for Multicomponent Mass Transfer: Computational Methods: The Exact Solution of the Maxwell-Stefan Equations", *Comput. Chem. Eng.*, Vol. 5, pp. 61-73.
- Toor, H. L., 1957, "Diffusion in Three Component Gas Mixtures", *AIChE J.*, Vol. 3, pp. 198-207.
- Toor, H. L., 1964, "Solution of the Linearized Equations of Multicomponent Mass Transfer", *AIChE J.*, Vol. 10, pp. 448-455, 460-465.
- Turevskii, E. N., Aleksandrov, A. I., and Gorechenkov, V. G., 1974, "An Approximate Method for Calculating Nonequimolar Diffusion in Multicomponent Mixtures", *Int. Chem. Eng.*, Vol. 14, pp. 112-115.
- Zarzycki, R. and Chakuc, A., 1993, *Absorption Fundamentals & Applications*, Pergamon Press, Oxford.

APPENDIX: EQUIVALENCE WITH THE ANALYTICAL SOLUTION

Let $(n-1) \times 1$ column matrices of mole fractions and series coefficients be defined as

$$(y) \equiv (y_1 \ y_2 \ \dots \ y_{n-1})^T \quad (A1)$$

$$(\beta)_m \equiv (\beta_{1,m} \ \beta_{2,m} \ \dots \ \beta_{n-1,m})^T \quad (A2)$$

The missing $(n$ -th) elements are not independent, and can be obtained by difference, cf. Eq. (17). For $m = 0$, Eq. (15) can be written in matrix terms as

$$(\beta)_1 = [\Phi](\beta)_0 + (\phi) \quad (A3)$$

where $[\Phi]$, the square matrix used in Eq. (7), has elements

$$\Phi_{ii} = \frac{v_i}{D_{im}} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{v_k}{D_{ik}} \quad , \quad i = 1, \dots, n-1 \quad (A4a)$$

$$\Phi_{ik} = -\left(\frac{1}{D_{ik}} - \frac{1}{D_{im}} \right) v_i \quad , \quad i, k = 1, \dots, n-1 \quad (i \neq k) \quad (A4b)$$

and (ϕ) is the column matrix of elements

$$\phi_i = -\frac{v_i}{D_{im}} \quad , \quad i = 1, \dots, n-1 \quad (A5)$$

For $m \geq 1$, the simpler recursion formula is

$$(\beta)_{m+1} = \frac{1}{m+1} [\Phi](\beta)_m \quad (A6)$$

It follows that all the $(\beta)_m$ can be expressed in terms of $(\beta)_0$ as

$$\begin{aligned} (\beta)_1 &= [\Phi] \{ (\beta)_0 + [\Phi]^{-1}(\phi) \}, \\ (\beta)_2 &= \frac{1}{2} [\Phi]^2 \{ (\beta)_0 + [\Phi]^{-1}(\phi) \}, \\ (\beta)_3 &= \frac{1}{3 \times 2} [\Phi]^3 \{ (\beta)_0 + [\Phi]^{-1}(\phi) \} \end{aligned} \quad (A7)$$

or, in general,

$$(\beta)_m = \frac{1}{m!} [\Phi]^m \{ (\beta)_0 + [\Phi]^{-1}(\phi) \} \quad (A8)$$

From Eq. (10), the composition profile is given in matrix notation by

$$\begin{aligned} (y) &= \sum_{m=0}^{\infty} (\beta)_m \eta^m \\ &= (\beta)_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} [\Phi]^m \eta^m \{ (\beta)_0 + [\Phi]^{-1}(\phi) \} \end{aligned} \quad (A9)$$

Given Eq. (11) and the definition of the matrix exponential function,

$$\exp[\Phi] = (I) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} [\Phi]^m \quad (A10)$$

the above result can be written also as

$$(y) = [\exp[\Phi] \eta] (y(0)) + [\exp[\Phi] \eta - (I)] [\Phi]^{-1}(\phi) \quad (A11)$$

This is in essence the analytical matrix solution of the multicomponent film model, which in turn reduces to the scalar solution given e.g. by Bird *et al.* (1960) for the binary case. For the additional algebraic manipulations that will lead to Eq. (7), the reader is referred to the textbook by Taylor and Krishna (1993).



SIMULAÇÃO DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM UMA COLUNA DE ABSORÇÃO CO₂-ÁGUA, UTILIZANDO O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS



Silva, A., Ulson de Souza, A. A., Ulson de Souza, S. M. A. G., Valle, J. A. B.

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Santa Catarina
88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil

RESUMO

Neste trabalho é resolvido numericamente o problema de absorção isotérmica, no sistema água/ar/CO₂, para uma corrente de água saturada com gás carbônico formando um filme líquido no sentido descendente da coluna, em contracorrente com o fluxo de ar saturado com água. A simulação numérica é feita utilizando-se o método de Volumes Finitos. Os resultados obtidos na simulação são comparados com os resultados apresentados na literatura e com dados obtidos experimentalmente em uma coluna de absorção.

INTRODUÇÃO

Na indústria química, um importante número de operações com transferência de massa envolve a transferência de um componente de uma região de maior concentração para outra de menor concentração, resultando no enriquecimento, ou seja, aumento de concentração, dos componentes desejados ou no empobrecimento de outros componentes indesejados como, por exemplo, contaminantes e poluentes.

A maioria dos processos químicos requer a purificação prévia das matérias primas, purificação dos produtos e, eventualmente, contém correntes de reciclo constituídas de reagente não-convertido. Todos os processos químicos citados envolvem operações com transferência de massa, dando origem a uma série de equipamentos de separação.

O processo de separação de certos componentes, contidos numa mistura homogênea, utiliza as diferenças de propriedades dos constituintes da mistura para fazer a separação. Estes processos são fundamentados na diferença de composição das fases em equilíbrio ou na diferença da taxa de transferência de massa dos constituintes da mistura.

Um processo de separação (King, 1980) muito comumente utilizado na indústria química é a destilação. A separação dos componentes está baseada na diferença de volatilidades. Neste processo, o fornecimento de calor a uma mistura líquida dá lugar ao aparecimento de uma fase gasosa que conterà, em maior quantidade, a substância mais volátil que se pretende separar. Por conseguinte, os componentes mais pesados, ou menos voláteis, tenderão a permanecer na fase líquida. Na prática, várias operações consecutivas deste tipo são realizadas, de modo a termos uma separação, a mais completa possível, limitada apenas por considerações econômicas e por características próprias da mistura (Bennett, 1978). Para o estudo ou projeto de otimização de uma unidade de destilação, são necessários principalmente conhecimentos sobre os fenômenos de transporte em geral (transporte de massa, quantidade de movimento e energia).

O transporte de massa por absorção de gás envolve a transferência de um componente solúvel de uma fase gasosa para um absorvente líquido. A transferência de massa em uma coluna de absorção se dá entre um fluxo de um componente

gasoso escoando em contracorrente a um fluxo de um componente líquido (Welty, 1984). Há uma troca entre os componentes envolvidos, onde o líquido absorve uma fração do componente gasoso e o componente gasoso arrasta uma fração do componente líquido. A determinação do coeficiente de transferência de massa entre as duas fases é de grande importância no dimensionamento de colunas de absorção. As colunas de absorção podem ter várias aplicações como, por exemplo, a purificação do gás de saída de uma chaminé.

Outros processos de separação, assim como, a evaporação, a cristalização e a secagem envolvem a transferência simultânea de calor e de massa. Na evaporação, uma solução líquida é concentrada pela vaporização de uma parte do solvente. As exigências térmicas são grandes em virtude do calor latente de vaporização do solvente ter que ser fornecido ao sistema. A cristalização é usada industrialmente na fabricação de muitos sais inorgânicos, assim como, para separar misturas de sais pela cristalização fracionada. A secagem separa um líquido de um sólido pela vaporização do líquido.

Extensivos dados têm sido obtidos para a transferência de massa entre um fluido em movimento em certas geometrias como, por exemplo, placas planas, esferas, e cilindros (Treybal, 1973). Estes dados têm sido obtidos inclusive na sublimação de sólidos, vaporização de líquidos no ar e dissolução de sólidos em água. Para alguns problemas em geometrias simples, é possível a obtenção de solução analítica.

A solução de problemas com transferência de massa envolve a solução da equação de conservação da espécie química. Se, associado ao fenômeno de transferência de massa, ocorrer escoamento de fluidos, a equação de conservação da quantidade de movimento deverá ser resolvida conjuntamente com a equação de conservação da espécie química.

Devido ao forte acoplamento existente entre as equações de conservação e a presença de termos não lineares, é requerida a utilização de métodos numéricos.

A maioria dos métodos numéricos pode ser derivada do método de resíduos ponderados. A diferença dos vários métodos numéricos está na escolha da função peso. O método das Diferenças Finitas é obtido fazendo-se a função peso igual a delta, centrada no ponto P. O método aproxima os termos da

equação diferencial contendo derivadas por suas expressões em Diferenças Finitas; realiza um procedimento puramente matemático sem levar em conta as características físicas do fenômeno que se deseja modelar. Por exemplo, para o problema em que a convecção é dominante, a aproximação dos termos convectivos por diferenças centrais causa oscilações espaciais na solução. O método de Elementos Finitos de Galerkin utiliza a função peso igual as funções tentativas do problema. O método de Volumes Finitos (Maliska, 1981, Patankar, 1980, Roache, 1976) resulta da função peso unitária, e será preferido ao longo deste trabalho porque esta escolha da função peso leva à obtenção de equações discretas que nada mais são do que balanços de conservação sobre os volumes elementares. Existe, portanto, uma razão física para a escolha do método dos Volumes Finitos pois, independentemente do tamanho do volume elementar, os princípios de conservação são absolutamente respeitados, o que torna o método atrativo.

O Método de Volumes Finitos é utilizado juntamente com o esquema WUDS proposto por Raithby (1976) que serve para avaliação dos fluxos convectivos e difusivos nas faces do volume de controle, bem como, o arranjo de variáveis localizadas (Marchi et al., 1989, Peric et al., 1988, Schneider et al., 1987 e Ulson de Souza, 1992) na malha computacional. Valle (1995) utilizou o Método de Volumes Finitos para a obtenção da solução de problemas de escoamentos de fluidos com transferência de massa.

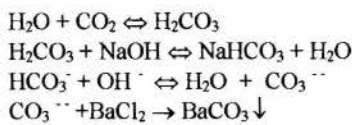
FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Neste trabalho é resolvido o problema de absorção isotérmica, no sistema água/ar/CO₂, para uma corrente de água saturada com gás carbônico formando um filme líquido no sentido descendente da coluna, em contracorrente com o fluxo de ar saturado com água.

Os resultados obtidos através da simulação numérica são comparados com os resultados obtidos experimentalmente (Ulson de Souza e Crippa, 1995) em uma coluna de absorção.

A realização do experimento é feita escoando-se água por gravidade, pela parede interna do tubo, em forma de filme, e o ar em contra-corrente pelo núcleo da coluna. É feita a coleta de amostras em 4 pontos da coluna nas distâncias do topo da coluna de 0.15, 0.25, 0.75 e 1.35 m. Estas amostras serviram para quantificar a concentração do componente trocado entre as fases (CO₂), através do método do Cloreto de Bário.

Durante o decorrer da aplicação do método do Cloreto de Bário, ocorrem as seguintes reações:



A amostra é titulada com HCl e com o volume de HCl gasto na titulação é calculada a fração molar de CO₂ nas fases líquida e gasosa.

É avaliada a influência da vazão de ar, para uma vazão de água constante, sobre o fenômeno de transferência de massa.

Na Figura 1 é apresentado um esquema simplificado do equipamento utilizado para a realização dos experimentos. A coluna de absorção encontra-se na vertical e possui o diâmetro de 6,5 cm, com o comprimento total de 1,5 m.

O objetivo deste trabalho é o estudo da transferência de massa em uma coluna de absorção.

Na Figura 2 é apresentado, de forma esquemática, o domínio do problema, assim como, as condições de contorno utilizadas na solução numérica do problema da coluna de absorção.

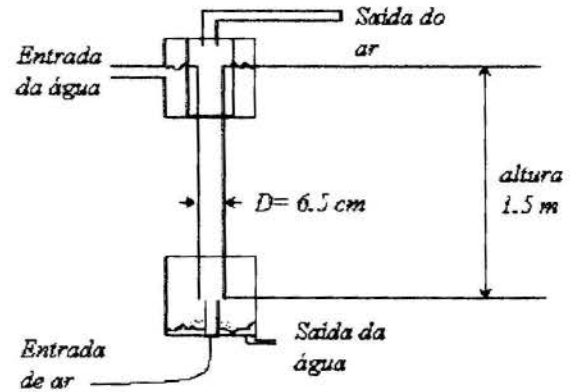


Figura 1 - Esquema simplificado da coluna de absorção

O problema é simétrico, sendo resolvida apenas a metade do domínio físico.

A componente do vetor velocidade na direção z é denominada u e na direção r é denominada v. A fração molar do componente é denominada W_A.

As condições de contorno impostas são de simetria (derivada nula) na fronteira sul (centro da coluna), condição de saída (derivada nula) na fronteira leste da coluna.

Na fronteira oeste, é prescrita a velocidade de entrada do ar, u=velocidade do ar e v=0.0, sendo também prescrita a fração molar de CO₂ medida experimentalmente (Ulson de Souza et al., 1995). É prescrita, na fronteira norte, a velocidade do filme d'água, u = velocidade da água descendo pela parede da coluna de absorção e v=0.0, sendo prescrito um perfil linear para a fração molar de CO₂ em toda esta fronteira. Este perfil é obtido a partir de dados experimentais.

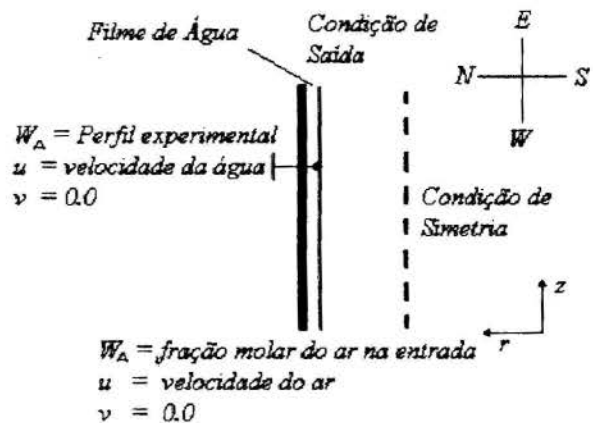


Figura 2 - Especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas

EQUAÇÕES GOVERNANTES DO PROBLEMA

As equações governantes do problema, escritas no sistema de coordenadas cartesianas, considerando-se o fluido newtoniano,

escoamento laminar, incompressível e bidimensional, são expressas como segue:

•Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (1)$$

•Equação de Conservação de Quantidade de Movimento na direção x:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv) = \\ = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \frac{\partial}{\partial x}(\mu \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial u}{\partial y}) \end{aligned} \quad (2)$$

•Equação de Conservação de Quantidade de Movimento na direção y:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vv) = \\ = -\frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y + \frac{\partial}{\partial x}(\mu \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial v}{\partial y}) \end{aligned} \quad (3)$$

•Equação de Conservação da Espécie Química A:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho w_A) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uw_A) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vw_A) = \\ = \frac{\partial}{\partial x}(\rho D_{AB} \frac{\partial w_A}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho D_{AB} \frac{\partial w_A}{\partial y}) + r_A''' \end{aligned} \quad (4)$$

As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química são escritas, para uma variável genérica ϕ , como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) + P \phi = \\ = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial y}) + S \phi \end{aligned} \quad (5)$$

onde as variáveis ϕ , $P \phi$, $S \phi$ e $\Gamma \phi$ possuem expressões específicas em cada uma das equações de conservação.

A Eq. (5) transformada para o sistema de coordenadas generalizadas ξ, η pode ser escrita na forma da Eq. (6). Detalhes deste procedimento podem ser encontrados em Maliska (1981).

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{1}{J} (\xi_x \rho u \phi + \xi_y \rho v \phi) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{1}{J} (\eta_x \rho u \phi + \eta_y \rho v \phi) \right] + \frac{P \phi}{J} = \\ = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{1}{J} (\xi_x \Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} + \xi_y \Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial y}) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{1}{J} (\eta_x \Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} + \eta_y \Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial y}) \right] + \frac{S \phi}{J} \end{aligned} \quad (6)$$

A Eq. (6) é integrada no volume de controle de dimensões $\Delta \xi$ e $\Delta \eta$ e no intervalo de tempo Δt , visando obter a equação

discretizada do Método de Volumes Finitos. O esquema WUDS, proposto por Raithby (1976), é utilizado para a avaliação dos fluxos convectivos e difusivos nas faces do volume de controle, resultando:

$$\begin{aligned} a_p^\phi \phi_P = a_e^\phi \phi_E + a_w^\phi \phi_W + a_n^\phi \phi_N + a_s^\phi \phi_S + a_{ne}^\phi \phi_{NE} + \\ + a_{se}^\phi \phi_{SE} + a_{nw}^\phi \phi_{NW} + a_{sw}^\phi \phi_{SW} + b_P^\phi \end{aligned} \quad (7)$$

onde

$$a_p^\phi = \frac{m_p^\circ}{\Delta t} + a_e^\phi + a_w^\phi + a_n^\phi + a_s^\phi \quad (8)$$

$$a_w^\phi = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) \dot{m}_w + D_1 \frac{\bar{\beta}_w}{\Delta \xi} - \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_n + \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_s \quad (9)$$

$$a_e^\phi = -\left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \dot{m}_e + D_1 \frac{\bar{\beta}_e}{\Delta \xi} + \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_n - \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_s \quad (10)$$

$$a_n^\phi = -\left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) \dot{m}_n + D_3 \frac{\bar{\beta}_n}{\Delta \eta} + \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e - \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w \quad (11)$$

$$a_s^\phi = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) \dot{m}_s + D_3 \frac{\bar{\beta}_s}{\Delta \eta} - \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e + \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w \quad (12)$$

$$a_{ne}^\phi = \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e + \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_n \quad (13)$$

$$a_{nw}^\phi = -\frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w - \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_n \quad (14)$$

$$a_{se}^\phi = -\frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e - \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_s \quad (15)$$

$$a_{sw}^\phi = \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w + \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_s \quad (16)$$

$$b_P^\phi = \frac{\Delta V}{J} L[P_P^\phi] + \frac{\Delta V}{J} L[S_P^\phi] + \frac{m_p^\circ \phi_P^\circ}{\Delta t} \quad (17)$$

e,

$$D_1 = (\Gamma^\phi J \alpha) \Delta \eta \quad (18)$$

$$D_2 = (\Gamma^\phi J \beta) \Delta \eta \quad (19)$$

$$D_3 = (\Gamma^\phi J \gamma) \Delta \xi \quad (20)$$

$$D_4 = (\Gamma^\phi J \beta) \Delta \xi \quad (21)$$

Para a solução do sistema de equações lineares, é utilizado o método MSI ("Modified Strongly Implicit") modificado, proposto por Schneider e Zedan (1981). Já o tratamento do acoplamento pressão-velocidade é realizado empregando-se o método SIMPLEC proposto por Van Doormaal e Raithby (1984), estendido ao arranjo de variáveis co-localizadas. Para a avaliação dos fluxos de massa, que tomam parte da equação da conservação da massa, foi utilizada a metodologia proposta por Marchi, Maliska e Bortoli (1989).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os perfis do vetor velocidade, obtidos na base e no topo da coluna de absorção, utilizando-se a metodologia numérica, com malha 20x10 uniformemente espaçada, para a vazão de água constante e igual a $56.81 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$, considerando-se a vazão de ar de $66.66 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, são apresentados esquematicamente na Figura 3. Nesta figura observa-se que no topo da coluna, na parede da coluna (lado esquerdo da Figura 3), tem-se uma velocidade com sentido contrário ao escoamento de ar e, no centro do tubo, tem-se a velocidade máxima (lado direito da Figura 3).



Figura 3 - Perfil de velocidade na base e no topo da coluna de absorção.

O perfil da componente do vetor velocidade, u , obtido em $z = 1.0 \text{ m}$, utilizando-se a metodologia numérica, com malha 20x10 uniformemente espaçada, para a vazão de água constante, é apresentado na Figura 4.

A fração molar obtida a partir da solução numérica para a fase gasosa, na base (posição 3), no meio (posição 2) e no topo (posição 1) da coluna é apresentada na Figura 5. Na base da coluna o ar entra com fração molar de CO_2 constante e igual a 0.06×10^{-4} . Este valor da fração molar foi medido experimentalmente (Ulson de Souza e Crippa, 1995).

Pode-se observar que para um mesmo raio, a fração molar é maior quanto mais perto do topo da coluna, conforme ilustra a Figura 5.

Os valores apresentados são para o caso onde a vazão de ar que entra na coluna é de $66.66 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, e a condição de contorno para a fronteira norte foi aproximada por um perfil linear dado pela Eq. (22).

$$W_A = -9 \times 10^{-5} * z + 0.0003 \quad (22)$$

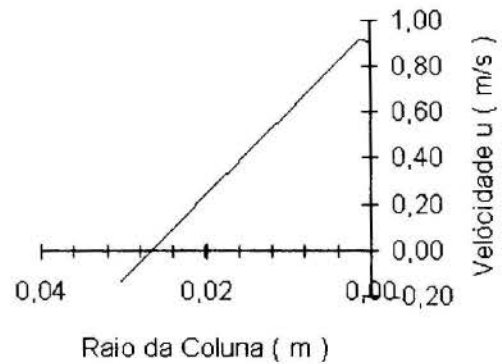


Figura 4 - Perfil de velocidade da componente u , em $z = 1.0 \text{ m}$

onde z é a altura da coluna dada em metros e W_A é a fração molar de CO_2 na fronteira norte. A aproximação linear feita tem um coeficiente de correlação linear igual a 1.

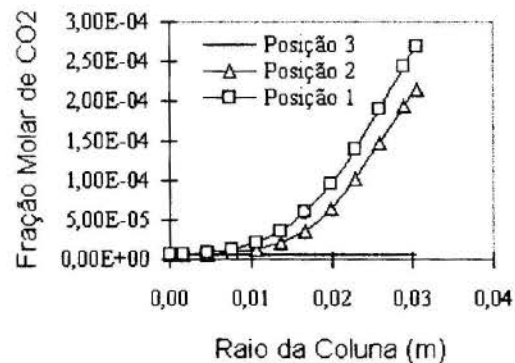


Figura 5 - Fração Molar em função do raio, obtida para vazão de ar igual a $66.66 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$.

Os resultados experimentais são medidos nos pontos 0,15, 0,25, 0,75 e 1,35 m a partir do topo da coluna, sendo medidos no filme e em um ponto no interior da coluna. Os pontos obtidos numericamente são comparados com os valores experimentais obtidos no interior da coluna, conforme Tabela 1. Os valores numéricos são obtidos tomando-se uma média na seção reta, na altura em que foi obtido o ponto experimental.

A fração molar obtida, para o caso em que a vazão de ar entrando na coluna é de $83.33 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, a partir da solução numérica para a fase gasosa, é apresentada na Figura 6.

Tabela 1 - Comparação entre os valores experimentais e os valores obtidos numericamente, para $Q = 66.66 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$

Ponto	W_A experimental	W_A numérico	Erro Relativo (%)
1	1.71×10^{-4}	0.7857×10^{-4}	54
2	1.35×10^{-4}	0.1017×10^{-3}	24
3	9.90×10^{-5}	0.7857×10^{-4}	20
4	6.30×10^{-5}	0.3731×10^{-4}	40

Pode-se observar, como era de se esperar, que para um mesmo raio, a fração molar é maior quanto mais perto do topo da coluna, conforme ilustrado na Figura 6.

O perfil de W_A ajustado a partir dos dados experimentais, para a fronteira norte, é dado por:

$$W_A = -6 \times 10^{-5} * z + 0.0002 \quad (23)$$

onde z é a altura da coluna dada em metros e W_A é a fração molar de CO_2 na fronteira norte. A aproximação linear feita tem um coeficiente de correlação linear igual a 0,9837.

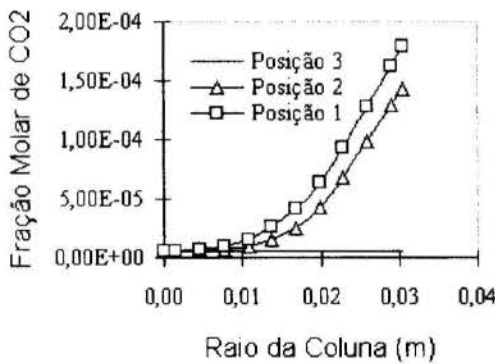


Figura 6 - Fração Molar em função do raio, obtida para vazão de ar igual a $83.33 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$.

Para o caso onde a vazão é $83.33 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, os pontos no interior da coluna são comparados com os valores obtidos numericamente conforme Tabela 2. Os valores numéricos são obtidos tomando-se uma média na seção reta, na altura em que foi obtido o ponto experimental.

Tabela 2 - Comparação entre os valores experimentais e os valores obtidos numericamente, para $Q = 83.33 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$.

Ponto	W_A experimental	W_A numérico	Erro Relativo (%)
1	1.89×10^{-4}	0.5354×10^{-4}	71
2	1.62×10^{-4}	0.6880×10^{-4}	57
3	1.35×10^{-4}	0.5354×10^{-4}	59
4	8.10×10^{-5}	0.2547×10^{-4}	68

Para a vazão de $10 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$, a fração molar, obtida a

partir da solução numérica para a fase gasosa, é apresentada na Figura 7. Na base da coluna o ar entra com fração molar de CO_2 constante e igual a 0.06×10^{-4} .

Pode-se observar que o comportamento dos resultados apresentam a mesma tendência dos casos anteriores, conforme ilustra a Figura 7.

Para a fronteira norte, no caso da vazão de ar igual a $10 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, o perfil de W_A é idêntico à Eq. (23), sendo que a aproximação linear feita tem um coeficiente de correlação linear igual a 0,9649.

Os resultados numéricos obtidos são comparados com os resultados experimentais conforme a Tabela 3.

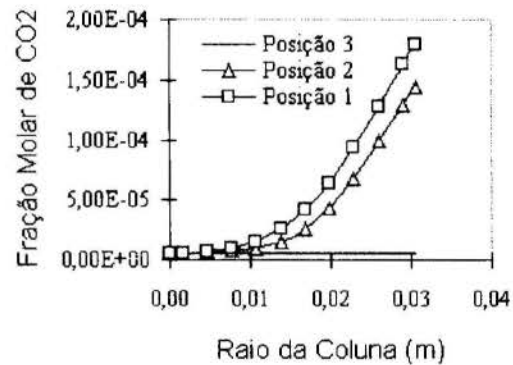


Figura 7 - Fração Molar em função do raio, obtida para vazão de ar igual a $10 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$.

Tabela 3 - Comparação entre os valores experimentais e os valores obtidos numericamente, para $Q = 10 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$.

Ponto	W_A experimental	W_A numérico	Erro Relativo (%)
1	2.25×10^{-4}	0.5354×10^{-4}	76
2	2.07×10^{-4}	0.6880×10^{-4}	66
3	1.44×10^{-4}	0.5354×10^{-4}	62
4	1.08×10^{-4}	0.2547×10^{-4}	76

CONCLUSÃO

O problema da transferência de massa em uma coluna de absorção isotérmica, é resolvido utilizando-se o Método de Volumes Finitos, com o arranjo de variáveis co-localizadas.

O perfil de velocidade obtido utilizando-se malha 20×10 mostra claramente a influência da corrente líquida sobre as camadas adjacentes de ar, invertendo o sentido do escoamento de ar.

A pesquisa experimental, segundo o autor, está em uma fase inicial e todos os dados foram lidos somente uma vez. Este fator é uma possível causa dos erros obtidos na comparação com a solução numérica.

O perfil de fração molar na fronteira norte, utilizado para a obtenção da condição de contorno, é coincidente para os casos de vazão de ar entrando na coluna igual a 83.33×10^{-5} e $10 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$, sendo diferente apenas o coeficiente de correlação linear. O caso, em que a vazão de ar de entrada na coluna foi de $10 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$, apresentou um erro relativo maior que os outros, devido ao ajuste da curva do perfil de fração molar na fronteira norte ser menos exato.

Pode-se observar também, através das Figuras 5,6 e 7, que quanto maior a vazão de entrada de ar na coluna, maior é a transferência de CO₂, ou seja, para uma mesma posição na coluna, quando se aumenta a vazão de entrada de ar, aumenta o valor da fração molar.

Outro fator importante para minimização destes erros é a medida de mais pontos experimentais ao longo da coluna, de maneira que se possa ter um melhor ajuste das frações molares na fronteira norte.

NOMENCLATURA

- a_i - coeficientes da equação discretizada onde i = P, E, W, S, N, etc.
- b^φ - termo fonte da equação discretizada
- D - diâmetro da coluna de absorção, [L]
- D_{AB} - difusividade do componente A no componente B, [L²/t]
- g_x - componente da força do campo por unidade de massa, na direção x, [L/t²]
- g_y - componente da força do campo por unidade de massa, na direção y, [L/t²]
- J - jacobiano da transformação
- L[] - aproximação numérica da expressão no interior dos colchets
- \dot{m} - vazão mássica do fluido, [M/t]
- P - pressão nas equações de Navier Stokes, [M / (Lt²)]
- P^φ - representa o gradiente de pressão na Eq. (6)
- r_A^{'''} - taxa de reação química do componente A, por unidade de volume
- S^φ - termo fonte das equações de conservação
- t - tempo, [t]
- u - componente da velocidade, na direção x, no sistema cartesiano, [L/t]
- v - componente da velocidade, na direção y, no sistema cartesiano, [L/t]
- W_A - fração molar de CO₂
- x - coordenada do sistema cartesiano, [L]
- y - coordenada do sistema cartesiano, [L]

LETRAS GREGAS

- α - componente do tensor métrico da transformação
- β - componente do tensor métrico da transformação
- Γ^φ - difusividade relativa à variável φ multiplicada pela massa específica do fluido, [M / (Lt)]
- η - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]
- μ - viscosidade dinâmica do fluido, [M / (Lt)]
- ξ - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]
- ρ - massa específica do fluido, [M / (Lt)]
- φ - campo escalar geral

ÍNDICES INFERIORES

- e, n, s, w - valores relativos às faces leste, norte, sul e oeste, respectivamente do volume de controle centrado em P
- se, sw, ne, nw - valores relativos às faces sudeste, sudoeste, nordeste e noroeste respectivamente do volume de controle centrado em P

REFERÊNCIAS

- Bennett, C. O. e Myers, J. E., 1978, "Fenômenos de Transporte, Quantidade de Movimento, Calor e Massa, Editora McGRAW-HILL.
- King, C. J., 1980, "Processos de Separação", Editorial Reverté, S.A.
- Maliska, C.R., 1981, "A Solution Method for Three-dimensional Parabolic Fluid Flow Problems in Non-orthogonal Coordinates", Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Canada.
- Marchi, C.H., Maliska, C.R. and Bortoli, A.L., 1989, "The Use of Co-located Variables in the Solutions of Supersonic Flows", COBEM 89 - X Congresso Brasileiro De Engenharia Mecânica.
- Patankar, S.V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Co., Washington, DC., USA.
- Peric, M., Kessler, R. And Scheuerer, G., 1988, "Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Colocated Grids", Computers and Fluids, 16: 389-403.
- Raithby, G. D., 1976, "Predictions of Dispersion by Surface Discharge", Basin Investigation and Modelling Section, Canada Center for Inland Waters, Burlington, Ontario, Canada.
- Roache, P.J., 1976, "Computational Fluid Dynamics", Hermosa Publishers, Albuquerque, N.M., USA.
- Schneider, G. E. and Raw, M.J., 1987, "Control Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-located Variables - 1. Computational Procedure. Numerical Heat Transfer, 11 : 363-390.
- Schneider, G. E. and Zedan, M., 1981, "A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems", Numerical Heat Transfer, 4 : 1-19.
- Treybal, R. E., 1973, "Operaciones con Transferencia de Masa, Editorial Hispano Americana S.A., Buenos Aires.
- Ulson De Souza, A. A., Crippa, A., 1995, "Estudo da Transferência de Massa em Colunas de Absorção", 5 ° Seminário Catarinense De Iniciação Científica, Florianópolis /SC. Anais p 04.
- Ulson De Souza, S.M.A.G., 1992, "Um Esquema Numérico Utilizando Variáveis Colocalizadas com Função de Interpolação Completa para a Solução de Problemas de escoamento de Fluidos", Tesê de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina.
- Valle, J. A. B., 1995, "Aplicação do Método de Volumes Finitos na Solução de Problemas de Escoamento de Fluidos com Transferência de Massa", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, SC.
- Van Doormaal, J. P. and Raithby, G.D., 1984, "Enhancements of the SIMPLEC Method for Predicting Incompressible Fluid Flows", Numerical Heat Transfer, 7 : 147-163.
- Welty, J. R., Wicks, C. E. and Wilson, R. E., 1984, "Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer", Editora John Wiley & Sons.

ABSTRACT

In this work, the problem of the isothermic absorption is numerically solved, on the water / air / CO₂ system, with a current of saturated water with carbon dioxide forming a liquid film, in countercurrent with the flow of saturated air with water. The numerical simulation is made utilizing the method of Finite Volume. The results obtained with the simulation are compared with the results presented on literature, obtained experimentally in an absorption column.



AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DO COEFICIENTE DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS COM GÁS OZÔNIO E ÁGUA EM REATORES TUBULARES



A. Filipe Montalvão, D.Sc. e Carlos Russo, Ph.D.,
White Martins G.I. SA, Centro Tecnológico Rio, - RJ - Brasil
Depto. de Engenharia Química, COPPE, Rio de Janeiro - RJ - Brasil

Resumo

O objetivo deste trabalho foi medir a transferência de massa entre a fase gás e a fase líquida num escoamento bifásico ao longo de um reator tubular de seção circular. As experiências foram realizadas com misturas de gás ozônio, oxigênio e ar em água. Injetando-se o gás na água no início de reator tubular, mediu-se a concentração de gás dissolvido no ponto da injeção e ós um determinado comprimento do reator, determinando-se a quantidade de gás transferida para a água e o coeficiente de transferência de massa para diversas condições. Determina-se então um modelo empírico para cálculo do coeficiente global de transferência de massa, em função de parâmetros do escoamento bifásico.

INTRODUÇÃO

A utilização de escoamento bifásico entre gás e líquido é largamente difundido na indústria assim como em sistemas de tratamento de efluentes. Nas estações de tratamento de efluentes pode-se projetar reatores tubulares ou colunas de líquido borbulhando ar ou oxigênio. A introdução de ozônio tem um grande potencial no reaproveitamento de água de rejeito assim como no tratamento de clarificação e desinfecção de água de abastecimento, devido ao ozônio ter maior poder de oxidação. Com o intuito de obter-se um modelo que determine o coeficiente global de transferência de massa da fase gás para a fase líquida, variaram-se diversas condições de escoamento, num total de 168 experiências selecionadas. Procurou-se utilizar vazões de água, vazões de gás e pressão de escoamento idênticas às utilizadas em desinfecção ou tratamento de efluentes em centros hospitalares ou indústrias de pequeno porte. Define-se inicialmente alguns parâmetros de escoamento bifásico, define-se o modelo para determinar a área interfacial de transferência de massa em função do sistema de injeção de gás utilizado, define-se o modelo de cálculo do coeficiente de transferência de massa o por último apresenta-se os resultados experimentais e o modelo empírico de transferência de massa. Uma análise de incerteza das medidas experimentais e dos parâmetros avaliados foi realizada para um grau de confiabilidade de 95,4 % dos casos, Holman (1966).

GRANDEZAS EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Algumas grandezas necessitam ser definidas para escoamentos na presença de fase líquida e fase gás. Num escoamento bifásico, de gás e líquido, define-se vazão mássica total (m) como a soma das vazões mássicas de cada uma das fases, fase gás (m_g) e líquida (m_L),

$$m = m_g + m_L \quad (1)$$

a razão entre a vazão mássica de gás e a total é definida como fração mássica de gás,

$$x = m_g / m \quad (2)$$

define-se razão volumétrica entre as fases (β), relacionando-se a fração mássica (x) com o volume específico da fase gás (v_g) e com volume específico da fase líquida (v_L), obtendo-se:

$$\beta = x v_g / [(x v_g + (1-x) v_L)] \quad (3)$$

Armand (1946), determinou experimentalmente a fração de vazios (α) num escoamento bifásico disperso de ar em água em um tubo horizontal em função da razão volumétrica (β). Para valores de $\beta < 0,90$ e valores de vazão mássica de líquido entre 1000 e 4200 kg/h, Armand obteve com uma incerteza de 5 %, a seguinte relação,

$$\alpha = 0,83 \beta \quad (4)$$

define-se como razão de escorregamento entre as fases a relação:

$$S = [x / (1-x)] \cdot [(1-\alpha) / \alpha] \cdot (v_g / v_L) \quad (5)$$

as áreas das seções transversais do escoamento de cada fase, gás (A_g) e líquida (A_L), podem ser determinadas a partir da fração de vazios e da área da seção total do escoamento (A_t) pelas relações:

$$A_g = \alpha \cdot A_t \quad (6)$$

$$A_L = (1-\alpha) \cdot A_t \quad (7)$$

a velocidade do líquido (u_L) e a velocidade do gás (u_g) no reator podem ser determinadas a partir da vazão volumétrica, gás (Q_g) e líquido (Q_L) e as áreas das seções transversais correspondentes, obtendo-se,

$$u_L = Q_L / A_L \quad (8)$$

$$u_L = Q_L / A_L \quad (8)$$

$$u_g = Q_g / A_g \quad (9)$$

define-se velocidade homogênea da mistura (u_H) como função da vazão mássica total (m), a área da seção transversal do escoamento (A_t), fração mássica (x), volume específico do líquido (v_L) e volume específico do gás (v_g), obtendo-se

$$u_H = [x v_g + (1-x) v_L] \cdot m / A_t \quad (10)$$

Os escoamentos bifásicos apresentam características bastantes distintas em função da proporção entre as fases e em função das características de cada uma delas. Estas características são enquadradas em determinados grupos, tais como Borbulhante, Intermitente, Estratificado, Ondulado e Anular. Uma metodologia criada por Taitel e Duckler (1976), relaciona estes diferentes tipos de escoamento com as variáveis envolvidas. Para isso define-se então o parâmetro de "Lockhart-Martinelli" (X), conforme Chisholm (1983),

$$X = (1-x) / x \cdot (v_L / v_g)^{0,5} \quad (11)$$

e o parâmetro T_{td} para escoamentos em tubos circulares na posição horizontal, conforme Taitel e Duckler (1976)

$$T_{td} = \{ dp_{fl} \cdot v_L \cdot v_g / [g \cdot (v_g - v_L)] \}^{0,5} \quad (12)$$

onde g é a aceleração da gravidade e dp_{fl} é a perda de carga no escoamento por unidade de comprimento considerando-se só o líquido escoando. Escoamento do tipo disperso (borbulhante) acontece para valores de X superiores a 2, e valores de T_{td} superiores a 1.

MODELO DE TRANSFERENCIA

Neste trabalho experimental avalia-se a transferência de massa ao longo de um reator tubular de seção circular. A Figura 1 mostra um desenho esquemático do sistema avaliado experimentalmente.

O modelo para determinação do coeficiente global de transferência de massa foi desenvolvido considerando-se as seguintes simplificações: 1) escoamento unidimensional onde a concentração de gás dissolvido na água (c_g) só varia na direção do escoamento, 2) regime de escoamento é permanente, ou seja a concentração de gás na entrada do tubo e na saída não variam no tempo, 3) não existem reações que provoquem o consumo de gás dissolvido, 4) velocidade das fases ao longo do tubo é constante, 5) o termo difusivo é muito menor que o convectivo, devido às condições de escoamento de alta velocidade, número de Reynolds elevado, 6) massa específica e o coeficiente de difusão do gás no líquido constantes. Considerando-se estas simplificações a equação da continuidade aplicada ao gás dissolvido no líquido, pode ser representada em coordenadas cilíndricas pela relação:

$$u_L \delta c_g / \delta y = q \quad (13)$$

onde q é fluxo de massa entre as bolhas de gás e a água, e $\delta c_g / \delta y$ a variação da concentração do gás dissolvido na direção do escoamento.

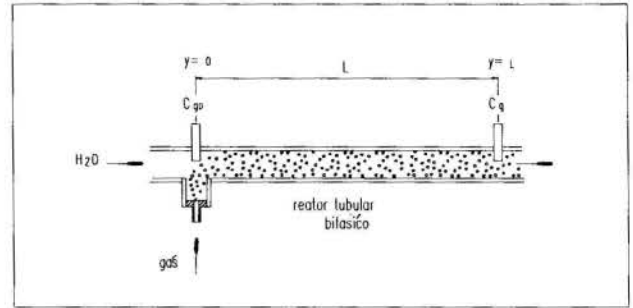


Figura 1 - Desenho esquemático do aparato experimental

O fluxo de massa por convecção entre o gás e o líquido pode ser escrito em função da solubilidade do gás no líquido (c_g^*),

$$q = -Kla (c_g^* - c_g) \quad (14)$$

onde Kla , é o coeficiente global de transferência de massa. A partir da relação 13 e 14, obtém-se a seguinte solução:

$$Kla = -u_L / y \ln [(c_g^* - c_g) / (c_g^* - c_0)] \quad (15)$$

onde c_0 é a concentração do gás dissolvido na entrada do reator ($y=0$) e y a distância ao longo do reator.

O número de Schmidt é definido por,

$$Sc = \mu_g \cdot v_g / D_0 \quad (16)$$

onde, μ_g é a viscosidade absoluta do gás e D_0 a difusividade do gás no líquido.

PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Nos ensaios realizados, utilizaram-se vazões de gás e líquido compatíveis com condições de escoamento em escala real, normalmente para vazões utilizadas em desinfecção ou tratamento de efluentes em centros hospitalares ou industriais de pequeno porte. O reator tubular utilizado tem um diâmetro interno de 27,8 mm e 36 m de comprimento. Utilizou-se um trecho do reator tubular para medir o oxigênio e o ozônio dissolvido. O trecho avaliado foi construído em acrílico transparente, podendo-se observar que o escoamento é do tipo disperso (borbulhante), confirmando assim o procedimento utilizado pelas equações (11) e (12). Os ensaios foram realizados para as vazões de água de 3,0, 3,5 e 4,0 m³/h, com incerteza estimada nesta medida de 2,9 %, vazões de gás entre 0,50 e 3,0 kg/h com incerteza estimada na medida de 2,7 % e pressões de escoamento de 200, 250, 300 e 350 kPa, com incerteza estimada nesta medida de 7,0 kPa. Um total de 168 ensaios foram selecionados. Realizaram-se ensaios com ar, oxigênio puro e ozônio. A concentração de ozônio variou entre 0,5 e 3 % em mássica, na base mássica. Na geração de ozônio utilizou-se um gerador de ozônio fabricado pela PCI Ozone Corporation, NJ-USA, modelo GL-1. O gerador opera segundo o princípio de descarga de Corona, utilizando alta voltagem (8000 volts) e frequência média de 1800 Hz. Ele pode ser alimentado com ar ou oxigênio. Para obter-se melhor eficiência no gerador utilizou-se oxigênio como gás de

alimentação. O gerador possui uma capacidade máxima de produção de 50 g/h de ozônio.

Na medida de oxigênio dissolvido na água estimou-se uma incerteza de 0,14 mg/L. Na medida de ozônio dissolvido na água estimou-se uma incerteza de 0,07 mg/L. Na medida de ozônio na fase gás estimou-se uma incerteza de 0,01 %. Na medida de temperatura da mistura estimou-se uma incerteza de 0,5 C. Na medida de área interfacial utilizou-se um modelo empírico de cálculo baseado na medida de vazão de gás e no diâmetro do orifício de injeção de gás. Leibson (1956) desenvolveu uma relação com comprovação experimental para avaliação de tamanhos de bolhas de gás formadas a partir de uma injeção de gás no meio líquido através de um orifício com uma incerteza estimada em 10 %, válida para número de Reynolds no orifício entre 2000 e 20000. Na medida de solubilidade do gás na água utilizou-se o procedimento definido por Montalvão (1996), estimando-se uma incerteza na medida de solubilidade de 2,6 % para o caso do ar, 2,0 % para o caso do oxigênio puro e de 7,8 % para o caso do ozônio.

RESULTADOS

A figura 2 mostra experimentalmente a influência da área interfacial no valor do coeficiente global de transferência de massa. No eixo das abcissas tem-se o valor da área de troca de massa gerada por unidade de tempo, A, e no eixo das ordenadas tem-se o valor do coeficiente global de transferência de massa, Kla .

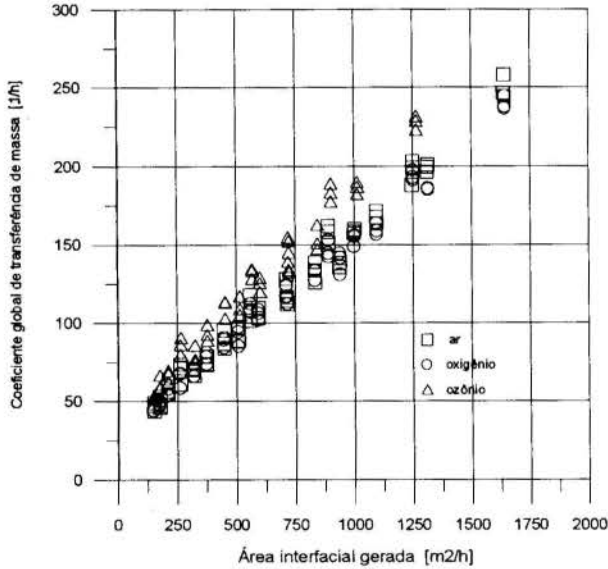


Figura 2 - Comportamento do coeficiente global de transferência de massa com a área interfacial

Pode-se observar na Figura 2 que o espalhamento dos resultados é pouco significativo apesar do coeficiente global de transferência de massa não depender unicamente da área de troca de massa. Para a mesma área de troca de massa gerada, por exemplo de 250 m²/h tem-se uma variação entre 55 e 90 h⁻¹ no coeficiente global de transferência de massa, ou seja, uma variação de +/- 17,5 h⁻¹ (24 % em relação à média). Para valores mais elevados na área de troca de

massa, 1250 m²/h, obtém-se uma variação de 160 a 230, +/- 35,0 h⁻¹ (18 % em relação à média). Um erro na medida da área de troca de massa de 30 %, significa um erro na medida do Kla de 25 %. Pode-se dizer que os erros cometidos na avaliação da área são idênticos aos erros obtidos no cálculo do Kla . Verifica-se uma tendência de aumento do Kla para os resultados dos ensaios com ozônio. Para uma área de troca de massa de 1250 m²/h obteve-se um Kla de 200 h⁻¹ para os ensaios com oxigênio e ar e para o caso dos ensaios com ozônio um valor de 225 h⁻¹, um aumento de 12,5 % no Kla .

Observando-se os resultados experimentais e fazendo uma análise dimensional verificou-se que o coeficiente global de transferência de massa, Kla , é função dos seguintes parâmetros: velocidade média do escoamento, velocidade da fase gás, velocidade da fase líquida, área da seção de escoamento, pressão do escoamento, temperatura, propriedades do gás e do líquido, vazão de gás e do líquido e área de troca de massa. Na obtenção de uma relação empírica agrupou-se as variáveis envolvidas em grupos adimensionais. Relacionando-se a área de transferência de massa gerada por unidade de tempo, (A), com a velocidade da fase gás, (u_g), vazão de líquido, (Q_L), e com o coeficiente global de transferência de massa, (Kla), define-se o número adimensional,

$$F_M = A u_g / (Kla \cdot Q_L) \quad (17)$$

Após algumas tentativas de correlacionar os resultados, concluiu-se que o número F_M é uma função de (β , S, Rey_H , Sc, X). A partir dos resultados experimentais, e utilizando-se o método dos mínimos quadrados para ajuste das constantes e expoentes, definiu-se equação empírica de ajuste,

$$F_M = 45000 \cdot \beta \cdot S \cdot Rey_H^{0,17} \cdot Sc^{-0,46} \cdot X^{+0,46} \quad (18)$$

Conforme publicado no "Ozone in Water Treatment", 1991, assumiu-se que o coeficiente de difusão do ozônio na água de $1,74 \cdot 10^{-9}$ m²/s e do oxigênio na água (D_0) é $2,5 \cdot 10^{-9}$ m²/s. A viscosidade absoluta do oxigênio (μ_g) de $1,3 \cdot 10^{-5}$ kg/m.s e o volume específico da água (v_L) de 0,001 m³/kg. Esta relação empírica é válida para valores da razão de vazões, (β), entre 0,028 e 0,28, razão de escorregamento, (S), próximos à unidade, valores de Reynolds homogêneo, (Rey_H), entre $3 \cdot 10^4$ e $7 \cdot 10^4$, número de Schmidt, (Sc), entre 100 e 2500 e valores do parâmetro de Lockart Martinelli, (X), entre 50 e 600.

A Figura 3 compara os resultados experimentais do fator F_M equação (17) com os resultados obtidos através da relação empírica (18). No eixo das abcissas tem-se o valor do fator, F_M , obtido pela relação (18) e no eixo das ordenadas tem-se o valor do fator, F_M . Pode-se observar que o comportamento da equação em relação aos resultados experimentais é satisfatória, obtendo-se uma incerteza devido ao ajuste 7,8 %. As incertezas estimadas nos resultados experimentais resumem-se a: 10,7 % na área de troca de massa (A), 8,5 % no (Kla) para os casos dos ensaios com ar, 8,4 % no (Kla) para os ensaios com oxigênio, 11,4 % no (Kla) para o caso dos ensaios com ozônio, 4,0 % na vazão volumétrica de gás (Q_g), 2,9 % na vazão volumétrica da água (Q_L), 5,5 % na razão de vazão volumétrica (β), 12,0 % na razão de escorregamento entre as fases (S), 6,9 % na medida da velocidade homogênea, (u_H), 7,2 % no número de Reynolds homogêneo (Rey_H), 6,1 % no número de Schmidt (Sc) e 5,6 %

estima-se que a incerteza obtida no fator F_M , calculado a partir da equação (18) é de 17,4 %.

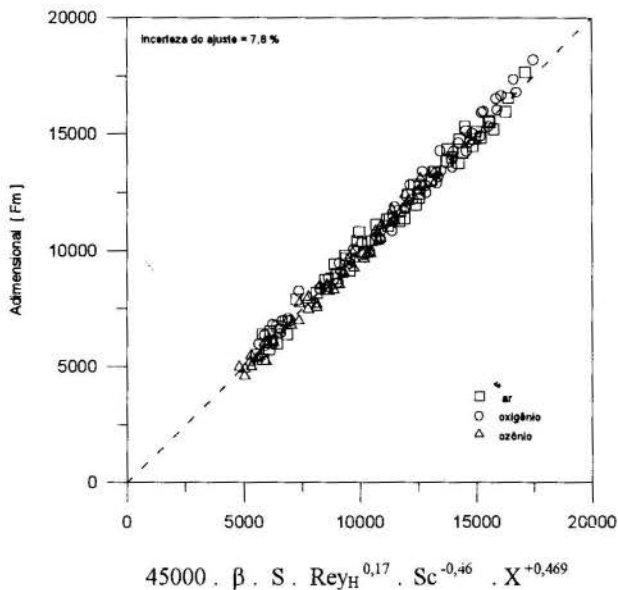


Figura 3 - Resultados do ajuste do fator (F_M) aos dados experimentais

REFERÊNCIAS

- Armand, A.A. Resistance to two-phase flow in horizontal tubes (in Russian) Izv. VTI, 1946, 15(1), 16-23. English translation, NLL M882, Boston Aps, Yorks : National Library.
- Chisholm, D., Two-phase flow, in pipeline and heat exchangers, Longman Inc., New York, 1983.
- Holman, J. P. "Experimental Methods for Engineers" McGraw-Hill, 1966
- "Ozone in Water Treatment", Cooperative Research Report, Lewis Publishers, 1991
- Leibson, I., Holcomb, E.G., Cacosso, A.G. and Jacmic, J.J., 1956 "Rate of Flow and Mechanics of Bubble Formation from Single Submerged Orifices", A.I.Ch.E.T., 2, 296-306
- Montalvão, A.F.F. "Avaliação experimental do coeficiente de transferência de massa num escoamento bifásico de gás e líquido utilizando-se um misturador supersônico", Tese de Doutorado, COPPE, Rio de Janeiro, Março de 1996
- Montalvão, A. F. F., Russo, C., Albuquerque, M., "Determinação experimental de coeficiente de transferência de massa em dispersão de gás ozônio em coluna de líquido", XXI Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos, Ouro Preto, M.G., Brasil, 1993.
- Taitel, Y. and Duckler, A. "A model for predicting flow regimes transitions in horizontal and ear-horizontal flow", A. I. Chemical Engineers Journal, 1976, 22, p.47-55.

ABSTRACT

Gas-liquid systems have been extensively applied in several industrial processes, such as wastewater treatment, drinking water treatment and food production. In some cases, the proposal is the gas absorption in the liquid phase and in other cases the aim is the stripping of the soluble gas in the bulk of the liquid. The mass transfer coefficient is an important parameter to assess the efficiency of the process or for the reactors design. In this paper is showed the experimental results and the mass transfer coefficient evaluation with ozone and water mix flow in a tube reactor. Pressure, gas and liquid flow and the mass transfer interface area were changed. It was developed an empirical model to estimate the mass transfer coefficient under these different conditions.



ABSORÇÃO DE OXIGÊNIO E DESSORÇÃO DE GASES ORGÂNICOS PELA ÁGUA

Alessandra Morales Momesso, Alan Cavalcanti da Cunha,
Selva Amaral Garcia Schulz, Harry Edmar Schulz*

(*)Departamento de Hidráulica e Saneamento, EESC - USP, Av. Dr. Carlos Botelho 1465,
CP 359, 13560/250, São Carlos, São Paulo, Brasil. (*Membro da -ABCM)



RESUMO

Experimentos foram realizados para testar tendências teóricas desenvolvidas recentemente, associadas aos processos de transferência de gases na interface ar-água. Os ensaios foram conduzidos em tanques de aço inoxidável, com agitação induzida por hélices e temperaturas na faixa de 14,4 a 30°C. As rotações das hélices variaram de 72 a 1997 rpm. Os gases ensaiados nos processos, de absorção-dessorção interfacial foram metano, etileno, acetileno, propano e oxigênio. Cromatografia gasosa foi utilizada na determinação da concentração dos gases na água. Os resultados dos diferentes gases formaram uma única nuvem de pontos, mostrando que, nas condições ensaiadas, a análise teórica é utilizável. Dados de literatura foram ainda analisados visando testar a aplicabilidade da aproximação analítica para compostos voláteis.

INTRODUÇÃO

Os fenômenos de transporte de grandezas escalares como massa e energia em escoamentos turbulentos são, de forma geral, quantificados a partir de análises dimensionais feitas sobre dados medidos. Este procedimento produz gráficos e expressões de regressão confiáveis, que permitem o seu uso em projetos. A busca de métodos que reproduzam os dados medidos e permitam um entendimento maior dos processos envolvidos, a partir de ferramentas puramente analíticas, tem encontrado obstáculos fortes, como a inexistência de um método geral de análise para o sistema não-linear de equações governantes desses fenômenos, a complexidade do tratamento estatístico dos escoamentos (e as dúvidas acerca das melhores formas de análise estatística) e, ainda, a necessidade de uma informação adicional ao sistema de equações gerado para que o mesmo possa ser resolvido.

Quando o processo de transferência estudado ocorre junto a uma interface móvel, como o caso das interfaces gás-líquido, algumas incertezas adicionais são acrescentadas ao problema. Entre essas, temos a dificuldade de se definir uma interface (a nível macroscópico ela é visível, mas a nível sub-microscópico há apenas uma região de transição entre gás e líquido), a dificuldade de definir uma "concentração de interface" para o gás na superfície do líquido, bem como uma "temperatura de interface", que interfere no processo de transporte e, finalmente, a influência dos movimentos turbulentos do líquido no transporte de parcelas do mesmo contendo gás dissolvido. A maior parte dessas questões são assuntos de pesquisas especializadas, sendo que o problema, de forma global, pode ter, no momento, apenas uma quantificação aproximada. O contexto moderno, entretanto, no qual o consumo desenfreado e o descarte de resíduos atinge níveis cada vez mais altos, já tangenciando uma situação de insustentabilidade, exige que alguns processos passem a ser dominados com um detalhamento razoavelmente grande, de forma que possam ser otimizados. Entre esses processos, a transferência de gases através da interface ar-água vem assumindo papel cada vez mais relevante, dadas as necessidades de recuperação de rios, de previsão de capacidade de depuração dos mesmos, de avaliação das trocas de gás-carbônico entre oceanos e atmosfera (uma decorrência da quantidade excessiva de emissão deste gás atualmente), de

otimização das estações de tratamento de águas e esgotos para uma população sempre crescente, de otimização de processos industriais e de recuperação de gases em rejeitos líquidos industriais. Assim, vê-se que o tema complexo e sem equacionamento definitivo da transferência de gases na interface ar-água necessita, com certa urgência, de uma solução utilizável.

As contribuições historicamente mais relevantes ao estudo analítico do fenômeno em questão são as considerações acerca dos dois filmes interfaciais (teoria dos dois filmes) de Lewis e Whitman (1924), a introdução do efeito do movimento de parcelas de líquido junto à superfície (teoria da penetração) de Higbie (1935), citado em Hines e Maddox (1985), o uso de uma distribuição de idades para os elementos de fluido em movimento junto à superfície (teoria da renovação superficial) de Dankwerts (1951), as conjecturas acerca da possibilidade de o comportamento da transferência de gases ser diferente para altas e baixas agitações (com respeito à influência da difusividade molecular) de Kishinevski e Serebrianski (1955) e a busca de uma evolução dos coeficientes de transferência de massa com relação à agitação, com reflexos na influência da difusividade molecular, efetuada por Dobbins (1962). As conclusões das diferentes abordagens conduziram a resultados diferentes, principalmente no que tange ao expoente da difusividade molecular na equação final para os coeficientes de transferência de massa. Estudos que visam conciliar diferentes pontos de vista ou que fortalecem uma das abordagens em detrimento das demais multiplicaram-se na literatura da área. Uma parcela desses modelos podem ser considerados semi-empíricos, uma vez que fundamentam parte de suas conclusões em medidas efetuadas sob condições mais ou menos controladas. Entretanto, a aproximação analítica de Schulz e Schulz (1991, 1992) parece ter permitido conciliar pontos de vista inicialmente antagônicos e sugerir um equacionamento mais abrangente. A re-análise de resultados da literatura (Schulz et al., 1993), que mostra que as previsões de ordem mais geral estão de acordo com dados medidos, sugere o estudo mais detalhado desta formulação.

O presente estudo apresenta resultados que testam a aplicabilidade da aproximação analítica efetuada por Schulz e Schulz (1991, 1992) a sistemas de agitação mecânica da água.

CARACTERÍSTICAS DA APROXIMAÇÃO ANALÍTICA

Schulz e Schulz (1991, 1992) aplicaram a equação unidimensional de transferência de massa na camada-limite de concentração da fase líquida, junto a uma interface gás-líquido. A equação envolve, no caso turbulento, o produto das flutuações de concentração e de velocidade, um termo de comportamento ainda não devidamente conhecido. A aproximação de Boussinesq, na qual se define um coeficiente de transferência de massa turbulento, foi utilizada, admitindo ainda uma variação linear deste coeficiente para com a distância à interface gás-líquido. Isto possibilitou a integração da equação na camada-limite de concentração. O problema foi resolvido por separação de variáveis, conduzindo a uma evolução temporal exponencial da concentração de gás no líquido (amplamente observada em experimentos relatados na literatura) e a uma evolução espacial envolvendo funções de Bessel de primeira e segunda espécies. Expansões em séries de potências permitiram a quantificação da concentração ao longo da camada-limite para diferentes situações de agitação turbulenta, estabelecendo, ainda, relações entre parâmetros adimensionais, que surgiram em decorrência do método de integração adotado. Entre as relações obtidas, a equação 1 apresenta especial interesse, uma vez que envolve parâmetros macroscópicos que podem ser utilizados em projetos da área.

$$m^* = \omega x^{*n} \quad (1)$$

$m^* = (aH/D)$ e $x^* = (KD/a^2)$ são parâmetros adimensionais, a é uma escala de velocidade característica do processo de agitação junto à superfície (m/s), H é a profundidade média do corpo de líquido (m), D é a difusividade molecular do gás no líquido (m²/s), K é o coeficiente de transferência de massa (s⁻¹) e ω é uma constante (a qual pode ser dependente da temperatura). n é um expoente que, nas aproximações analíticas efetuadas, pode variar entre -1 (maiores agitações turbulentas) e -0,5 (menores agitações). Resultados experimentais de diversas fontes foram analisados em Schulz et al. (1993), mostrando coerência entre previsão e dados obtidos. No presente trabalho efetua-se um estudo detalhado das tendências previstas, utilizando diferentes gases, condições de agitação e temperaturas, para um equipamento mecânico com agitação induzida por hélices.

EQUIPAMENTO E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

Os experimentos foram conduzidos em dois tanques cilíndricos com diâmetro de 30,0 cm e altura de 40,0 cm. As hélices tipo turbina foram confeccionadas com 10,0 cm de diâmetro, fixas em eixos de 1,0 cm de diâmetro. Inibidores de movimento de rotação foram introduzidos, consistindo de oito placas verticais com 2,5 cm de largura, colocadas duas a duas em posições diametralmente opostas. Todo este equipamento, que ficou em contato direto com a água do experimento, foi confeccionado em aço inoxidável. Cada tanque possuía um sistema de polias ajustáveis e um motor, de forma que os experimentos podiam ser conduzidos independentemente. Os tanques foram preenchidos com água até a profundidade de 30,0 cm e imersos em um banho térmico, cuja temperatura era mantida constante para cada experimento. O banho térmico foi ligado a uma fonte de água fria com temperatura controlada. O equipamento foi colocado no interior de uma capela de madeira com as dimensões 2,1 x 2,1 x 2,1 m, com sistema de ventilação apropriado (ventilador e exaustor). Os experimentos eram conduzidos no interior da capela, de forma que o conjunto

permanecia isolado do ambiente externo. Uma descrição detalhada é fornecida em Cunha (1993) e em Momesso (1996). Os tanques e o equipamento em geral foram rigorosamente dimensionados de acordo com a padronização sugerida em Bates et al. (1963). As curvas de potência utilizadas para efetuar a análise envolvendo a taxa de dissipação de energia foram extraídas da referência mencionada. A faixa de temperatura ensaiada foi de 14,4 a 30,0°C. As rotações variaram de 72 a 1997 rpm. Para cada experimento ajustava-se a temperatura e a rotação de trabalho e enchiam-se os tanques com água destilada. Em seguida, para a análise dos gases hidrocarbonetos, preparava-se, em frasco separado, por borbulhamento, um litro de solução de água com alta concentração do gás a ser analisado (metano, etileno propano ou acetileno) e despejava-se nos tanques. A partir de então, efetuava-se a coleta das amostras de água para análise da concentração gasosa. Esta análise foi feita utilizando a técnica "Head Space" (ver Cunha, 1993, e Momesso, 1996). As amostras eram coletadas com pipeta volumétrica apropriadamente construída, com volume de 37,5 ml. Cada amostra era colocada em um frasco de 60 ml, de forma que 40% do volume do frasco ficava preenchido de ar. A amostra era agitada e acondicionada por um tempo suficiente para atingir o equilíbrio de gás entre as fases líquida e gasosa no frasco de vidro. Com auxílio de seringas apropriadas, 1,0 ml de amostra gasosa era extraída do volume de ar existente em cada frasco e injetada em um cromatógrafo de ionização de chama. A concentração do gás no líquido era avaliada a partir da condição de equilíbrio existente no frasco da amostragem. Para o oxigênio, a medida da concentração foi feita diretamente com o auxílio de um medidor tipo eletrodo de membrana, dotado de registrador digital. A partir da evolução temporal da concentração dos gases, cujas curvas sempre seguiram a tendência exponencial esperada, obtiveram-se, por análise de regressão utilizando mínimos quadrados, os coeficientes de transferência interfacial de massa.

RESULTADOS

Os resultados obtidos para m^* e x^* são apresentados na figura 1. Para a obtenção desses valores adimensionais, utilizou-se a velocidade periférica das hélices como a escala de velocidade característica dos processos, a . Verifica-se que a nuvem de pontos gerada engloba, sem formas visíveis de segregação, todos os gases analisados. Este fato indica que a adimensionalização efetuada no desenvolvimento da aproximação analítica contempla bem o processo de transferência de massa de diferentes gases. Observa-se, ainda, que a nuvem de pontos apresenta uma região de mínimo, a qual delimita a região de aplicação da Eq. (1) com n negativo. As características qualitativas da interface ar-água foram cuidadosamente observadas e anotadas à medida que a agitação era modificada (diferentes rotações impostas às hélices). Verificou-se que, para valores de $\log m^*$ menores que 8,7 (rotações em torno de 800 rpm) a superfície da água mantinha uma característica "plana", enquanto que para valores de $\log m^*$ acima deste limite, a agitação imposta provocava, inicialmente, distorções e ondulações e, posteriormente, para as rotações acima de 1600 rpm (região dos maiores valores de $\log m^*$), a superfície apresentava-se "quebrada", com bolhas inseridas no corpo líquido, respingos e extravasamento ocasional do tanque devido a ondulações intensas e eventuais jatos ascendentes de água. Como a aproximação analítica é unidimensional, vê-se que a região de aplicação da mesma restringe-se às situações que obedecem a unidimensionalidade, ou seja, situações de superfície plana. Não obstante, rotações da ordem de 800 rpm implicam agitação turbulenta de magnitude razoável junto à

superfície. Assim, o expoente n estar próximo a -1 é um resultado esperado (corresponde às maiores agitações turbulentas para a aproximação analítica). O grande espalhamento dos dados relativos ao oxigênio dissolvido para as menores agitações induziu a uma diminuição, ainda que pequena, no valor absoluto da declividade calculada por regressão, o que, porém, não compromete a análise geral dos resultados. O valor de $1/n = -0,98$ traduz este espalhamento para as baixas agitações, o qual está muito próximo do valor $n = -1$, que caracteriza o limite de aplicação da aproximação em questão e que pode ser adotado como o expoente característico para este equipamento (ver figura 1).

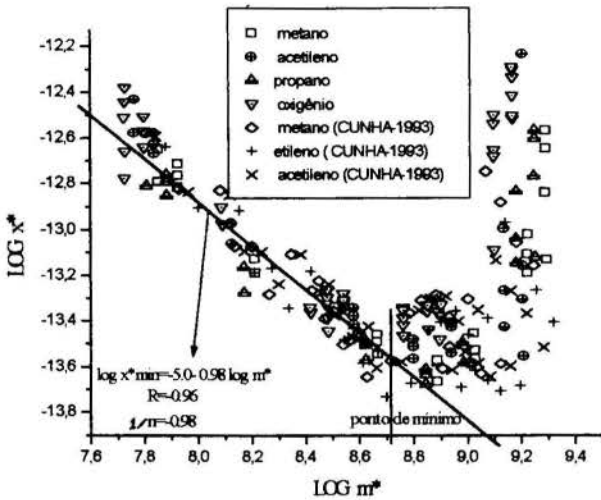


Figura 1 - Resultados obtidos para m^* e x^* para diferentes gases, bem como reta de ajuste.

Os modelos de transferência interfacial de massa, de forma geral, avaliam o coeficiente de transferência utilizando parâmetros vinculados à turbulência, que não possuem quantificação prévia, permanecendo o problema do fechamento em turbulência. Embora isto pareça se repetir com a aproximação de Schulz e Schulz (1991), considerando a escala de velocidade a , o fato de os autores haverem fornecido curvas de resposta teóricas para a transferência interfacial de massa, permite verificar a validade do uso da velocidade periférica das hélices como a velocidade característica dos processos estudados. Na aproximação analítica não se buscou uma explicação conjunta dos campos escalares e vetoriais. Reconhece-se, outrossim, que o campo escalar de concentração não interfere no estabelecimento do campo de velocidades. Assim, obtendo-se uma expressão adicional para a escala de velocidade a junto à superfície, considerando apenas o campo de escoamento, é possível fechar a questão da transferência de massa, uma vez que se possui o resultado analítico. Em termos de escoamento, as grandezas que são relevantes no equacionamento da velocidade a são: ϕ , o diâmetro do tanque (m), d , o diâmetro da hélice (m), U , a velocidade periférica da hélice (m/s), ν , a viscosidade cinemática do fluido (m^2/s), H , a profundidade do líquido (m), W , a distância entre a hélice e a superfície da água (m) e, evidentemente, a escala de velocidade a . A análise dimensional do problema permite obter a Eq. (2):

$$\frac{a}{U} = f\left(\frac{dU}{\nu}, \frac{H}{d}, \frac{\phi}{d}\right) \quad (2)$$

Como tanto profundidade, distância entre hélice e superfície, diâmetro da hélice e diâmetro dos tanques permaneceram constantes, os três últimos parâmetros da equação 2 não são relevantes nesta análise, restando, portanto:

$$\frac{a}{U} = f\left(\frac{dU}{\nu}\right) \quad \text{ou} \quad a = jU \quad (3)$$

j é função do número de Reynolds associado à velocidade da hélice e seu diâmetro. Note-se que a velocidade a é função da velocidade U . Unindo as Eqs. (1) e (3) e extraindo o logaritmo, obtém-se a equação da reta que coincide, para a faixa de variação de agitação estudada, com a função analítica calculada por Schulz e Schulz (1992):

$$\log\left(\frac{KD}{U^2}\right) - 2 \log j = \frac{1}{n} \log\left(\frac{Ud}{D}\right) + \frac{1}{n} \log j + \log\left(\frac{1}{\omega_1}\right)^{1/n} \quad (4)$$

Por outro lado, na análise feita para obter a figura 1, considerou-se $a = U$, o que, em conjunto com a equação 1, leva a:

$$\log\left(\frac{KD}{U^2}\right) = \frac{1}{n} \log\left(\frac{Ud}{D}\right) + \log\left(\frac{1}{\omega_2}\right)^{1/n} \quad (5)$$

A velocidade na superfície da água é, evidentemente, menor do que a velocidade da hélice, o que faz com que o valor de j seja menor do que 1 e o seu logaritmo seja negativo. Isto implica que, num gráfico bi-logarítmico, a reta 5 esteja sempre transladada abaixo e à direita da reta 4. A figura 2 elucida o comentado.

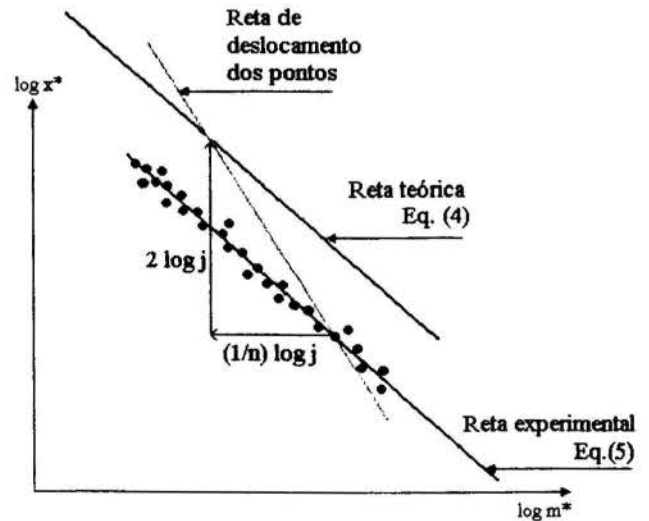


Figura 2 - Procedimento de translação adotado para calcular o parâmetro j , a partir das Eqs. (4) e (5).

Para o intervalo de trabalho da presente análise, o coeficiente angular da reta teórica (no gráfico logarítmico) é $1/n = -1,16$, enquanto que o seu coeficiente linear é $-1,37$. Com esses valores foram determinados os pontos de intersecção entre as retas de deslocamento de cada ponto experimental e a reta teórica. A partir dos pontos de intersecção e dos pontos experimentais foi possível determinar o valor de j para cada

experimento. Os resultados para os gases orgânicos estudados são apresentados na figura 3. Observa-se que j mantém um comportamento razoavelmente constante até um valor de $\log Reynolds$ da ordem de 5,6. Neste intervalo, j oscila na faixa de 0,0002 a 0,0006. A partir do valor de $\log Reynolds$ de 5,6, há uma explosão no valor de j , a qual caracteriza a situação de distorção e quebra da interface ar-água. Vê-se que esta análise permite localizar de forma muito evidente a faixa de agitação na qual a superfície da água se mantém plana.

A faixa de j constante coincide com a região de aplicação da aproximação proposta, mostrando, ainda, que a velocidade periférica da hélice é um parâmetro que quantifica bem a escala de velocidade a na aproximação analítica feita, uma vez que ambas diferem apenas por um fator multiplicativo constante.

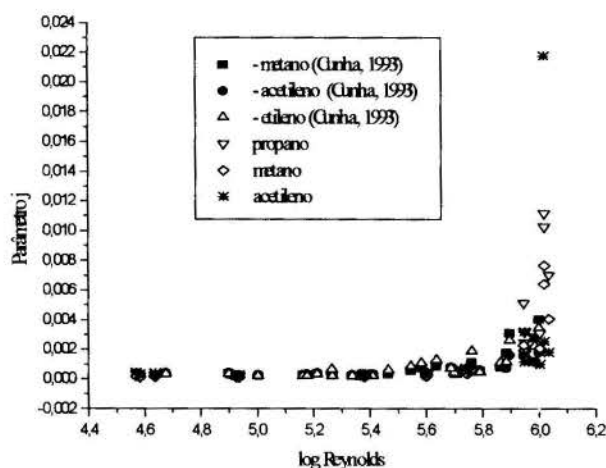


Figura 3 - Valores do parâmetro j como função do número de Reynolds da hélice. Observa-se a constância para $\log Reynolds < 5,6$

COMPARAÇÃO COM DADOS DE LITERATURA

Os resultados positivos aqui obtidos para a transferência de gases na interface ar-água induziram a buscar comparações com processos de transferência de outras substâncias em condições semelhantes. Assim, procurou-se verificar a validade da formulação para compostos voláteis, localizando, na literatura, estudos que permitissem efetuar a quantificação de m^* e x^* . Os dados medidos por Hsieh et al. (1993) para vinte compostos orgânicos voláteis e para o oxigênio, em condições experimentais próximas às do presente estudo, mostraram-se apropriados para esta análise.

O equipamento utilizado por Hsieh et al. (1993) possui duas hélices para agitação dentro do tanque, o que confere ao seu equipamento características geométricas distintas daquelas adotadas neste estudo. Entretanto, visando verificar as tendências gerais quanto ao expoente n da Eq. (1), adotou-se a soma das velocidades periféricas das hélices como uma medida da velocidade característica no equipamento. Os compostos utilizados por Hsieh e seus colaboradores estão indicados na tabela 1. Os resultados obtidos a partir dos parâmetros adimensionais m^* e x^* estão indicados na figura 4. Percebe-se que a tendência geral da nuvem de pontos da figura 4 segue a tendência já observada na figura 1. Há contudo, uma translação significativa entre os pontos obtidos para o gás estudado (oxigênio) e os compostos voláteis, mostrando que outras características intrínsecas dos compostos voláteis a serem transportados na interface (além da difusividade molecular deste na água) são importantes para a quantificação do fenômeno. As declividades médias das curvas observadas na figura 4 estão no intervalo $-2,0 < 1/n < -1,0$, de acordo, portanto, com a aproximação analítica em questão. Observa-se, adicionalmente, que as curvas correspondentes aos diferentes compostos voláteis também estão transladadas entre si, o que indica que o mecanismo de transferência de compostos voláteis é mais complexo do que aquele para gases.

Tabela 1 - Relação dos compostos orgânicos voláteis analisados por Hsieh et al. (1993) juntamente com os símbolos utilizados para identificá-los na figura 4.

Composto	Símbolo Usado	Composto	Símbolo Usado
1,2 ortoxileno	OXY	1,3 metaxileno	MXY
benzeno	BZ	1,2 dicloroetano	12DCE
bromobenzeno	BBZ	etilbenzeno	EBZ
tetracloroeto de carbono	CT	etilenobrometo	EDP
clorobenzeno	CBZ	naftaleno	NAPH
clorofórmio	CLF	percloroetileno	PCE
bromofórmio	BF	1,1,1 tricloroetano	111TCA
1,2 diclorobenzeno	12DCB	1,1,2,2 tetracloroetano	1122TCA
1,3 diclorobenzeno	13DCB	tolueno	TLN
1,4 diclorobenzeno	14DCB	tricloroetileno	TCE
oxigênio	OXI		

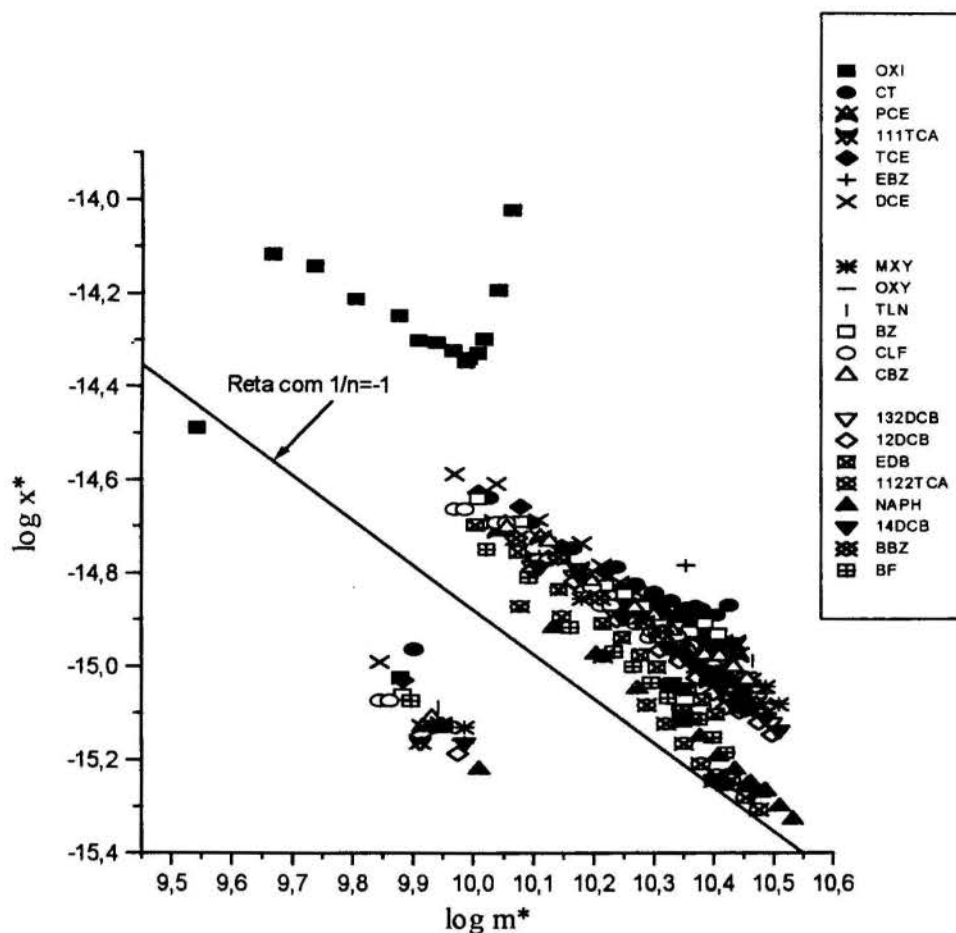


Figura 4 - Relação entre x^* e m^* para os compostos orgânicos voláteis estudados por Hsieh et al. (1993)

Os resultados permitem ainda observar o limite inferior de aplicação da formulação em questão, no que concerne ao valor de $\log m^*$. Verifica-se que para as menores agitações (menores valores de $\log m^*$) também há fuga do comportamento sugerido pela aproximação analítica. Segundo Hsieh et al. (1993), para as rotações mais baixas não é possível garantir a presença de turbulência junto à interface. As influências preponderantes no movimento do líquido, para essas rotações, são viscosas.

Como no equacionamento admite-se, a priori, a existência de um coeficiente de transferência turbulento, as situações nas quais a viscosidade molecular é preponderante não são bem previstas pelo equacionamento em questão. Conclui-se, portanto, que a aproximação de Schulz e Schulz (1991, 1992) aplica-se às situações de agitação que podemos qualificar de moderadas, nas quais os efeitos viscosos não são preponderantes e nas quais a superfície não se apresenta deformada ou quebrada.

A figura 5 mostra os resultados para a transferência de oxigênio obtidos no presente trabalho, juntamente com aqueles obtidos por Hsieh et al. (1993). Nota-se que o comportamento é semelhante nos dois experimentos. A translação entre as curvas se deve, neste caso, ao efeito das diferenças entre as geometrias dos dois equipamentos (uma ou duas hélices, etc...).

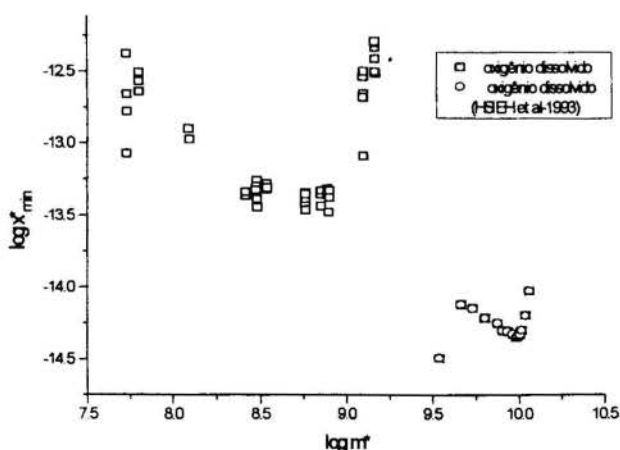


Figura 5 - Dados de oxigênio dissolvido obtidos no presente trabalho (\square) e por Hsieh et al., 1993 (\circ).

CONCLUSÕES

O processo de transferência de gases na interface ar-água foi estudado experimentalmente, visando testar a aproximação analítica de Schulz e Schulz (1991). Os resultados obtidos permitem concluir que a aproximação analítica prevê com acerto o valor do expoente na Eq. (1). Para o equipamento em questão, o valor do expoente está muito próximo a -1, podendo ser utilizado este valor como característico do processo de transferência de massa interfacial. Um estudo acerca da velocidade característica presente na modelação indicou que a mesma é proporcional à velocidade periférica da hélice, sendo que esta proporcionalidade se mantém enquanto a superfície do líquido é plana. Conclui-se, então, que o equacionamento testado

é válido em situações de superfície plana, onde a unidimensionalidade do transporte de massa pode ser atingida. O limite superior de aplicação das conclusões aqui apresentadas é $\log m^* = 8,7$, para o equipamento utilizado.

Comparação com dados de literatura permitiram localizar um limite inferior no que concerne à agitação imposta à água. No caso de situações nas quais o movimento do fluido é governado principalmente por efeitos viscosos (baixas agitações), existe fuga do comportamento observado com relação àquele previsto.

O tratamento dos dados segundo as sugestões da aproximação analítica gerou uma única nuvem de pontos para os diferentes gases estudados, mostrando que a adimensionalização efetuada se aplica bem ao estudo de gases. Por outro lado, para compostos voláteis, embora o comportamento da nuvem de pontos siga a tendência geral proposta pela aproximação analítica, os dados de diferentes compostos são segregados nesta nuvem. Isto indica que outras propriedades desses compostos são importantes, além da difusividade molecular.

Os comportamentos observados para a transferência de oxigênio efetuada em dois equipamentos diferentes mostraram-se semelhantes. As translações observadas devem-se aos efeitos das diferenças geométricas.

Conclui-se que o equacionamento proposto é viável como ferramenta de trabalho e pesquisa, podendo ser utilizado em estudos de otimização para transferência de gases na interface ar-água, como mencionado na introdução do trabalho.

AGRADECIMENTOS

Os autores são gratos à FAPESP, pelos auxílios destinados a esta pesquisa, ao CNPq e à CAPES, pelas bolsas concedidas.

REFERÊNCIAS

Cunha, A.C. da 1993, "Transferência de Gases em Sistemas Líquidos Altamente Agitados Induzidos por Hélices do Tipo Turbina em Tanques Cilíndricos". Dissertação de mestrado. Escola de Engenharia de São Carlos-USP, São Carlos, São Paulo.

Dankwerts, P.V. 1951, "Significance of Liquid-Film Coefficients in Gas Absorption". *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol 43, n.º 6, pp. 1460-1467.

Dobbins, W.E. (1962): "Mechanism of Gas Absorption by Turbulent Liquids". *International Conference of Water Pollution Research Proceedings*, London, September, Pergamon Press, pp.61-96.

Hines, A.L. and Maddox, R.M. 1985, "Mass Transfer-Fundamentals and Applications", New Jersey, Prentice Hall Inc. 542p.

Hsieh, C., Ro, K.S. and Strenstrom, M.K. 1993, "Estimating Emissions of 20 VOCs. I: Surface Aeration". *Journal of Environmental Engineering-ASCE*, Vol 119, n.º.6, pp. 1077-1097.

Kishinevsky, M.Kh. and Serebriansky, V.T. 1955, "The Mechanism of Mass Transfer at the Gas-Liquid Interface with Vigorous Stirring". *Journal of the Sanitary Engineering Division, ASCE*, Vol 88, n.º. SA2, pp. 53-83.

Lewis, W.K. and Withman, W.G. 1924, "Principles of Gas Absorption". *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol 16, n.º. 12, pp.825-833.

Momesso, A.M. 1996, "Absorção e Dessorção de Gases Através da Interface Ar-Água em Sistemas de Agitação Mecânica". Dissertação de Mestrado. Escola de Engenharia de São Carlos-USP, São Carlos, São Paulo.

Schulz, H.E. and Schulz, S.A.G. 1991, "Modelling Below-Surface Characteristics in Water Aeration". In: *Water Pollution-Modelling, Measurements and Prediction*, Eds. Wrobel, L.C. and Brebbia, C.A., Elsevier Applied Sciences and Computational Mechanics Publications, Southampton, pp. 441-454.

Schulz, H.E. and Schulz, S.A.G. 1992, "Water Aeration: An Approach for the Near-Surface Region". In: *Proceedings of the IX International Conference of Computational Methods in Water Resources*, juni, Denver-USA.

Schulz, H.E., Barbosa Jr., A.R., Schulz, S.A.G. and Krebs, P. 1993, "A Review of Gas Transfer at Liquid Surfaces for Sanitary Engineering and Environmental Quality". In: *Advances in Hydro-Sciences and Engineering*, Ed. Wang, S.S.Y., University of Mississippi, pp.323-328.

SUMMARY

Experiments were conducted to check analytical results about gas transfer at air-water interfaces found in the literature. The experiments were performed in water tanks where agitation was induced through propellers. Temperature was maintained in the range from 14,4 to 30,0 °C, while propellers rotation speeds were maintained in the range from 72 to 1997 rpm. The gases analysed in the absorption-desorption processes were methane, ethylene, acetylene, propane and oxygen. Chromatographic analysis was used to quantify gas concentrations in the water. It is shown that points corresponding to different gases group together following the analytical predictions. Literature results for VOCs were also analysed, showing that, for such compounds, interfacial mass transfer processes seem to be more complex than for gases.



Av. Pinho Brasil Milano, 2145
Fone 341-0455 - P. Alegre - RS