



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA QUÍMICA

MODELAGEM E RESOLUÇÃO NUMÉRICA DOS
SISTEMAS DE EQUAÇÕES DE UMA TORRE DE
RESFRIAMENTO EM CORRENTE CRUZADA

ANDRÉ FURTADO AMARAL

Belo Horizonte, 27 de Fevereiro de 2015

André Furtado Amaral

MODELAGEM E RESOLUÇÃO NUMÉRICA DOS SISTEMAS DE EQUAÇÕES DE UMA TORRE DE RESFRIAMENTO EM CORRENTE CRUZADA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Minas Gerais para à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Área de Concentração: Engenharia Química.

Orientador: Idalmo Montenegro de Oliveira

Universidade Federal de Minas Gerais

Belo Horizonte, 2015

A485m Amaral, André Furtado.
Modelagem e resolução numérica dos sistemas de equações de uma
torre de resfriamento em corrente cruzada [manuscrito] / André Furtado
Amaral. – 2015.
xviii, 137 f., enc.: il.

Orientador: Idalmo Montenegro de Oliveira.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Minas Gerais,
Escola de Engenharia.

Inclui anexos.

Inclui bibliografia.

1. Engenharia química - Teses. 2. Torres de resfriamento - Teses.
I. Oliveira, Idalmo Montenegro. II. Universidade Federal de Minas Gerais.
Escola de Engenharia. III. Título.

CDU: 66.0(043)

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a meus pais, irmãs e família pelo carinho, amor e educação que eu tive e eles me deram. É (e sempre será) o bem mais importante que eu tive.

Aos meus amigos, da capoeira e de outras 'rodas' da vida pelo apoio, presença, companhia e lealdade.

Aos meus mestres, professores, orientadores e colegas pelos ensinamentos e paciência: Marcelo, Idalmo e Éder; ao meu mestre Agostinho, meu pai preto. Aos meus novos e eternos Mestres (e amigos) Jaider, Mário e Ademir. Ao Mestre Gabriel.

À minha namorada, Mayra, com quem aprendi boa parte das coisas que sei hoje de mim e das outras pessoas.

À CAPES, que proviu financeiramente este trabalho.

ÍNDICE

LISTA DE FIGURAS.....	VII
LISTA DE TABELAS.....	VIII
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS.....	X
NOMENCLATURA.....	XI
RESUMO.....	XVII
ABSTRACT.....	XVIII
1. INTRODUÇÃO.....	1
2. OBJETIVOS.....	1
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	2
3.1. Torres de Resfriamento.....	2
3.2. Princípio de Funcionamento e Perfis das Propriedades do Líquido e do Gás.....	5
3.2.1. Perfis das propriedades do líquido e do gás ao longo do recheio.....	6
4. METODOLOGIA.....	9
4.1. Considerações Adotadas na Construção do Modelo.....	9
4.2. Umidade Absoluta Mássica.....	11
4.3. Entalpia.....	12
4.3.1. Entalpia do ar, da água líquida, do vapor de água.....	13
4.3.2. Entalpia de uma mistura gasosa.....	15
4.4. Fluxo Molar de Evaporação.....	16
4.5. Fluxo de Calor.....	16
4.6. Unificação das Formulações: Funções de Ativação.....	17
4.7. Balanços de Massa e de Energia.....	17
4.8. Coeficientes de Transferência de Massa e de Calor.....	17
4.8.1. Adequação das equações contendo os coeficientes de transferência.....	18
4.9. Sistema de Equações Diferenciais e Método de Resolução.....	19
4.10. Resolução do Sistema de Equações e Parâmetros do Modelo.....	23
5. ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS.....	25
5.1. Modelo.....	26
5.2. Comparação com os Resultados de outros Autores.....	27
5.3. Comparativo entre os Métodos Utilizados neste Trabalho.....	32
5.3.1. Variações do método base: formulação simplificada e método de Euler na direção secundária.....	32
5.3.2. Tempo de execução e convergência numérica.....	34
5.3.3. Métodos de Euler e Ponto-médio.....	37

5.3.4.	Função de ativação e saturação da fase gasosa	40
5.4.	Otimização da Resolução Numérica do Sistema	44
6.	CONCLUSÕES	46
7.	BIBLIOGRAFIA	48

APÊNDICE A - Demonstrações e Desenvolvimento de Equações

A.1 - Y e y_w : Formulações exata e simplificada	A.1
A.2 - H_g : Formulações insaturada e saturada	A.2
A.3 - Analogia para o transporte de massa em um tubo vertical	A.2
A.4 - Analogia para o transporte de calor em um tubo vertical	A.8
A.5 - Funções de ativação	A.12
A.6 - $\partial H_g / \partial x$: Formulações insaturada e saturada	A.14
A.7 - Formulação unificada para H_g , $\partial H_g / \partial x$ e n_w	A.15
A.8 - Balanços de massa e energia	A.16
A.9 - Carta psicrométrica	A.21
A.10 - Relação entre k_Y e h : Fator de Lewis	A.23
A.11 - Massa específica (ρ) e capacidade calorífica (C_p) do ar úmido	A.26
A.12 - Correção de Bosnjakovic	A.28
A.13 - Adequação das equações envolvendo os coeficientes de transferência	A.30
A.14 - Cálculo de $\partial Y_g^{sat} / \partial T_g$ a partir da equação de Antoine	A.31

APÊNDICE B - Análise Numérica

B.1 - Resolução numérica de sistemas de equações diferenciais	B.1
B.2 - Método de Euler e método do Ponto-médio	B.2
B.3 - Método de Bulirsch-Stoer	B.3
B.4 - Método de Runge-Kutta de 4ª ordem	B.7

APÊNDICE C - Método das Linhas e Esquema de Resolução do Sistema

C.1- Método das linhas	C.1
C.2 - Esquema de resolução do sistema	C.3

APÊNDICE D - Interpolação com Polinômios Cúbicos

APÊNDICE E - Avaliação do Erro dos Métodos Numéricos

APÊNDICE F - Balanços de Massa e Energia ao Longo do Equipamento

APÊNDICE G - Correlação adimensional para $k_Y A$

APÊNDICE H - Scripts de Matlab

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Exemplos de torres adiabáticas evaporativas, retirado de TREYBAL.....	4
Figura 2: Esquema da torre a ser simulada, adaptado de BOUROUNI ET AL.....	5
Figura 3: Arranjo esquemático da transferência de calor e massa, adaptado de OLIVEIRA.....	6
Figura 4: Divisão esquemática do recheio em linhas e colunas.....	7
Figura 5: Representação dos perfis das propriedades do líquido (esquerda) e do gás (direita).....	7
Figura 6: Arranjo esquemático do recheio real (esquerda) e da abstração do modelo (direita).....	10
Figura 7: Diagrama de entalpia de uma substância pura, adaptado de TREYBAL.....	14
Figura 8: Comparativo dos resultados obtidos com os dados de BOUROUNI ET AL: temperatura da fase gasosa (esquerda) e da fase líquida (direita).....	28
Figura 9: Linhas de contorno das propriedades da água para o método base.....	29
Figura 10: Linhas de contorno das propriedades do ar para o método base.....	30
Figura 11: Correlação adimensional e dispersão dos valores de $k_Y A$; dados de CORTINOVIS ET AL.....	31
Figura 12: Erro RMS acumulado para os métodos do Ponto-médio e Bulirsch-Stoer.....	37
Figura A.1: Perfil de concentrações de vapor d'água no tubo.....	A.3
Figura A.2: Perfil de temperaturas no tubo e esquema para o balanço de entalpia.....	A.8
Figura A.3: Tangente hiperbólica de x , $\tanh(x)$	A.12
Figura A.4: $\mathcal{H}'''(x)$ para diferentes valores de b	A.13
Figura A.5: Volume de controle da torre.....	A.17
Figura A.6: Exemplo de uma carta psicrométrica típica.....	A.21
Figura C.1: Relação dos pontos onde as VIs da água e do ar são conhecidas.....	C.3
Figura C.2: Progressão da resolução do sistema para a primeira linha ou coluna.....	C.4
Figura C.3: Progressão da resolução do sistema.....	C.5
Figura F.1: Volume de controle para os balanços de massa e energia ao longo do equipamento.....	F.1

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Derivadas espaciais das VIs, equações (A.100).	19
Tabela 2: Parâmetros para cálculo das derivadas espaciais, equações (A.92) e (A.97).	19
Tabela 3: Parâmetros para o cálculo dos termos da formulação unificada, equações (A.11) e (A.69).	20
Tabela 4: Funções de ativação, equações (A.65), (A.64) e (A.58).	20
Tabela 5: Coeficiente volumétrico de transferência de calor e taxas volumétricas de transferência de massa e calor, equações (A.155) e (A.156).	20
Tabela 6: Equação de Antoine, equação (3).	20
Tabela 7: Concentração absoluta mássica na saturação e sua derivada, equações (4) e (A.161).	21
Tabela 8: Equações auxiliares (A.52), (A.157), (18) (A.4) e (A.63).	21
Tabela 9: Polinômios de ajuste dos parâmetros termodinâmicos, equações (17).	21
Tabela 10: Parâmetros necessários para resolução do sistema.	22
Tabela 11: Dados de BOUROUNI ET AL, GROBBELAAR ET AL e CORTINOVIS ET AL.	23
Tabela 12: Dados de CORTINOVIS ET AL para a determinação da correlação adimensional.	24
Tabela 13: Resultados obtidos pelo método base.	27
Tabela 14: Erro do método numérico para o método base.	29
Tabela 15: Resultados dos dados de CORTINOVIS ET AL.	30
Tabela 16: Coeficientes da correlação adimensional.	31
Tabela 17: Resultados obtidos usando a formulação simplificada.	32
Tabela 18: Erro do método numérico para a formulação simplificada.	32
Tabela 19: Resultados obtidos usando o método de Euler na direção secundária.	33
Tabela 20: Erro do método numérico usando o método de Euler na direção secundária.	33
Tabela 21: Número de extrapolações e tempo de simulação pelo método base.	35
Tabela 22: Erro RMS para os métodos do Ponto-médio e Bulirsch-Stoer, método base.	36
Tabela 23: Resultados obtidos pelos métodos de Euler e do Ponto-médio.	38
Tabela 24: Erro do método numérico para métodos de Euler e do Ponto-médio.	38

Tabela 25: Resultados obtidos pelos métodos de Euler e do Ponto-médio, método de Euler na direção secundária.....	39
Tabela 26: Erro do método numérico para métodos de Euler e do Ponto-médio, método de Euler na direção secundária.....	40
Tabela 27: Resultados para o primeiro teste das funções de ativação.....	41
Tabela 28: Resultados para o segundo teste da função de ativação.....	42
Tabela 29: Valores de saída para o segundo teste da função de ativação.....	44
Tabela 30: Resultados da otimização da resolução numérica do sistema.....	45
Tabela B.1: Elementos $z_{lk+1}^{(l,mm)}$	B.6

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Sigla	Nome por extenso
cte	Valor constante
BS	Bulirsch-Stoer
DB	Desvio do balanço
DBE	Desvio do balanço de energia
DBM	Desvio do balanço de massa
EDO	Equação diferencial ordinária
EDP	Equação diferencial parcial
GA	Grupo adimensional
PM	Ponto-médio
RK4	Runge-Kutta de 4ª ordem
RP	Regime permanente
RMS	<i>Root Mean Square</i>
ST	Seção transversal
VI	Variável de interesse

NOMENCLATURA

Letras latinas

A	Área específica volumétrica [m^2/m^3]
A_x, A_y	Área do recheio perpendicular à direção x, y [m^2]
b, b'	Fatores de compressão da função degrau suave [—]
C	Concentração molar [kmol/m^3]
C	Constante das equações (A.125)[—]
C_p	Capacidade calorífica à pressão constante [$\text{kJ}/\text{kg} \cdot ^\circ\text{C}$]
D	Coefficiente de difusão molar [m^2/s]
d, e, f, g	Derivadas genéricas do método das linhas, equações (C.1)
e	Erro do método de BS [$^\circ\text{C}$]
f	Derivada da função genérica z [—]
H	Entalpia específica [kJ/kg]
h	Coefficiente de transferência de calor [$\text{kJ}/\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot ^\circ\text{C}$]
hA	Coefficiente de transferência de calor volumétrico [$\text{kJ}/\text{m}^3 \cdot \text{s} \cdot ^\circ\text{C}$]
K, K'	Fatores de translação da função degrau suave [—]
k_Y	Coefficiente de transferência de massa mássico [$\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$]
k'_Y	Coefficiente de transferência de massa mássico corrigido [$\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$]
$k_Y A$	Coefficiente de transferência de massa volumétrico [$\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$]
k	Coefficiente de condutividade térmica [$\text{kJ}/\text{m} \cdot \text{s} \cdot ^\circ\text{C}$]
L	Comprimento característico do sistema [m]
MM	Massa molar [kg/kmol]
M, N	Número de divisões do domínio na direção y, x [—]
N_a, N_l	Fluxo mássico de ar (seco) / fluxo mássico de líquido [$\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$]
\dot{M}_a, \dot{M}_l	Taxa mássica de ar (seco) / taxa mássica de líquido [kg/s]
m	Quantidade de massa [kg]
m	Número de pares ordenados disponíveis para determinar (G.4) [—]

n	Número de moles [kmol]
P	Pressão [kPa]
p	Polinômio cúbico, equação (D.1) [–]
Q	Calor [kJ]
q	Fluxo de calor [kJ/m ² · s]
q^*	Fluxo de calor que chega à fase gasosa [kJ/m ² · s]
R	Constante universal dos gases [kJ/kmol · °C]
r, r_1, r_2	Raízes da equação (A.44) [–]
S	Número de termos na equação (G.4)
T	Temperatura [°C]
U	Energia interna específica [kJ/kg]
U	Velocidade do fluxo [m/s]
V	Volume [m ³]
W	Trabalho [kJ]
x	Posição horizontal no domínio [m]
x^*	Posição horizontal adimensional no domínio [–]
Y	Umidade absoluta mássica [–]
y	Posição vertical no domínio [m]
y^*	Posição vertical adimensional no domínio [–]
z	Função modelo genérica [–]
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Intervalos no espaço [m]

Coefficientes de uma mesma equação

a_1, b_1, c_1	Coefficientes e expoentes dos polinômios de ajuste dos parâmetros termodinâmicos, equação (17)
A, B, C	Coefficientes da equação de Antoine, equação (3)
B_1, B_2	Constantes para a combinação linear das soluções da EDO (A.42) na equação (A.45)

$a_1, b_1, a_2, b_2, \dots$	Coeficientes da correlação adimensional, equação (G.4)
c_1, c_2, c_3, \dots	Coeficientes da série de potência do erro do método do PM, equação (B.11)
K_1, K_2, K_3, K_4	Coeficientes do método de RK4, equações (B.23)
$a^{(lk)}, b^{(lk)}, c^{(lk)}, d^{(lk)}$	Coeficientes dos polinômios cúbicos, equação (D.1)

Escritos com traçado duplo

$\dot{i}, \dot{j}, \dot{k}, \dot{l}, \dot{m}$	Índices inteiros
\mathbb{N}	Conjunto dos números inteiros
\dot{m}	Taxa volumétrica de massa através da interface [$\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$]
\dot{Q}	Taxa volumétrica de calor através da interface [$\text{kJ}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$]
\mathbb{R}	Resíduo a ser minimizado na correlação adimensional, equação (G.5) [–]
w	Fração mássica [–]
y	Fração molar [–]

Escritos com letra cursiva

d	Coeficiente do método de BS, equação (B.20)
\mathcal{F}	Fator de Ackermann [–]
$\mathcal{H}, \mathcal{H}', \mathcal{H}'', \mathcal{H}^d, \mathcal{H}^s, \mathcal{H}^*$	Funções de ativação [–]
j	Fluxo difusivo molar [$\text{kmol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$]
\mathcal{K}	Coeficiente de transferência de massa molar [m/s]
ℓ	Fluxo advectivo molar [$\text{kmol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$]
\mathcal{N}	Número de subdivisões do intervalo (relativo ao método de BS) [–]
n	Fluxo molar total [$\text{kmol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$]
\mathcal{R}	Razão entre as massas molares da água e do ar [–]
x, y, z	Dimensões do recheio [m]

Subscritos

a	Relativo ao ar
crit	Relativo ao ponto crítico (temperatura ou pressão)
E	Relativo a condições de turbilhonamento (<i>eddy</i>)
f	Relativo ao final
g	Relativo ao gás
i	Relativo ao início
l	Relativo ao líquido
P	Pressão constante (relativo à capacidade calorífica)
v	Relativo ao vapor
w	Relativo à água
0	Valor de referência
$y, y + \Delta y, x, x + \Delta x$	Relativo à posição $y, y + \Delta y, x, x + \Delta x$

Sobrescritos

BU	Relativo à condição de bulbo úmido
d	Relativo à função de ativação degrau
rel	Relativo ao cálculo de valores relativos
s	Relativo à função de ativação suave
sat	Relativo ao estado de saturação
SA	Relativo à saturação adiabática
Tot	Relativo ao cálculo de quantidades totais de entalpia (e não específicas)
*	Relativo à quantidades parametrizadas pelas funções degrau
*	Relativo às direções adimensionais
*	Valor exato (relativo ao método de BS)

Operadores

$\overline{(\cdot)}$	Operador média: (final + inicial)/2
$\Delta(\cdot)$	Operador diferença: final – inicial
$\Delta(\cdot)^{\text{rel}}$	Operador diferença relativa: final/inicial – 1

Letras gregas

α	Coefficiente de difusividade térmica [m^2/s]
λ	Calor de vaporização específico da água [kJ/kg]
ν	Viscosidade cinemática [m^2/s]
ρ	Massa específica do gás [kg/m^3]
ϕ	Umidade relativa do gás [-]

Números adimensionais

Sc	Número de Schmidt, equação (A.110)
Pr	Número de Prandtl, equação (A.111)
Le	Número de Lewis, equação (A.109)
Sh	Número de Sherwood, equação (A.113)
Nu	Número de Nusselt, equação (A.114)
Re	Número de Reynolds, equação (A.115)
St_h	Número de Stanton de calor, equação (A.117)
St_m	Número de Stanton de massa, equação (A.120)
Le_f	Fator de Lewis, equação (A.116)
Me	Número de Merkel, equação (G.1)
\mathfrak{R}	Razão entre as taxas mássicas de ar e água na entrada, equação (G.2)

Definições

\mathcal{A}	Parâmetro da EDO (A.42) [–]
a	Parâmetro do Fator de Ackermann, equações (A.52) e (A.157) [–]
$\Delta Y_g, \Delta H_w, Y_g^*, C_{p,g}^*, H_w^*, \alpha^*$	Parâmetros referentes à formulação unificada, equações (A.69)
θ_1, θ_2	Parâmetros da derivada da temperatura do líquido, equações (A.92)
Λ_1, Λ_2	Parâmetros da derivada da temperatura do gás, equações (A.97)
$\mathbb{F}(\xi), \xi$	Função de Bonsjakovic e seu argumento, equações (A.148)

RESUMO

Foi desenvolvido um modelo para representar uma torre de resfriamento operando em corrente cruzada a partir de balanços diferenciais de massa e energia. A utilização de uma função de ativação permitiu a unificação das formulações de gás saturado e insaturado, o que simplificou a forma final do sistema de equações resultantes e o seu processo de dedução. O modelo fez uso de expressões para a transferência de massa e energia que foram originadas a partir de analogias com o transporte de vapor e calor através de ar estagnado em um tubo vertical. O uso da expansão em séries de potência permitiu a criação de um sistema simplificado de equações, válido para baixos valores de umidade e baixas taxas de transferência de massa.

Vários métodos numéricos foram propostos para a solução do sistema de equações diferenciais resultantes, dentre os quais estão o método de Euler, do Ponto-médio, de Bulirsch-Stoer e o de Runge-Kutta de 4ª ordem. Tais métodos foram usados na resolução do sistema de equações segundo o esquema proposto, o qual requereu a combinação de dois desses métodos: um para a direção principal e outro para a direção secundária. Neste esquema, cada uma das direções (principal e secundária) esteve associada a uma das fases (ar ou água) e a solução das equações da direção principal sempre precedeu a solução daquelas da direção secundária.

As simulações foram realizadas através de scripts em Matlab® R2013b e foram utilizados os dados de BOUROUNI ET AL, GROBBELAAR ET AL E CORTINOVIS ET AL. Exceto para os dados fornecidos por BOUROUNI ET AL, os valores encontrados para os coeficientes de transferência de massa foram próximos daqueles reportados pelos autores. O valor reportado por BOUROUNI ET AL foi aproximadamente 45 vezes maior que o valor encontrado neste trabalho. Associa-se a tal discrepância o uso do método de Gauss-Seidel por tais autores, o qual é um método de convergência lenta e baixa precisão. Os dados de CORTINOVIS ET AL são mais bem representados pelo modelo proposto nesse trabalho que aquele proposto por tais autores. Tal conclusão advém da grande concordância entre os resultados teóricos e experimentais relacionados com a correlação levantada para o coeficiente de transferência de massa.

Utilizou-se os dados de BOUROUNI ET AL para a realização de comparações entre os diferentes métodos numéricos. A combinação mais rápida e precisa foi aquela em que o método do Ponto-médio e de Runge-Kutta foram utilizados para a resolução das direções principal e secundária (respectivamente). O gás foi escolhido como componente principal e o domínio foi dividido em cinco intervalos na direção x e seis na direção y. Utilizou-se a formulação exata do sistema de equações e a função de ativação degrau. O sistema de equações apresentado é particularmente desafiador devido à grande variação de temperaturas do líquido ao longo do domínio. A configuração escolhida, por ter conseguido atingir alta precisão para tal sistema, não deve encontrar grandes dificuldades em apresentar bons resultados na resolução do sistema de equações de outras torres de resfriamento.

Palavras-Chave: Torre de Resfriamento; Simulação; Modelagem; Corrente Cruzada.

ABSTRACT

A model was developed for the representation of a crossflow cooling tower through differential mass and energy balances. The use of activation functions allowed the unification of the saturated and insaturated gas formulations, thus enabling a simpler presentation of the system of equations and its development. The model used mass and energy transfer equations which were derived from analogies with the transport of steam and heat in a vertical tube through stagnant air. Power series expansions of the resulting equation system permitted the simplification of such system, one which is valid for low humidity values and low mass transfer rates.

Several numerical methods were proposed for the solution of the resulting differential equation system, among which are Euler's method, the Mid-point method, Bulirsch-Stoers' and the 4th order Runge-Kutta method. Such methods were used for solving the system of equations following the proposed scheme, which required the combination of two of these methods at a time: one for the main direction and another for the secondary direction. In this scheme each of the directions (main and secondary) were associated with one of the phases (air or water) and the solutions of the equations of the main direction always preceded those from the secondary direction.

The simulations were run in scripts in Matlab® R2013b with the data of BOUROUNI ET AL, GROBBELAAR ET AL and CORTINOVIS ET AL. Except for the data acquired from BOUROUNI ET AL, the values found for the mass transfer coefficient were close to those reported by the other authors. The value reported by BOUROUNI ET AL was approximately 45 times greater than the one found in this work. Such discrepancy is attributed to the use of the Gauss-Seidel method by such authors, which is a slow-convergence, low-precision method. The data from CORTINOVIS ET AL is better represented by the models proposed in this work than by the models proposed by such authors. Such conclusion is drawn from the close agreement between theoretical and experimental values of the mass transfer coefficient related to the correlation obtained.

The data of BOUROUNI ET AL was used for the comparison of different numerical methods. The fastest, most precise configuration was the one in which the Mid-point and Runge-Kutta methods was used in the main and secondary direction (respectively). The gas was chosen as the main component and the dominium was divided in five intervals in the x direction and six in the y direction. The exact formulation of the system of equations was used, together with the step activation function.

The presented system of equations is particularly challenging due to the great steepness of the liquid temperature profile through the dominium. After achieving a high precision for such a system, the chosen configuration shall not present difficulties in delivering good results when dealing with other cooling tower equation systems.

Key-words: Cooling Tower; Simulation; Modeling; Crossflow.

1. INTRODUÇÃO

Dentre as operações de transferência de massa entre gás e líquido a operação de umidificação com ar e água se destaca como uma das mais recorrentes em instalações industriais e comerciais [LIMA JUNIOR].

As operações de umidificação envolvem troca de massa e energia decorrente do contato entre um gás e um líquido no qual o gás é praticamente insolúvel. A substância transferida entre as fases é o constituinte da fase líquida, que pode vaporizar ou condensar. Apesar do nome que tais operações levam, seu propósito pode incluir não só a umidificação como também a desumidificação e resfriamento do gás, medição do seu conteúdo de vapor, e resfriamento ou aquecimento do líquido [TREYBAL , WEN ET AL].

No caso da umidificação em torres de resfriamento as duas fases são ar e água. Devido ao alto calor latente de condensação/evaporação da água tal sistema constitui uma operação particular de umidificação devido à considerável mudança de temperatura das fases durante o processo.

Torres de resfriamento são utilizadas em indústrias como equipamentos para controle de temperatura [MILOSAVLJEVIC ET AL]. Modelos como o de Merkel, o de Poppe e o e-NTU, foram desenvolvidos para considerar as mais diferentes configurações de torres [KLOPPERS]. Tais modelos propiciaram o surgimento de diversos outros, os quais utilizam as mais diversas considerações e configurações. Algo recorrente no desenvolvimento desses novos modelos é a falta de uma estrutura mais formal e sistemática no tratamento das equações. Dessa maneira o sistema de equações geralmente contém diferenciais de alguma das direções de orientação, do volume ou das variáveis do sistema, como em MILOSAVLJEVIC ET AL, WEN ET AL e BOUROUNI ET AL. Além disso, muitos autores utilizam a entalpia do ar como força motriz para a troca de calor entre o ar e água [KLOPPERS, HERNÁNDEZ-CALDERÓN ET AL, CORTINOVIS ET AL].

Apesar de tais modelos fornecerem boas respostas para os sistemas considerados, a obtenção do modelo via balanço diferencial de massa e energia permite uma comparação mais exata e clara da forma como estes modelos diferem, bem como facilita o entendimento da aplicação dos métodos de resolução numérica dos sistemas de equações diferenciais, recorrentes a todos os modelos.

2. OBJETIVOS

Neste trabalho será desenvolvido um modelo matemático para representar a operação de uma torre de resfriamento, isto é, de uma operação de umidificação visando o resfriamento de uma corrente de água. Para tanto será desenvolvido um balanço diferencial de massa e energia de modo a obter um conjunto de equações diferenciais parciais que serão resolvidas numericamente.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Serão apresentados neste capítulo os principais conceitos teóricos que serão utilizados neste trabalho.

3.1. Torres de Resfriamento

Torres de resfriamento são os equipamentos utilizados para contatar água e ar em operações de umidificação, refrigerando uma corrente de água que será recirculada e reutilizada na instalação em questão. Possuem um elemento de recheio, que pode ser constituído de plástico, metal, madeira, etc. que aumenta a área superficial interna do equipamento, aumentando a área disponível para a troca térmica e de massa. São classificadas de acordo com os seguintes critérios [TREYBAL]:

- Resfriamento evaporativo ou não-evaporativo;
- Processo de fornecimento de ar: fluxo atmosférico, fluxo natural, forçado, induzido;
- Sentido de escoamento entre as fases: co-corrente, contra-corrente, fluxo cruzado;
- Processo adiabático ou não-adiabático.

Para o resfriamento evaporativo o ar entra em contato direto com o líquido. Tal fato é vantajoso do ponto de vista da troca térmica, já que possibilita a evaporação do líquido, implicando em altas taxas de transporte de energia. Como um aspecto negativo de tal configuração tem-se a possibilidade de contaminação do líquido, cujo circuito é aberto para a atmosfera. Adicionalmente pode ocorrer o aumento da concentração de inertes, como sais dissolvidos, devido à adição de água de reposição. O aumento da concentração de sólidos dissolvidos pode vir a causar a formação de incrustações, que podem trazer problemas como a diminuição da eficiência da troca térmica. Geralmente o controle da concentração de sólidos é feito através de purga e reposição contínua de certa quantidade de líquido.

O processo de fornecimento do ar pode se dar de diversas maneiras, de acordo com alguns fatores de projeto. Torres de fluxo atmosférico, por exemplo, aproveitam a força de correntes de vento locais para reduzir gastos com o fornecimento de ar. Em usinas elétricas nucleares tem-se torres de fluxo natural de ar: a circulação é promovida pela diferença de densidade entre as colunas de fluido do lado de dentro e de fora da torre, provocando a circulação em um movimento de convecção entre as duas massas. Em ambos os casos não se gasta energia elétrica para promover a circulação do ar.

Para o caso de circulação artificial (com fluxo fornecido por ventiladores) tem-se fluxos do tipo forçado e do tipo induzido: forçado quando o ventilador está na entrada do equipamento, forçando o ar para dentro deste, e induzido quando o ventilador está na saída de ar, impulsionando o ar de dentro do equipamento para o lado de fora e induzindo assim a entrada do ar pela outra extremidade.

Para a classificação quanto ao sentido de escoamento das fases pode-se ter o ar e a água escoando em uma mesma direção e sentido (co-corrente), em sentidos contrários (contra-corrente), e em direções perpendiculares (fluxo cruzado).

Pode-se ainda haver uma terceira fase escoando dentro do equipamento, constituída de um fluido de processo que será refrigerado. Tal fase geralmente está confinada em uma serpentina, através da qual este fluido troca calor com a água de refrigeração. Este terceiro fluido também terá um sentido de escoamento em relação às duas outras fases podendo, por exemplo, estar em orientação co-corrente com a água de refrigeração e contra-corrente em relação ao fluxo de ar. Quando este terceiro fluido está presente diz-se que a operação é não-adiabática, pois o 'sistema original' (a água e o ar) troca calor com um fluido externo. Quando só água e ar escoam no equipamento diz-se que a operação é adiabática.

Figura 1, que é subdividida em seis imagens, ilustra alguns dos tipos de torres adiabáticas evaporativas, isto é, equipamentos em que só há dois fluidos: a água e o ar. Em 1-(a) tem-se uma torre de fluxo atmosférico com fluxo cruzado. Em 1-(b) tem-se uma torre de fluxo natural com fluxo contra-corrente. Em 1-(c) e 1-(d) os fluxos também são em contra-corrente, mas no primeiro caso tem-se um fluxo forçado de ar e no segundo caso o fluxo de ar é induzido. Em 1-(e) e 1-(f) tem-se fluxo induzidos de ar em corrente cruzada. A torre em 1-(f) possui ainda uma particularidade: parte do equipamento funciona através de um processo não evaporativo, com aletas que transferem calor para o ar de modo a evitar a formação de névoa, que pode ocorrer caso o ar entre com muita umidade dentro da torre. Em todos os casos tem-se um recheio, que aumenta a superfície de contato entre o ar e a água. Para a torre que será o objeto de estudo desse trabalho tem-se a seguinte configuração:

- Resfriamento evaporativo;
- Processo de fornecimento de ar: fluxo induzido;
- Sentido de escoamento entre as fases: fluxo cruzado;
- Processo adiabático.

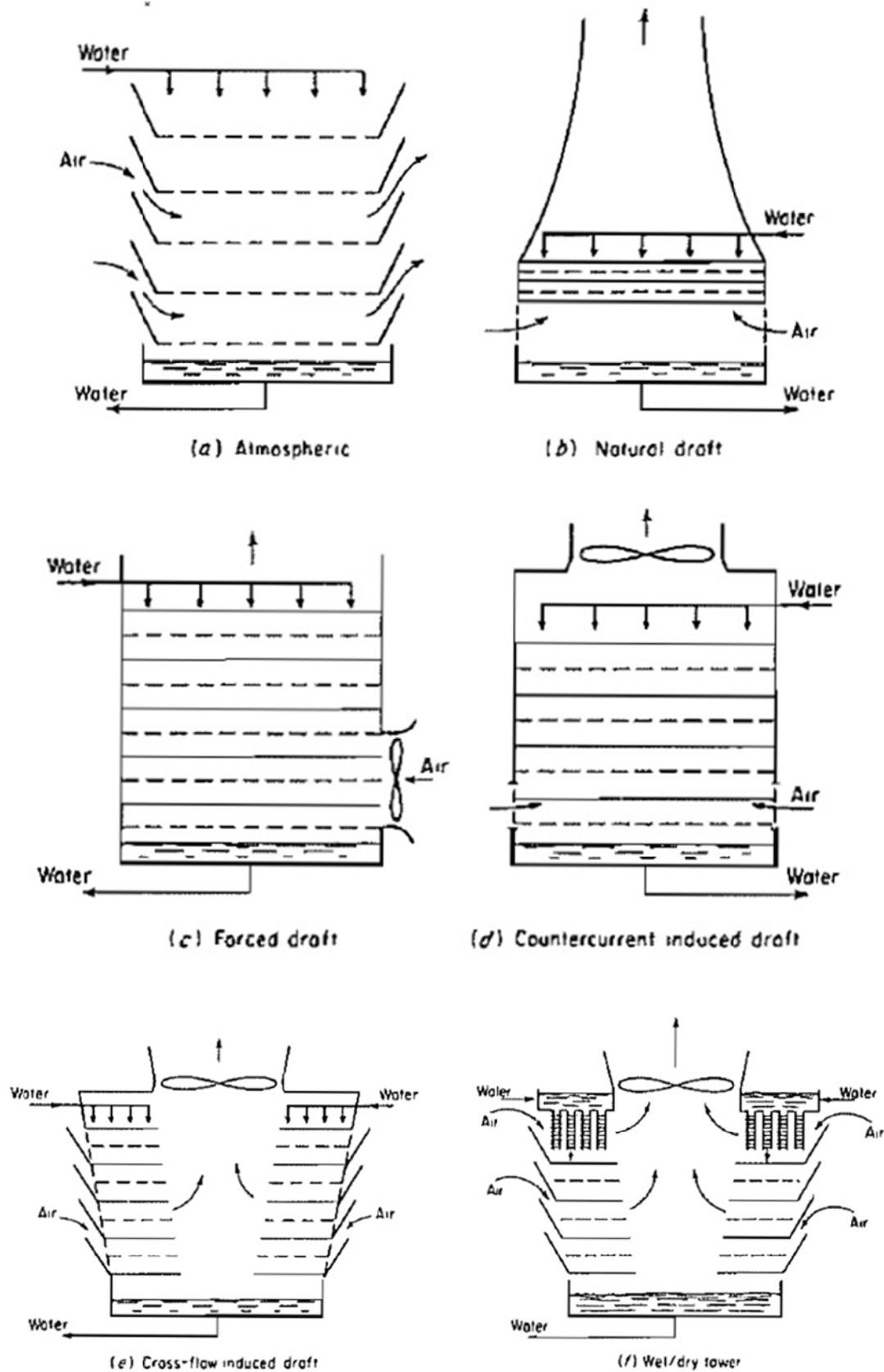


Figura 1: Exemplos de torres adiabáticas evaporativas, retirado de TREYBAL.

A Figura 2 representa um esquema do tipo de torre que será simulada neste trabalho. O ar escoa na horizontal mas entra somente por um dos lados da torre. Após percorrer o recheio o ar sai por um ventilador no topo do equipamento. A água é bombeada para um reservatório no topo da torre, entra no equipamento por orifícios no fundo desse reservatório, escorre pelo recheio e é coletada no fundo do equipamento.

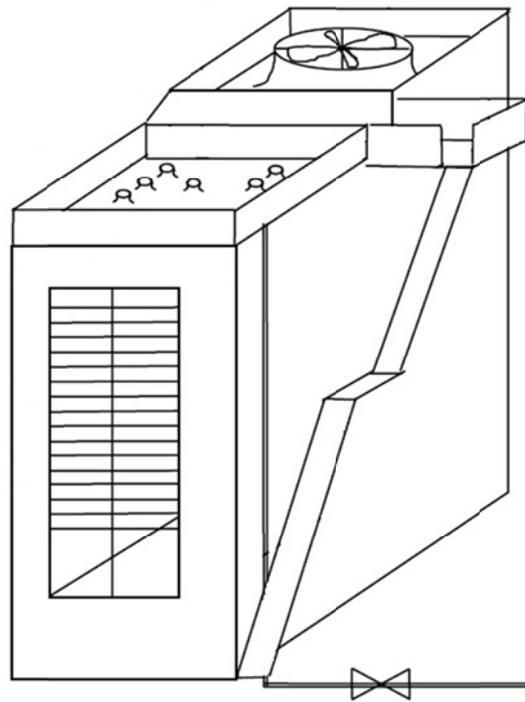


Figura 2: Esquema da torre a ser simulada, adaptado de BOUROUNI ET AL.

3.2. Princípio de Funcionamento e Perfis das Propriedades do Líquido e do Gás

Dentro da torre, a água distribui-se sobre o recheio formando filmes, jatos ou gotejos, dependendo do tipo de recheio/sistema de distribuição de água [KLOPPERS]. Em uma porção qualquer do recheio da torre tem-se então a fase líquida em contato com a fase gasosa, como representa a Figura 3. Na superfície da fase líquida há uma pequena interface gasosa rica em vapor, na qual a umidade (concentração de vapor) e a temperatura variam ao longo de seu comprimento. No início desta interface, a concentração de vapor é a de saturação (Y_1^{sat}) na temperatura do líquido (T_l), isto é, o vapor de água está em equilíbrio com a água da fase líquida. Ao fim dessa interface a concentração de vapor e a temperatura passam a ser aquelas da fase gasosa (Y_g, T_g).

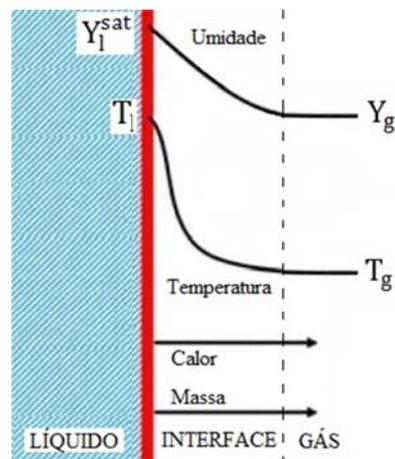


Figura 3: Arranjo esquemático da transferência de calor e massa, adaptado de OLIVEIRA.

Devido ao gradiente de concentração de vapor ao longo da interface ocorre troca de massa entre as fases. Troca de calor sensível ocorre devido ao gradiente de temperatura entre as fases. Além do calor sensível que é trocado, associado ao transporte de massa está o transporte do calor latente, necessário para que ocorra a evaporação da fase líquida. Tal calor latente é absorvido da fase líquida pelas moléculas de água que migram para a fase gasosa através da interface. Para o caso de uma torre de resfriamento, tanto a troca de massa quanto de energia geralmente ocorre no seguinte sentido: do seio da fase líquida para a interface e desta para o seio da fase gasosa.

Na operação deste equipamento tem-se ar escoando em um regime turbulento, o que gera padrões de movimentos turbilhonares e convectivos. Como a principal forma de troca de massa e energia entre as fases se dá através de convecção [CUSSLER], pode-se inferir que os mecanismos de ambos os processos de transferência sejam fortemente influenciados pelo perfil de velocidades. A importância de tal observação está no fato de que analogias podem ser estabelecidas entre processos de transferência de massa e calor para determinados mecanismos (convecção, no caso). Um exemplo disso está no fato de que os perfis de temperatura e concentração obtidos para o escoamento de ar sobre placas planas umedecidas possuem similaridade [TREYBAL]. O uso de tais analogias será elucidado em capítulos seguintes para estabelecer uma relação quantitativa entre os coeficientes de transferência de massa e de calor.

3.2.1. Perfis das propriedades do líquido e do gás ao longo do recheio

Imaginando uma divisão do recheio em linhas e 'colunas' de espessura uniforme propomos a seguinte divisão esquemática do recheio, representada na Figura 4 abaixo:

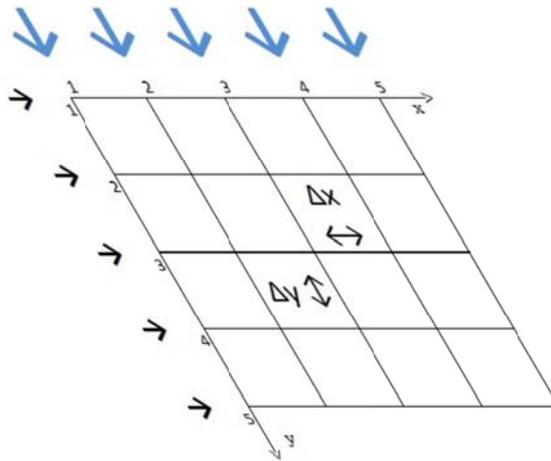


Figura 4: Divisão esquemática do recheio em linhas e colunas.

As setas pretas indicam o sentido de escoamento do ar (na direção do eixo x) e as setas azuis indicam o sentido de escoamento da água (na direção do eixo y). Observe que o recheio possui uma inclinação em relação a vertical (assim como na Figura 1-e). Além de o recheio possuir uma geometria 'inclinada', o líquido escoar em uma direção que não é exatamente vertical pois o ar empurra o líquido para dentro. Use-se o termo 'coluna' para nos referir às linhas inclinadas cuja direção é a mesma que a inclinação do recheio (e o eixo y).

A Figura 5 ilustra o comportamento das propriedades do ar e da água ao longo da torre. O tamanho das setas indica, qualitativamente, a mudança do valor das propriedades da respectiva fase, que para o ar são a temperatura e a umidade e para a água a temperatura e o fluxo mássico.

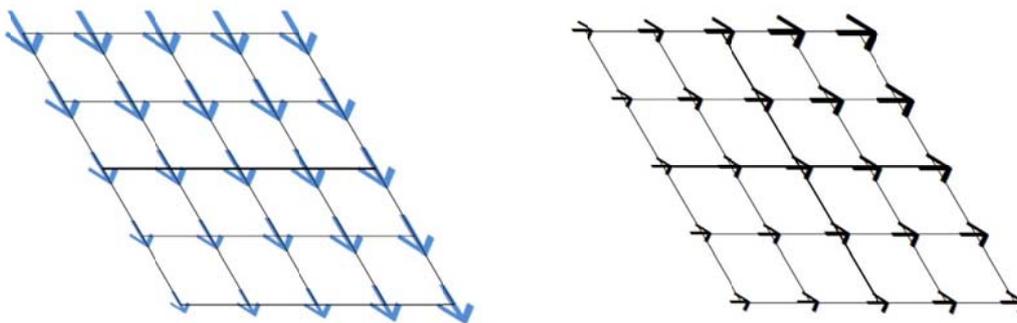


Figura 5: Representação dos perfis das propriedades do líquido (esquerda) e do gás (direita).

O ar escoar da esquerda para a direita, aumentando a sua umidade (Y_g) e temperatura (T_g) ao trocar calor e massa com o líquido que ele contata. O líquido, que flui de cima para baixo, tem o seu fluxo de massa (N_l) e sua temperatura (T_l) diminuídos ao ceder massa e energia para a corrente gasosa. As quatro variáveis mencionadas são as Variáveis de Interesse (VIs), cujos perfis ao longo do recheio serão levantados.

A Figura 5 ilustra o fato de que a variação das propriedades de uma fase será função do histórico de temperaturas e 'concentrações' (umidade ou fluxo mássico) da outra fase que esta primeira fase contata.

Portanto, em uma mesma coluna, o ar da linha mais inferior sempre contatará uma água mais fria que o ar da linha superior. Assim, o ar da linha superior tende a receber mais massa e calor e, portanto, a ter maior temperatura e umidade. Similarmente, em uma mesma linha, o líquido da 'coluna' mais a esquerda sempre contatará um gás mais seco e frio que o líquido de uma 'coluna' à direita. Assim, o líquido à esquerda sempre terá menor temperatura e fluxo mássico. Conclui-se, portanto, que as VIs são funções tanto da posição em x quanto em y .

Por último, vale lembrar que as propriedades de entrada do ar são as mesmas para todas as linhas. O mesmo vale para o líquido: o valor de entrada de suas propriedades é o mesmo para todas as 'colunas'.

4. METODOLOGIA

Nesse capítulo será desenvolvido o modelo para a representação da torre de resfriamento. O desenvolvimento das equações é apresentado no APÊNDICE A e somente as equações principais serão mostradas nas subseções a seguir. As equações serão resumidas nas tabelas da seção 4.9. Em alguns casos será feita uma distinção entre dois tipos de formulações de uma mesma equação: uma exata e a outra simplificada. As formulações serão distinguidas pelas letras E e S, respectivamente.

4.1. Considerações Adotadas na Construção do Modelo

Neste capítulo serão resumidas as considerações principais sobre o modelo:

- Neste trabalho será considerada uma torre de resfriamento operando em regime permanente. Assim, as VI possuem valores constantes e não variam ao longo do tempo;
- A pressão dentro do equipamento será considerada igual à pressão atmosférica local;
- Os gases são considerados ideais;
- As VI em sistemas com escoamento turbulento possuem uma componente temporal, um fator que é intrínseco às flutuações do campo de velocidades. Tais componentes temporais serão desconsideradas e somente os valores médios das VI serão considerados;
- O ar é considerado insolúvel na água e o seu fluxo mássico, portanto, é constante ao longo do equipamento;
- Como a maior parte da troca de massa e energia ocorre no recheio da torre, serão desconsideradas as trocas de massa e energia antes ou depois do recheio. Assim, os valores das VI de entrada e saída do recheio (fornecidos pelo modelo) serão considerados iguais aos valores de entrada e saída do equipamento (experimental);
- As seções transversais do recheio perpendiculares ao eixo z possuem um formato igual ao de um losango (ver Figura 4). Como o ar que entra empurra a água para dentro, a água escoar em uma direção que possui uma inclinação em relação a vertical. Para uma pequena variação do fluxo mássico de água ao longo do recheio pode-se supor que as velocidades do líquido no recheio são aproximadamente paralelas e que o líquido se mantém em uma mesma 'coluna' ao longo do equipamento. Será considerada, portanto, a representação de tal seção transversal como um retângulo, assim como representado na Figura 6;

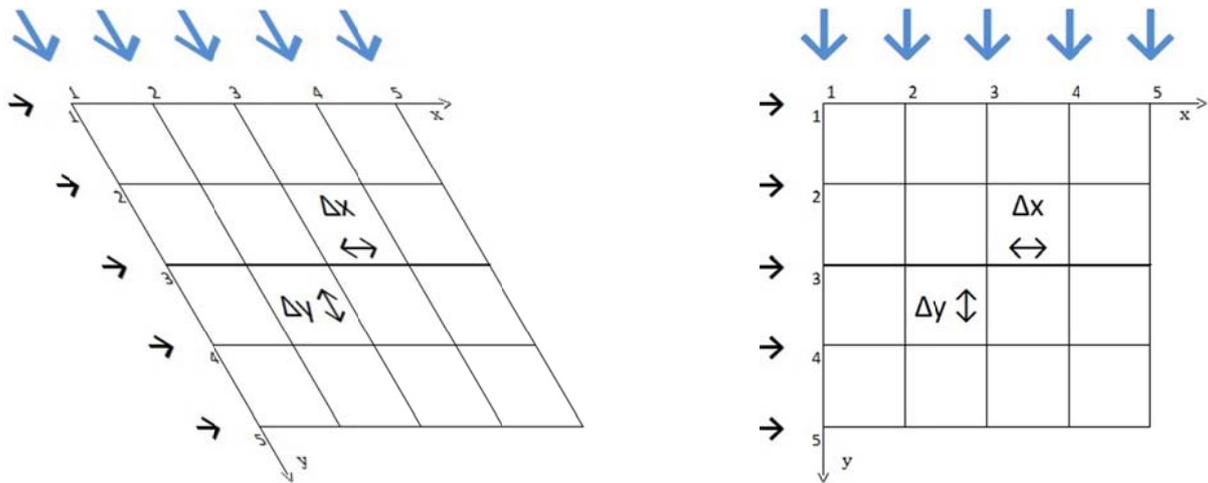


Figura 6: Arranjo esquemático do recheio real (esquerda) e da abstração do modelo (direita).

- No modelo considerado para o recheio o ar escoa exatamente na horizontal e a água na vertical.
- No recheio da torre de resfriamento, os valores das propriedades do ar e da água são constantes ao longo das faces de entrada. Assim, espera-se que haja uma simetria dos perfis das variáveis de interesse em relação ao eixo z . Portanto, tal eixo não será representado no equacionamento a ser desenvolvido neste trabalho e o domínio considerado é, portanto, um conjunto de pontos que formam um retângulo sobre o plano xy ;
- O modelo de duplo-filme [WHITMAN] prevê que tanto na fase gasosa quanto na fase líquida haverá interfaces (filmes), onde se desenvolvem gradientes de temperatura. O modelo de interface proposto desconsidera a resistência da fase líquida quanto à transferência de calor, o que implica em uma fase líquida com temperatura homogênea (em um determinado ponto da torre);
- Será visto nas seções futuras que a taxa de transferência de massa e calor dependem dos gradientes de concentração e temperatura ao longo da interface. Tais gradientes estão intimamente conectados aos valores de espessura da interface, os quais, por sua vez, estão diretamente ligados à velocidade de escoamento das fases. Como os fluxos mássicos não se alteram consideravelmente ao longo do escoamento pode-se considerar que as velocidades dos fluidos são constantes. Considera-se, portanto, que a espessura da interface também será constante;
- Como espessura da interface é constante para uma determinada vazão de entrada de água e de ar o valor do coeficiente de transferência de massa também será considerado constante;
- A interface é delgada: as mudanças de temperatura e concentração que ocorrem nela atingem o equilíbrio rapidamente;

- A área disponível para a troca de massa é igual à área disponível para a troca de calor;
- O recheio, apesar de ser uma região heterogênea no espaço (com filmes, jatos, gotejos, e a fase gasosa que o permeia) será considerado homogêneo, de modo a facilitar o tratamento e o entendimento com relação aos processos de transferência;
- São desconsiderados efeitos convectivos intrafase para a transferência de massa e de energia. Adota-se a simplificação de que o transporte convectivo de massa e energia ocorre somente entre o gás e o líquido, através da interface;
- Caso uma mistura gasosa apresente umidade maior que aquela de saturação a fase gasosa se encontrará saturada e a umidade excedente ao valor de saturação se encontrará sob a forma de gotículas de água;
- Exceto pela névoa formada devido à condensação de vapor na corrente gasosa saturada, será desconsiderada a perda de água devido ao arraste e carreamento de gotículas pela fase gasosa (*windage losses*).

4.2. Umidade Absoluta Mássica

Neste trabalho a umidade do ar será representada pela razão entre a quantidade de massa de vapor presente em uma massa unitária de ar seco

$$Y = \frac{\text{kg de vapor}}{\text{kg de ar seco}} \quad (1)$$

A quantidade acima é comumente chamada de umidade absoluta mássica ou ‘umidade em base seca’. Segundo o desenvolvimento do APÊNDICE A.1, relaciona-se tal quantidade com a fração molar de vapor através da equação (A.6):

$$Y = \begin{cases} y_w \mathcal{R} / (1 - y_w) ; & \text{(E)} \\ y_w \mathcal{R} . & \text{(S)} \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

É necessário conhecer a umidade absoluta mássica de saturação, Y^{sat} , tanto para o cálculo das entalpias da fase vapor quanto para o cálculo das taxas de transferência de massa e calor (como veremos nas seções adiante). Pela lei dos gases ideais relaciona-se a fração molar de vapor do gás na saturação com a pressão de saturação do vapor d’água, P_w^{sat} :

$$y_w^{\text{sat}} = P_w^{\text{sat}} / P . \quad (2)$$

A equação de Antoine pode ser utilizada para calcular P_w^{sat} em função da temperatura [VPC]:

$p_w^{\text{sat}} = \exp\left(A - \frac{B}{T + C}\right).$	A	B	C	(3)
	16,56989	3984,92	233,426	

Substituindo (2) em (A.6) obtém-se Y^{sat} :

$$Y^{\text{sat}} = \begin{cases} p_w^{\text{sat}} \mathcal{R} / (P - p_w^{\text{sat}}) ; & \text{(E)} \\ p_w^{\text{sat}} \mathcal{R} / P . & \text{(S)} \end{cases} \quad (4)$$

4.3. Entalpia

Nos modelos que descrevem o funcionamento de torres de resfriamento o balanço de energia é realizado desconsiderando-se os termos relativos às energias cinéticas, gravitacionais, elétricas, magnéticas, de perdas por fricção e etc. dos fluidos [referências 1 a 10]. São considerados somente termos relativos às energias de pressão e interna. Para facilitar a representação da transferência de energia dentro do sistema faz-se uso do potencial termodinâmico entalpia. A entalpia H de um sistema pode ser definida como:

$$H = U + PV, \quad (5)$$

em que U representa a energia interna do sistema e P e V são a pressão e volume do sistema, respectivamente. Para um sistema com um número constante de partículas (por exemplo, um sistema operando em regime permanente), uma transformação que leva o sistema de um estado inicial a um estado final provoca uma variação na entalpia do sistema:

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(PV). \quad (6)$$

A variação da energia interna do sistema é dada pela soma do calor e do trabalho trocados com o meio externo:

$$\Delta U = Q + W. \quad (7)$$

Para o caso da pressão ser constante tem-se

$$\Delta(PV) = P\Delta V = -W, \quad (8)$$

com a última igualdade em (8) valendo para o caso do trabalho decorrer apenas do esforço de expansão do sistema. Após substituição de (7) e (8) em (6) obtém-se:

$$\Delta H = Q. \quad (9)$$

A expressão acima nos diz que um sistema sofrendo uma transformação à pressão constante na qual o único tipo de trabalho realizado é o de expansão/contração, a variação da entalpia do sistema é igual ao calor trocado com a sua vizinhança.

4.3.1. Entalpia do ar, da água líquida, do vapor de água

Serão desenvolvidas expressões para calcular as entalpias específicas (isto é, por unidade de massa) do ar e da água (tanto líquida quanto vapor). Assim como a energia interna, o valor absoluto da entalpia de uma substância não pode ser calculado, devido à falta de um valor absoluto de referência. Porém, para um sistema que conserva a sua massa total, como é o caso dos sistemas em regime permanente, só nos interessa saber a variação entre os valores iniciais e finais da entalpia específica. Para tanto, pode-se utilizar a definição de C_p , a capacidade calorífica à pressão constante [SMITH ET AL]:

$$C_p \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p . \quad (10)$$

Para um intervalo pequeno de temperatura pode-se considerar constante a capacidade calorífica. Assim, integrando-se a expressão acima (à pressão constante e igual a P) entre T_i e T_f , obtém-se

$$H_f = H_i + C_p(T_f - T_i) . \quad (11)$$

A expressão acima nos dá a entalpia específica de uma substância pura à temperatura T_f em relação à H_i , isto é, a sua entalpia específica na temperatura T_i . A expressão acima é válida para uma substância que não sofre mudança de fase entre as temperaturas T_i e T_f . No caso de uma substância mudando da fase líquida para a fase vapor à temperatura constante e igual a T , a entalpia do vapor é dada por (9):

$$H_v = \lambda + H_l . \quad (12)$$

Nas equações acima, λ representa o calor específico de vaporização do líquido à temperatura T e os subscritos v e l fazem referência ao líquido e ao vapor.

Como dito anteriormente, não é necessário calcular valores absolutos de entalpia, somente valores de referência. Como água líquida e vapor são dois estados diferentes de uma mesma substância é necessário relacionar ambos os estados para que seja determinada a variação total da entalpia do sistema da torre de resfriamento. Para tanto será utilizado diagrama de entalpia mostrado na Figura 7.

O diagrama representa a entalpia de uma substância pura qualquer em função de sua temperatura e pressão. Pode-se perceber a existência de diferentes regiões no diagrama. As curvas de líquido saturado e vapor saturado englobam e delimitam a região bifásica, separando-a da região de líquido subresfriado e vapor superaquecido, respectivamente.

Líquido subresfriado e vapor superaquecido são estados em que uma variação de pressão ou temperatura não necessariamente causa uma mudança de fase. Na região bifásica uma mudança na pressão ou temperatura provoca mudança de fase, alterando a proporção líquido/vapor. À direita de T_{crit} , a temperatura crítica, tem-se a região de gás, em que a mistura não pode ser liquefeita pelo aumento da pressão.

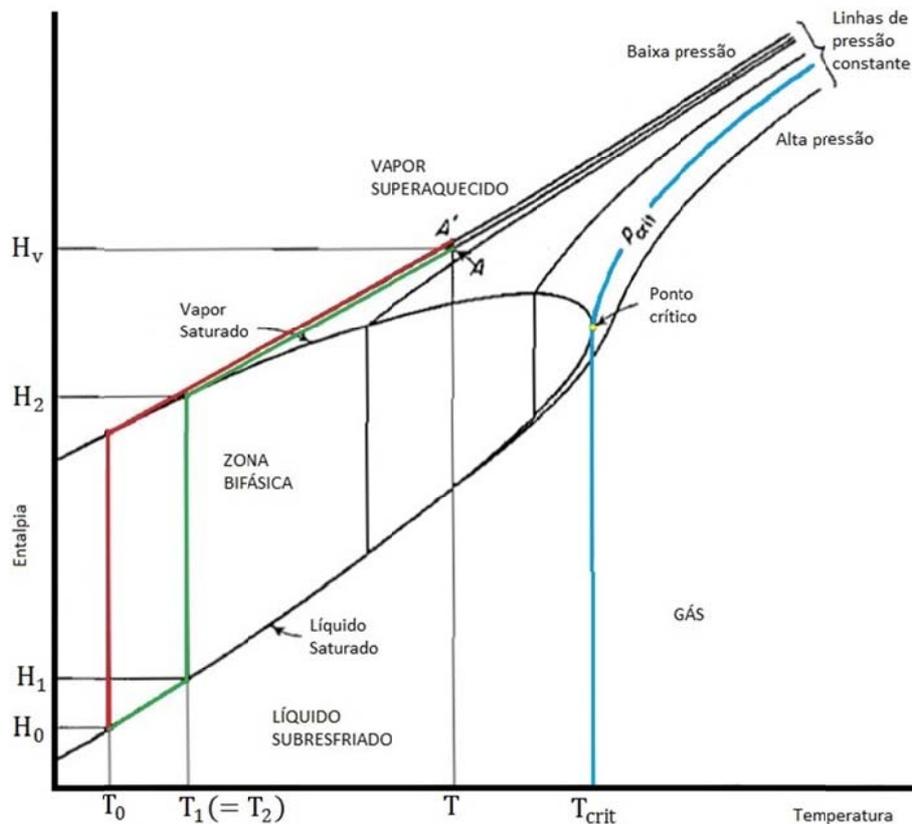


Figura 7: Diagrama de entalpia de uma substância pura, adaptado de TREYBAL.

O cálculo de H_v pode se dar de duas maneiras, como visto na Figura 7:

- Exato (ponto A, caminho inferior, de verde):

$$H_v = C_{p,v}(T - T_1) + \lambda_1 + C_{p,l}(T_1 - T_0) + H_{l,0} ; \quad (13)$$

- Aproximado (ponto A', caminho superior, de vermelho):

$$H_v = C_{p,v}(T - T_0) + \lambda_0 + H_{l,0} . \quad (14)$$

Para o caminho exato considera-se a entalpia adquirida pelo vapor à temperatura T quando os estados de líquido e vapor saturados ocorrerem à temperatura T_1 . Para o caminho aproximado consideramos que os estados saturados ocorrem à temperatura T_0 , a temperatura de referência. A pressão em ambos os casos é necessariamente diferente e como a entalpia é função da pressão, a entalpia em ambos os casos também será diferente.

Porém, para as pressões próximas a uma atmosfera (semelhantes às consideradas neste trabalho), a entalpia é uma função fraca da pressão [TREYBAL]. Pode-se, portanto, utilizar a equação (14) para o cálculo da entalpia do vapor sem que haja uma grande diferença entre os valores exato e aproximado. Semelhantemente à expressão acima, a entalpia do líquido e do ar à temperatura T são dadas por:

$$H_l = C_{P,l}(T - T_0) + H_{l,0} . \quad (15)$$

$$H_a = C_{P,a}(T - T_0) + H_{a,0} .$$

Tanto as temperaturas de referência quanto as entalpias de referência são parcelas que serão somadas e subtraídas nos balanços de massa e energia que se seguirão. Assim, tais valores podem ser omitidos das expressões das entalpias específicas para que as expressões sejam previamente simplificadas.

$$H_a = C_{P,a}T ;$$

$$H_l = C_{P,l}T ; \quad (16)$$

$$H_v = C_{P,v}T + \lambda .$$

De maneira semelhante, o subscrito 0 foi abandonado em prol de uma melhor apresentação das equações enquanto a temperatura de 0 °C foi escolhida como a temperatura de referência. As capacidades caloríficas das substâncias acima e o calor de vaporização da água, todos em função da temperatura, são dados pelos seguintes polinômios, encontrados no trabalho de KLOPPERS:

$$C_{P,a}, C_{P,l}, C_{P,v}, \lambda = \sum_{i=1}^{i=4} (a_i \cdot 10^{b_i})(\bar{T} + 273,15)^{c_i} . \quad (17)$$

i	C _{P,a}			C _{P,l}			C _{P,v}			λ		
	a _i	b _i	c _i	a _i	b _i	c _i	a _i	b _i	c _i	a _i	b _i	c _i
1	1,045356	0	0	8,15599	0	0	1,3605	0	0	3,4831814	3	0
2	-3,161783	-4	1	-2,80627	-2	1	2,31334	-3	1	-5,8627703	0	1
3	7,083814	-7	2	5,11283	-5	2	-2,46784	-13	2	1,2139568	-2	2
4	-2,705209	-10	3	-2,17582	-16	6	5,91332	-16	3	-1,40290431	-5	6

Em todos os casos a temperatura utilizada é a temperatura média entre os valores de entrada e saída do equipamento. Para C_{P,a} e C_{P,v} utiliza-se a temperatura média do gás e para C_{P,l} a temperatura média do líquido. Somente para λ será utilizada a temperatura de 0 °C, independente das temperaturas de entrada e saída do equipamento.

4.3.2. Entalpia de uma mistura gasosa

A entalpia específica de uma mistura gasosa ar-água é obtida a partir do desenvolvimento apresentado no APÊNDICE A.2 e é dada pela equação (A.10):

$$H_g = \begin{cases} C_{P,g}T_g + Y_g\lambda ; & (Y_g \leq Y_g^{sat}) \\ [C_{P,g}^{sat} + (Y_g - Y_g^{sat})C_{P,l}]T_g + Y_g^{sat}\lambda . & (Y_g > Y_g^{sat}) \end{cases} \quad (A.10)$$

Tais equações são encontradas em KLOPPERS e HERNÁNDEZ-CALDERÓN ET AL. No caso de haver gotículas de água na fase gasosa ($Y_g > Y_g^{sat}$) o termo ‘supersaturada’ é inexato e impróprio para designar a fase gasosa. Isso por que tal termo faz referência a um estado metaestável no qual a concentração de vapor é maior que o valor de saturação [BOSNJAKOVIC ET AL]. Como já mencionado anteriormente, no caso de haver gotículas de água no gás considera-se que a concentração de vapor nesta fase é igual à de saturação.

4.4. Fluxo Molar de Evaporação

O fluxo molar de evaporação é obtido a partir da analogia entre a difusão de vapor d’água em um tubo vertical através de ar estagnado. O desenvolvimento de tais equações é apresentado no APÊNDICE A.3 e o fluxo molar de evaporação é dado pela equação (A.34):

$$n_w = \begin{cases} \mathcal{K}C_g \ln\left(\frac{Y_l^{sat} + \mathcal{R}}{Y_g + \mathcal{R}}\right); & (E, Y_g \leq Y_g^{sat}) \\ \mathcal{K}C_g \ln\left(\frac{Y_l^{sat} + \mathcal{R}}{Y_g^{sat} + \mathcal{R}}\right); & (E, Y_g > Y_g^{sat}) \\ \mathcal{K}C_g (Y_l^{sat} - Y_g)/\mathcal{R}; & (S, Y_g \leq Y_g^{sat}) \\ \mathcal{K}C_g (Y_l^{sat} - Y_g^{sat})/\mathcal{R}; & (S, Y_g > Y_g^{sat}) \end{cases} \quad (A.34)$$

WEN ET AL, MILOSAVLJEVIC ET AL e KLOPPERS utilizam as equações simplificadas em (A.34) para descrever a taxa de evaporação. Porém, será visto que as equações da formulação exata são incorporadas na chamada ‘correção de Bosnjakovic’, a qual é utilizada por WEN ET AL, KLOPPERS e HERNÁNDEZ-CALDERÓN ET AL.

4.5. Fluxo de Calor

O fluxo de calor é obtido novamente a partir da analogia para um tubo vertical. O desenvolvimento de tais equações é apresentado no APÊNDICE

A.4 o fluxo molar de evaporação é dado pela equação (A.56):

$$q^* = \begin{cases} h\mathcal{F}(T_l - T_g); & (E) \\ h(T_l - T_g); & (S) \end{cases} \quad (A.56)$$

Para baixos valores de n_w a expressão obtida para a transferência de calor se resume à expressão clássica para a troca de calor por convecção [KREITH ET AL]. Tal situação é o caso limite em que a injeção de massa através da interface é desprezível e a troca de calor ocorre simplesmente através de convecção. A maioria dos autores utiliza a versão simplificada de (A.56), tais como MILOSAVLJEVIC ET AL, KLOPPERS e BOUROUNI ET AL. Porém, WEN ET AL utilizou o Fator de Ackermann (\mathcal{F}) e obteve muito bons resultados na sua simulação.

4.6. Unificação das Formulações: Funções de Ativação

As funções de ativação proporcionam a transição entre as formulações com e sem gotículas na fase gasosa. A partir do desenvolvimento no APÊNDICE A.5 obtém-se as duas funções de ativação, representadas pelas equações (A.65):

$$\mathcal{H}^* = \begin{cases} \mathcal{H}^d(Y_g - Y_g^{\text{sat}}) & \text{(função degrau de Heaviside)} \\ \mathcal{H}^s(Y_g - Y_g^{\text{sat}}) & \text{(aproximação contínua suave)} \end{cases} \quad (\text{A.65})$$

Utilizando-se as funções de ativação pode-se unificar as formulações de H_g , $\partial H_g / \partial x$ e n_w . A derivada da entalpia do gás com a posição x será necessária no balanço de energia e é calculada no APÊNDICE A.6. Segundo o exposto no apêndice A.7 as seguintes equações são obtidas:

$$H_g = C_{p,g}^* T_g + Y_g^* \lambda ; \quad (\text{A.70})$$

$$\frac{\partial H_g}{\partial x} = (C_{p,g}^* + \alpha^*) \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_w^* ; \quad (\text{A.71})$$

$$n_w = \begin{cases} \mathcal{K} C_g \ln \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) ; & (\text{E}) \\ \mathcal{K} C_g (Y_1^{\text{sat}} - Y_g^*) / \mathcal{R} . & (\text{S}) \end{cases} \quad (\text{A.72})$$

4.7. Balanços de Massa e de Energia

Os balanços de massa e de energia foram realizados em um volume de controle do recheio da torre, segundo o desenvolvimento no APÊNDICE A.8. A partir desses balanços as seguintes equações diferenciais foram obtidas,

$$\frac{\partial N_1}{\partial y^*} = -m \mathcal{Y} .$$

$$\frac{\partial Y_g}{\partial x^*} = \frac{m \mathcal{X}}{N_a} ;$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial y^*} = \mathcal{Y} \left(\frac{\mathcal{Q} + m \Theta_1}{\Theta_2} \right) ;$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial x^*} = \mathcal{X} \left(\frac{\mathcal{Q} + m \Lambda_1}{\Lambda_2} \right) .$$

(A.100)

4.8. Coeficientes de Transferência de Massa e de Calor

Como dito anteriormente na seção 3.2, os transportes de massa e energia entre as fases compartilham do mesmo mecanismo fluidodinâmico (convecção) [CUSSLER]. Assim, é de se esperar que ambos fenômenos possuam um grau elevado de similaridade e que uma relação possa ser estabelecida entre os coeficientes

de massa e calor. Tal relação é grosseiramente representada pela equação (A.107), a qual é obtida através do desenvolvimento no APÊNDICE A.9:

$$\frac{h}{k_Y C_{P,g}} \approx 1, \quad (\text{A.107})$$

Assim como (A.107) é uma aproximação da relação entre h e k_Y , o lado esquerdo de (A.107) é uma forma simplificada do chamado “Fator de Lewis”, Le_f . Tal termo não deve ser confundido com o número de Lewis, Le , ambos os quais são classificados como grupos adimensionais (GAs). Tal classificação deve-se à ausência de unidades que os caracterizem: o valor de um GA independe do sistema de unidades utilizado. Considera-se agora a equação (A.152), cuja dedução é apresentada no APÊNDICE A.12:

$$\frac{h}{k'_Y C_{P,g}} = \frac{Le^{\frac{2}{3}}}{F(\xi)}. \quad (\text{A.152})$$

(A.152) é conhecida como a “Correção de Bosnjakovic para Le_f ”. Pode-se explicar a ‘correção’ acima pelo seguinte argumento: o cálculo exato do fluxo mássico de vapor através da interface é facilitado pois BOSNJAKOVIC ET AL apresentam um gráfico para o cálculo de $F(\xi)$. Nesse caso o fluxo mássico é calculado utilizando k'_Y em uma expressão semelhante à forma simplificada de (A.34).

$$MM_w n_w = \frac{MM_w \mathcal{K}' C_g}{\mathcal{R}} (Y_1^{\text{sat}} - Y_g^*) = k'_Y (Y_1^{\text{sat}} - Y_g^*). \quad (\text{A.144})$$

Como a expressão (A.34) já pode ser utilizada para considerar a influência da injeção de massa sobre n_w , a correção de Bosnjakovic não será considerada. Para a obtenção de uma relação exata entre h e k_Y recorre-se a (A.123), do APÊNDICE A.10:

$$\frac{h}{k_Y (C_{P,g}^* + \alpha^*)} \left(\frac{\mathcal{R} + Y_g^*}{\mathcal{R}} \right) = Le^{\frac{2}{3}}. \quad (\text{A.123})$$

O número de Lewis, Le , para o sistema ar-água é considerado constante e seu valor, segundo KLOPPERS, WEN ET AL e HERNÁNDEZ-CALDERÓN ET AL é

$$Le = 0,865. \quad (\text{18})$$

Observa-se que $0,865^{2/3} = 0,91 \approx 1$, o que está de acordo com (A.107).

4.8.1. Adequação das equações contendo os coeficientes de transferência

Em todas as fórmulas em que serão utilizados, k_Y e h sempre aparecem multiplicados por pela área superficial volumétrica, A . O valor de A é de difícil avaliação devido à forma irregular que a superfície de troca assume entre as duas fases. Assim, os produtos $(k_Y A)$ e (hA) são de maior interesse nosso que os

valores isolados de k_Y e h . As equações (A.123), (A.73) e o termo a da equação (A.52) são reescritos, segundo o desenvolvimento no APÊNDICE A.13 para evidenciar tais termos

$$(hA) = \begin{cases} (k_Y A) \text{Le}^{\frac{2}{3}} \frac{\mathcal{R}(C_{p,g}^* + \alpha^*)}{\mathcal{R} + Y_g^*}; & \text{(E)} \\ (k_Y A) \text{Le}^{\frac{2}{3}} C_{p,a}; & \text{(S)} \end{cases} \quad (\text{A.155})$$

$$m = \begin{cases} (k_Y A) \mathcal{R} \ln \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right); & \text{(E)} \\ (k_Y A) (Y_1^{\text{sat}} - Y_g^*). & \text{(S)} \end{cases} \quad (\text{A.156})$$

$$Q = \begin{cases} (hA) \mathcal{F} (T_1 - T_g); & \text{(E)} \\ (hA) (T_1 - T_g). & \text{(S)} \end{cases}$$

$$a = m C_{p,v} / (hA). \quad (\text{A.157})$$

4.9. Sistema de Equações Diferenciais e Método de Resolução

As derivadas espaciais das VI, que descrevem o funcionamento da torre de resfriamento, são resumidas na Tabela 1. Da Tabela 2 à Tabela 9 têm-se as equações auxiliares, algumas das quais são apresentadas somente no APÊNDICE A. Em todas as Tabelas a numeração das equações é dada da esquerda para a direita e de cima para baixo.

Tabela 1: Derivadas espaciais das VIs, equações (A.100).

$\frac{\partial N_1}{\partial y^*} = -m y,$	$\frac{\partial Y_g}{\partial x^*} = \frac{m \mathcal{X}}{N_a};$
$\frac{\partial T_1}{\partial y^*} = y \left(\frac{Q + m \Theta_1}{\Theta_2} \right),$	$\frac{\partial T_g}{\partial x^*} = \mathcal{X} \left(\frac{Q + m \Lambda_1}{\Lambda_2} \right).$

Tabela 2: Parâmetros para cálculo das derivadas espaciais, equações (A.92) e (A.97).

i	1	2
Θ_i	$C_{p,v} T_g + \lambda - C_{p,l} T_1$	$-N_1 C_{p,l}$
Λ_i	$\mathcal{H}^* \Delta H_w$	$N_a (C_{p,g}^* + \alpha^*)$

Tabela 3: Parâmetros para o cálculo dos termos da formulação unificada, equações (A.11) e (A.69).

$\Delta Y_g = Y_g - Y_g^{\text{sat}};$	$C_{p,g} = C_{p,a} + Y_g C_{p,v};$	$\Delta H_w = (C_{p,v} - C_{p,l})T_g + \lambda.$
$Y_g^* = Y_g - \mathcal{H}^* \Delta Y_g;$	$C_{p,g}^* = C_{p,g} - \mathcal{H}^* \Delta Y_g (C_{p,v} - C_{p,l});$	$\alpha^* = \mathcal{H}^* \Delta H_w \partial Y_g^{\text{sat}} / \partial T_g;$

Tabela 4: Funções de ativação, equações (A.65), (A.64) e (A.58).

$\mathcal{H}^* = \begin{cases} \mathcal{H}^d(\Delta Y_g) & \text{(função degrau de Heaviside)} \\ \mathcal{H}^s(\Delta Y_g) & \text{(aproximação contínua suave)} \end{cases}$	
$\mathcal{H}^d(\Delta Y_g) = \begin{cases} 0, & \Delta Y_g \leq 0; \\ 1, & \Delta Y_g > 0; \end{cases}$	$\mathcal{H}^d(\Delta Y_g) = \frac{1}{1 + \exp(K - b\Delta Y_g)}.$

Tabela 5: Coeficiente volumétrico de transferência de calor e taxas volumétricas de transferência de massa e calor, equações (A.155) e (A.156).

$(hA) = \begin{cases} (k_Y A) \text{Le}^{\frac{2}{3}} \frac{\mathcal{R}(C_{p,g}^* + \alpha^*)}{\mathcal{R} + Y_g^*}; & \text{(E)} \\ (k_Y A) \text{Le}^{\frac{2}{3}} C_{p,a}. & \text{(S)} \end{cases}$
$\dot{m} = \begin{cases} (k_Y A) \mathcal{R} \ln \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right); & \text{(E)} \\ (k_Y A) (Y_1^{\text{sat}} - Y_g^*); & \text{(S)} \end{cases}$
$\dot{Q} = \begin{cases} (hA) \mathcal{F} (T_1 - T_g); & \text{(E)} \\ (hA) (T_1 - T_g). & \text{(S)} \end{cases}$

Tabela 6: Equação de Antoine, equação (3).

$P_w^{\text{sat}} = \exp \left(A - \frac{B}{T + C} \right).$	A	B	C
	16,56989	3984,92	233,426

Tabela 7: Concentração absoluta mássica na saturação e sua derivada, equações (4) e (A.161).

$$Y^{\text{sat}} = \begin{cases} P_w^{\text{sat}} \mathcal{R} / (P - P_w^{\text{sat}}); & \text{(E)} \\ P_w^{\text{sat}} \mathcal{R} / P; & \text{(S)} \end{cases} \quad \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} = \begin{cases} B Y_g^{\text{sat}} (1 + Y_g^{\text{sat}} / \mathcal{R}) / (T_g + C)^2; & \text{(E)} \\ B Y_g^{\text{sat}} / (T_g + C)^2; & \text{(S)} \end{cases}$$

Tabela 8: Equações auxiliares (A.52), (A.157), (18) (A.4) e (A.63).

$$\mathcal{F} = \frac{a}{1 - \exp(-a)}; \quad a = \frac{m C_{p,v}}{(hA)}; \quad Le = 0,865; \quad \mathcal{R} = 0,622; \quad K = \ln 999.$$

Tabela 9: Polinômios de ajuste dos parâmetros termodinâmicos, equações (17).

$$C_{p,a}, C_{p,l}, C_{p,v}, \lambda = \sum_{i=1}^{i=4} (a_i \cdot 10^{b_i}) (\bar{T} + 273,15)^{c_i}.$$

i	C _{p,a}			C _{p,l}			C _{p,v}			λ		
	a _i	b _i	c _i	a _i	b _i	c _i	a _i	b _i	c _i	a _i	b _i	c _i
1	1,045356	0	0	8,15599	0	0	1,3605	0	0	3,4831814	3	0
2	-3,161783	-4	1	-2,80627	-2	1	2,31334	-3	1	-5,8627703	0	1
3	7,083814	-7	2	5,11283	-5	2	-2,46784	-13	2	1,2139568	-2	2
4	-2,705209	-10	3	-2,17582	-16	6	5,91332	-16	3	-1,40290431	-5	6

O problema da torre de resfriamento, o qual consiste obtenção dos perfis das VIs do sistema, não é completamente definido pelo sistema de equações acima. É necessário ainda ter conhecimento de outros parâmetros do sistema para a determinação de um caso específico, sendo que diferentes combinações de parâmetros podem ser utilizadas para tal fim.

Na Tabela 10 são apresentadas duas combinações típicas desses parâmetros. Ambas as combinações possuem todos os parâmetros apresentados, exceto aqueles indicados pelo números 6 – I e 6 – II, sendo cada um desses restrito a somente uma das combinações. Assim, no primeiro caso dispõe-se do valor da temperatura de saída do líquido, $T_{l,f}$, enquanto no segundo caso tal informação é substituída pelo valor do coeficiente de transferência de massa, $k_Y A$.

O sistema de equações, juntamente com tais parâmetros, compõe um problema bem definido, um caso específico. Pode-se prosseguir agora ao uso das técnicas de resoluções de sistemas de equações diferenciais para a obtenção dos perfis das VIs, as quais são apresentadas no APÊNDICE B. Observa-se, porém, que antes de se utilizar um método qualquer para a resolução do sistema de equações é necessário determinar as C_p (capacidades caloríficas médias), cujo cálculo requer conhecimento do valor da

temperatura média do gás e do líquido no equipamento. Tais valores médios são obtidos através da média aritmética entre os valores de entrada e saída das temperaturas de ambas as fases.

Tabela 10: Parâmetros necessários para resolução do sistema.

Nº	Parâmetro	Símbolo	Unidade
1	Pressão atmosférica	P	kPa
2	Temperatura e umidade de entrada do ar	$[T_{g,i} ; Y_{g,i}]$	$[^\circ\text{C} , -]$
3	Temperatura de entrada do líquido	$T_{l,i}$	$^\circ\text{C}$
4	Fluxo mássico de água e ar na entrada	$[N_{l,i} ; N_a]$	$\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$
5	Dimensões do recheio	$[X ; Y ; Z]$	m
6 – I	Temperatura de saída do líquido	$T_{l,f}$	$^\circ\text{C}$
6 – II	Coeficiente de transferência de massa	$k_Y A$	$\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$

No primeiro caso a temperatura média do líquido pode ser calculada pois são conhecidos $T_{l,i}$ e $T_{l,f}$. Por outro lado, $T_{g,f}$ é desconhecido e a temperatura média do gás não pode ser calculada. Apresenta-se ainda outra complicação: $k_Y A$ é desconhecido. No segundo caso a situação é semelhante: $k_Y A$ e $T_{l,i}$ são conhecidos mas não se sabe nada sobre $T_{l,f}$ e $T_{g,f}$. Portanto, em ambos os casos, apesar do problema estar definido, dois parâmetros necessários à resolução numérica do sistema são desconhecidos.

Para resolver tal situação a seguinte abordagem é adotada: ao início da solução do sistema de equações os dois parâmetros desconhecidos devem ser estimados. Calculam-se as C_p e prossegue-se à obtenção dos perfis das VIs (pelos métodos apresentados no APÊNDICE B). Uma vez obtidos tais perfis calculam-se os valores de saída das temperaturas de ambas as fases (segundo os métodos apresentados no APÊNDICE F). Tais valores de saída devem ser comparados com aqueles determinados inicialmente; caso haja concordância entre tais valores a solução obtida é aceita como a solução correta do problema proposto.

No primeiro caso $T_{l,f}$ é conhecido e deve-se estimar os valores de $T_{g,f}$ e $k_Y A$. No segundo caso $k_Y A$ é conhecido e deve-se estimar os valores de $T_{l,f}$ e $T_{g,f}$. Assim, em ambos os casos os valores de $T_{l,f}$ e $T_{g,f}$ são especificados ao início da solução do sistema de equações e processo iterativo de resolução difere somente nas variáveis que são ajustadas a cada nova estimativa.

Como as C_p variam muito suavemente com a temperatura das fases, uma primeira estimativa das temperaturas de saída pode ser obtida utilizando-se o valor das temperaturas de entrada. Como estimativa inicial para $k_Y A$ pode-se utilizar o valor de $1 \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$, que é um valor suficientemente próximo para todos os coeficientes encontrados nesse trabalho.

4.10. Resolução do Sistema de Equações e Parâmetros do Modelo

Para a resolução do sistema de equações e análise dos resultados foram utilizados os métodos numéricos descritos nos APÊNDICES B a G. Todos os cálculos foram realizados a partir de scripts em Matlab® R2013b em um computador com as seguintes especificações: processador Intel® Core™ i5 3330 de 3 GHz (4 cores), 8 Gb de memória RAM DDR3, Windows 7 (64 bits).

A maioria das simulações utilizou os dados do trabalho de BOUROUNI ET AL, cujo objetivo era a simulação do resfriamento de águas termais. Utilizou-se também os dados de GROBBELAAR ET AL e de CORTINOVIS ET AL para a comparação dos valores do coeficiente de transferência de massa em cada caso. Os dados são resumidos na Tabela 11.

Observa-se que, além das temperaturas de saída do líquido, $T_{l,f}$, todos os autores fornecem valores para o coeficiente de transferência de massa volumétrico, $k_Y A$. Essa 'redundância' permitirá a comparação dos valores encontrados para tal coeficiente, isto é, a comparação entre aqueles coeficientes encontrados neste trabalho e aqueles apresentados por tais autores. Somente GROBBELAAR ET AL forneceu valores de pressão atmosférica, de modo que a pressão padrão foi assumida para os outros autores.

Tabela 11: Dados de BOUROUNI ET AL, GROBBELAAR ET AL e CORTINOVIS ET AL.

Parâmetro	Unidade	BOUROUNI ET AL	GROBBELAAR ET AL	CORTINOVIS ET AL
P	kPa	101,325	100,9	101,325
$T_{g,i}$	°C	38	13,1	16,5
$Y_{g,i}$	–	0,00670	0,00683	0,00742
$[T_{l,i}; T_{l,f}]$	°C	[64 ; 34,7]	[34,0 ; 17,4]	[29,4 ; 25,4]
$[N_{l,i}; N_a]$	kg/(m ² · s)	[4,40 ; 3,90]	[1,43 ; 2,85]	[2,06 ; 1,29]
$[X, Y, Z]$	m	[5 ; 11,5 ; 5]	[1,5 ; 2 ; 2]	[0,6 ; 0,9 ; 0,9]
$k_Y A$	kg/(m ³ · s)	16,9	1,663	1,24

BOUROUNI ET AL utilizam o método iterativo de Gauss-Seidel para a resolução do sistema de equações. Segundo o modelo proposto por estes autores, $k_Y A = hA/C_{p,a}$. Assim, o valor de $k_Y A$ foi calculado a partir do valor fornecido pelo autor para o coeficiente de troca térmica, $hA = 17 \text{ kW/m}^3\text{K}$, e do valor de $C_{p,a}$ obtido para a temperatura inicial do gás. $N_{l,i}$ e N_a foram obtidos a partir da razão entre as taxas mássicas de entrada e as áreas transversais do recheio, A_x e A_y (perpendiculares aos eixos x e y, respectivamente):

$$\begin{aligned}
 N_{l,i} &= \dot{M}_{l,i}/A_y = \dot{M}_{l,i}/XZ ; \\
 N_a &= \dot{M}_a/A_x = \dot{M}_a/YZ .
 \end{aligned}
 \tag{19}$$

BOUROUNI ET AL utilizaram os seguintes valores de fluxos mássicos de entrada: $[\dot{M}_{l,i}; \dot{M}_a] = [110; 224]$ kg/s. A umidade de entrada foi calculada a partir da umidade relativa de entrada fornecida pelo autor, $\phi_i = 15,44\%$ em que

$$\phi = Y_g/Y_g^{\text{sat}}. \quad (20)$$

GROBBELAAR ET AL utiliza o método de e-NTU para a resolução do sistema de equações. Novamente os valores dos fluxos mássicos de cada componente foram obtidos a partir das vazões mássicas de entrada, $[\dot{M}_{l,i}; \dot{M}_a] = [4,3; 11,4]$ kg/s, e o coeficiente de transferência de massa foi calculado a partir do valor do número de Merkel, $Me = 2,32$ (definido na equação (G.1) do APÊNDICE G. A umidade de entrada foi calculada a partir da temperatura de bulbo úmido do gás de entrada, $T_{g,i}^{\text{BU}} = 10,5$ °C. Para tanto, considerou-se a aproximação da equivalência entre as temperaturas de saturação adiabática e bulbo úmido, a qual é apresentada no APÊNDICE A.9. Emprega-se, portanto, a equação (A.103).

CORTINOVIS ET AL utilizam um método de correlação para a resolução do sistema de equações. Os dados fornecidos por tais autores correspondem a diversos experimentos e foram utilizados para a determinação de uma correlação adimensional, assim como exposto no APÊNDICE G. Os dados relativos a cada experimento são informados na Tabela 12 abaixo:

Tabela 12: Dados de CORTINOVIS ET AL para a determinação da correlação adimensional.

Experimento	$T_{g,i}$ [°C]	$Y_{g,i}$ [-]	$[T_{l,i}; T_{l,f}]$ [°C]	$[N_{l,i}; N_a]$ [kg/(m ² · s)]
1	16,5	0,00742	[29,4 ; 25,4]	[2,06 ; 1,29]
2	19,6	0,00712	[28,9 ; 26,9]	[5,14 ; 1,29]
3	21,9	0,00623	[27,4 ; 23,1]	[2,06 ; 2,31]
4	17,3	0,00686	[25,8 ; 23,2]	[5,14 ; 2,31]
5	19,3	0,00832	[29,4 ; 27,0]	[3,60 ; 1,29]
6	21,3	0,01140	[29,0 ; 26,0]	[3,60 ; 2,31]
7	17,5	0,00679	[28,0 ; 23,4]	[2,06 ; 1,80]
8	21,3	0,0112	[29,7 ; 27,6]	[5,14 ; 1,80]
9	18,4	0,00670	[27,4 ; 24,5]	[3,60 ; 1,80]
10	16,8	0,00806	[27,7 ; 24,8]	[3,60 ; 1,80]
11	19,9	0,00742	[27,4 ; 24,6]	[3,60 ; 1,80]
12	18,9	0,00668	[27,7 ; 24,8]	[3,60 ; 1,80]

5. ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Neste capítulo serão apresentados e analisados os resultados obtidos neste trabalho. Primeiramente serão apresentados e discutidos os resultados obtidos no trabalho com relação à obtenção do modelo em si (sistema de equações). Em segundo lugar serão comparados os resultados obtidos neste trabalho com os obtidos por outros autores. Dentre tais resultados estão os valores dos coeficientes de transferência de massa em cada trabalho e a determinação de uma correlação adimensional para os dados de CORTINOVIS ET AL. Em terceiro lugar, os resultados obtidos para os diferentes métodos numéricos deste trabalho foram comparados entre si. Para a realização dessas simulações escolheu-se (arbitrariamente) os dados do trabalho de BOUROUNI ET AL. Por fim será levantada a melhor configuração para a resolução do sistema de equações, bem como os resultados que levam a esta conclusão.

O conjunto padrão de configurações para solucionar numericamente o sistema de equações será chamado de 'método base' e será determinado nos parágrafos a seguir. O método base é aquele que reúne as configurações que o tornam o mais preciso possível. Assim sendo, tal método foi o utilizado para a determinação dos coeficientes de transferência de massa a partir dos dados dos outros autores. Assim, os valores obtidos para k_{YA} com os dados de BOUROUNI ET AL no método base serão utilizados nas outras simulações para a comparação dos diferentes métodos deste trabalho. Dessa maneira pode-se averiguar o quão distante dos valores exatos estes resultados estão.

Dos resultados numéricos obtidos o mais preciso e exato é aquele no qual a direção principal foi resolvida pelo método BS e a direção secundária pelo método RK4 e utilizando a formulação exata. Esses serão os métodos numéricos do método base. Arbitrariamente escolheu-se $M = N = 10$ para ser o número de intervalos em cada direção para o método base, sendo M e N o número de intervalos na direção y^* e x^* , respectivamente.

Será visto na seção 5.3.4 que a escolha da função de ativação pode influenciar os resultados das soluções numéricas caso o gás se apresente próximo à condição de saturação ou torne-se saturado em algum ponto do recheio. Nesta mesma seção pode-se perceber que é imprescindível o uso da função de ativação suave no método base caso o gás apresente-se em condições de saturação.

Como a função de ativação degrau é fisicamente mais exata, optou-se por utiliza-la preferencialmente no método base. Dessa maneira, exceto no caso em que o gás apresenta saturação ao longo do recheio (dados de GROBBELAAR ET AL), a função suave não foi utilizada nas simulações do método base.

No caso em que a função de ativação suave foi utilizada para testar a sua influência na solução numérica do sistema de equações tal troca é explicitamente mencionada no texto.

5.1. Modelo

Primeiramente deve-se discutir as diferenças entre o processo de transferência entre as condições de gás saturado e insaturado.

Na situação típica (gás insaturado) a fase líquida doa calor latente para o vapor que migra e a sua temperatura é reduzida. O ar recebe o vapor d'água que migra entre as fases incorporando-o e aumentando a concentração deste componente na fase gasosa. Caso o gás torne-se saturado, o vapor que migra entre as fases se condensará sob a forma de gotículas, formando uma névoa. Nesse caso, além da transferência de calor por convecção, outro fator contribui para o aumento da temperatura da fase gasosa: a liberação de calor latente pelo vapor que condensa. Tal fato é confirmado pela análise da derivada da temperatura do gás em (A.100): caso o gás esteja insaturado $\Lambda_1 = 0$, e a influência da transferência de massa restringe-se apenas à injeção de massa na interface (Fator de Ackermann). Porém, para o gás saturado, Λ_1 fornece exatamente a diferença de entalpia entre vapor e líquido, indicando a condensação do vapor e corroborando a explicação dada anteriormente.

Na situação contrária (em que o vapor sai da fase gasosa saturada e chega à fase líquida) dois efeitos térmicos serão sentidos:

- O líquido presente sob a forma de gotículas na fase gasosa irá evaporar, removendo calor latente e diminuindo a temperatura desta fase;
- O vapor que condensa na fase líquida doa calor latente para essa fase, aumentando a sua temperatura.

Discutem-se agora as considerações utilizadas para se obter as expressões para as taxas de troca de massa e calor ao longo da torre. Para o sistema idealizado do tubo vertical, a consideração de regime permanente impõe que o fluxo mássico de vapor seja constante através da interface. Tal imposição, por sua vez, nos permite calcular um perfil de temperaturas para a interface através do balanço de entalpia. Tal perfil de temperaturas não foi utilizado no desenvolvimento do cálculo de n_w , o que significa que adota-se a seguinte hipótese: a variação de temperatura ao longo da interface (e ao longo do equipamento) é suficientemente pequena de modo que a concentração total do gás, C_g , possa ser considerada constante. Tal hipótese está alinhada com a consideração de que $k_Y = MM_w \mathcal{K} C_g / \mathcal{R}$ constante.

No caso dos balanços que levam à dedução das equações diferenciais é pertinente uma observação relativa ao Fator de Ackermann: tal termo é fundamental para que uma pequena inconsistência no balanço de energia seja evitada. Isso por que o vapor transferido entre as fases é sempre recebido ou doado à temperatura do gás, e não a uma temperatura média entre as fases. O calor transferido no caso exato (corrigido pelo Fator de Ackermann) leva em consideração a energia necessária para que o vapor que migra atinja a temperatura da outra fase. Dessa maneira o balanço de energia é exato e não há inconsistência.

Observa-se que a injeção de massa através da interface influencia tanto a troca de massa quanto a troca de calor. Tais influências são incorporadas no modelo exato, mas no caso de baixas taxas de evaporação e baixos valores de umidade a influência da injeção de massa se torna desprezível. Um processo de expansão em séries de potência e descarte dos termos de pouca influência nos permitiu criar uma versão simplificada do sistema de equações.

Por último, a análise da contribuição de BOSNJAKOVIC ET AL nos permitiu desenvolver uma relação entre h e k_Y utilizando, novamente, expressões do tipo exata e aproximada.

5.2. Comparação com os Resultados de outros Autores

A partir dos dados apresentados na Tabela 11 e utilizando-se o método base obtiveram-se os seguintes resultados, mostrados na Tabela 13. As duas primeiras colunas informam o valor encontrado para $(k_Y A)$ e a diferença relativa entre este valor e o valor fornecido pelos outros autores. As duas últimas colunas informam a massa de água evaporada por segundo e a variação percentual da massa de líquido entre as correntes de entrada e saída. Os valores na Tabela 12 abaixo podem ser obtidos utilizando tanto x quanto y para a direção principal, o que nos mostra que a precisão do método é independente de tal escolha.

Tabela 13: Resultados obtidos pelo método base.

Autor	$(k_Y A)$	$\Delta(k_Y A)^{rel}$	$Y_{g,f}$	$T_{g,f}$	$\Delta \dot{M}_l$	$\Delta \dot{M}_l^{rel}$
	[kg/(m ³ · s)]	[–]	[–]	[°C]	[kg/s]	[%]
BOUROUNI ET AL	0,366	+45,1	0,0303	40,72	–5,27	–4,79
GROBBELAAR ET AL	1,864	–0,11	0,0148	19,55	–0,09	–2,11
GROBBELAAR ET AL*	1,832	–0,09	0,0144	19,73	–0,09	–2,08
CORTINOVIS ET AL	1,008	+0,23	0,0132	20,24	–0,006	–0,54

Nos casos acima a escolha da função de ativação não influenciou o resultado obtido, exceto para os dados de GROBBELAAR ET AL. Para tais dados, a solução do sistema apresentou gás saturado em seu domínio e nesse caso o método base obrigatoriamente requer o uso da função de ativação suave, como foi dito no início do capítulo 5. A função de ativação degrau também foi testada na resolução do sistema determinado com tais dados (utilizando-se o método do PM) e o resultado é aquele indicado com um asterisco. Como dito anteriormente, o uso da função suave pode ter alguma influência na solução do sistema de equações. Como os resultados obtidos em ambos os casos são bem próximos, qualquer uma das soluções é satisfatória.

Observa-se uma boa concordância entre os valores de $k_Y A$ encontrados para todos os autores, exceto os primeiros: o valor reportado por BOUROUNI ET AL é aproximadamente 45 vezes maior que o valor encontrado. É possível que tal discrepância decorra dos diferentes métodos e modelos utilizados. Apesar

disso os valores encontrados para a variação da massa de água entre as correntes de entrada e saída encontrados para os dados de tal autor, de $-4,78\%$, está próximo do valor informado por BOUROUNI ET AL, de $-5,1\%$.

A Figura 8 abaixo apresenta os resultados obtidos neste trabalho e aqueles obtidos por BOUROUNI ET AL para as temperaturas do líquido e do gás ao longo de seções horizontais da torre. As linhas pontilhadas em cada gráfico correspondem aos valores de BOUROUNI ET AL enquanto as linhas cheias correspondem aos valores obtidos neste trabalho. Em cada gráfico as oito curvas (quatro para cada trabalho) representam as temperaturas das fases em seções horizontais da torre correspondentes aos valores de $y = [1,5; 4,5; 9,0; 11,5]$ m. As curvas que apresentam as maiores temperaturas correspondem aos menores valores de y , como esperado.

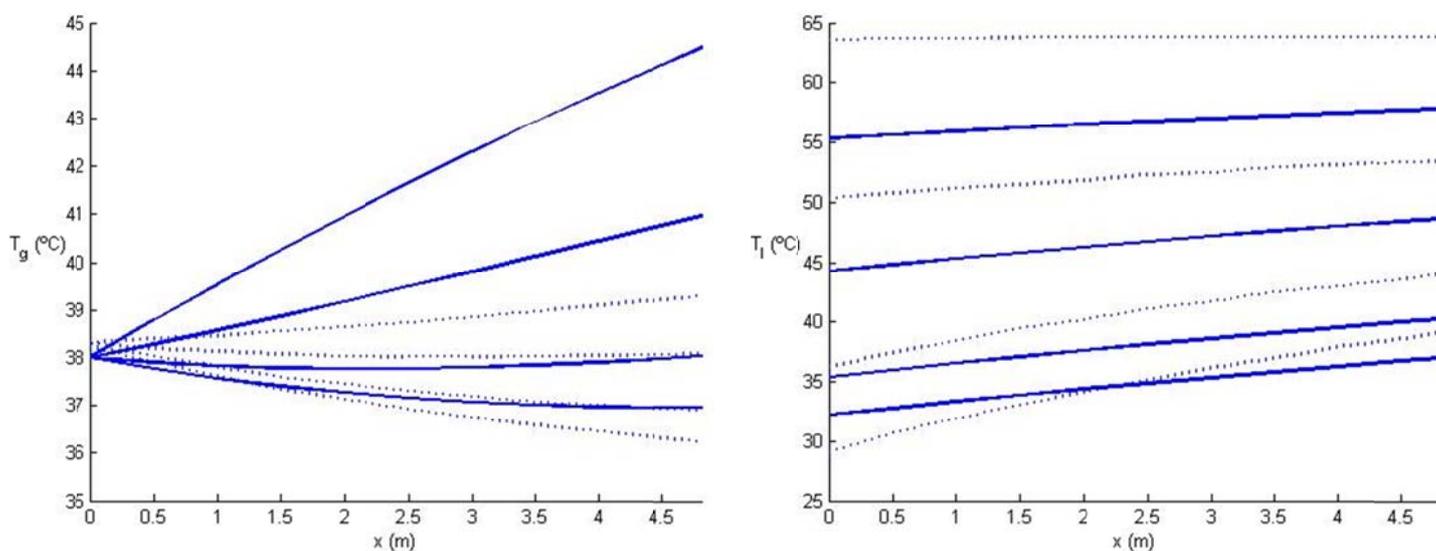


Figura 8: Comparativo dos resultados obtidos com os dados de BOUROUNI ET AL: temperatura da fase gasosa (esquerda) e da fase líquida (direita).

Observa-se uma grande discrepância entre os valores obtidos em cada trabalho e uma possível explicação para tal fato está na lenta velocidade de convergência do método de Gauss-Seidel. Seguindo-se este raciocínio conclui-se que o critério de término do processo iterativo escolhido por BOUROUNI ET AL não foi suficientemente rigoroso para a obtenção de resultados numericamente exatos.

Tal hipótese é corroborada pelo valor de $k_Y A$ apresentado por BOUROUNI ET AL: são necessários maiores valores deste parâmetro para que um método de convergência lenta retorne um valor de temperatura de saída do líquido que corresponda ao valor real. É também corroborada pelo fato de que, apesar de menores valores do coeficiente de transferência de massa, as temperaturas obtidas para as fases gasosa e líquida neste trabalho foram, respectivamente, maior e menor, o que indica maiores taxas de transferência de calor e massa em relação ao método de BOUROUNI ET AL. Caso o método de Gauss-Seidel houvesse apresentado resultados precisos, muito maior teria sido o calor trocado entre as fases para tal método.

Nesse caso, as relações entre os perfis de temperaturas encontrados por BOUROUNI ET AL e aqueles deste trabalho seriam invertidas em relação ao que é apresentado, o que não foi o caso.

Utilizando os dados de BOUROUNI ET AL os resíduos das EDPs e os desvios dos balanços de massa e energia foram calculados segundo os APÊNDICES E e F. Os baixos valores de tais resíduos e desvios indicam a que a resolução do sistema de equações foi satisfatória e novamente corroboram o valor encontrado para $k_Y A$ neste trabalho. Tais resultados são apresentados na Tabela 14 abaixo:

Tabela 14: Erro do método numérico para o método base.

Componente principal	Δf_{RMS}^{rel}				DB_{RMS}	
	Y_g	T_g	N_l	T_l	Massa	Energia
Gás	$4,45 \cdot 10^{-6}$	$2,49 \cdot 10^{-4}$	$6,29 \cdot 10^{-3}$	$5,48 \cdot 10^{-3}$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$1,71 \cdot 10^{-4}$
Líquido	$4,48 \cdot 10^{-6}$	$2,49 \cdot 10^{-4}$	$6,04 \cdot 10^{-3}$	$5,23 \cdot 10^{-3}$	$2,26 \cdot 10^{-5}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$

Apesar de o líquido apresentar menores erros, considerando o quão pequenos são tais valores pode-se dizer que praticamente não há diferença gerada pela escolha da direção principal. Tal afirmativa é corroborada pelos resultados da Tabela 13, os quais independem da escolha da orientação principal.

As linhas de contorno das propriedades da água e do ar ao longo do recheio para o método base são apresentadas abaixo na Figura 9 e Figura 10, respectivamente. Como previsto, as propriedades de ambas as fases seguem as tendências mostradas na Figura 5. Observa-se nas Figuras abaixo como a variação da temperatura da água é muito mais pronunciada ao longo da direção y que a temperatura do ar ao longo da direção x. Tal observação será importante tanto para a explicação das diferenças nos valores de tempo em cada simulação quanto para a explicação da precisão dos diferentes métodos apresentados no APÊNDICE B.

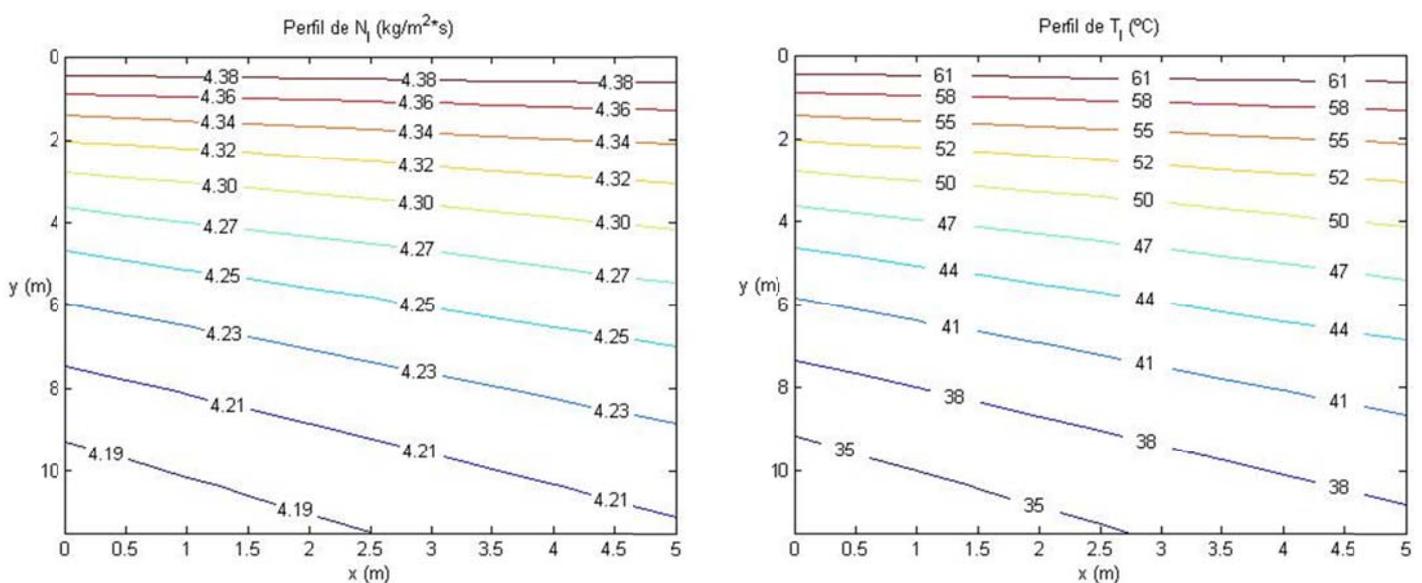


Figura 9: Linhas de contorno das propriedades da água para o método base.

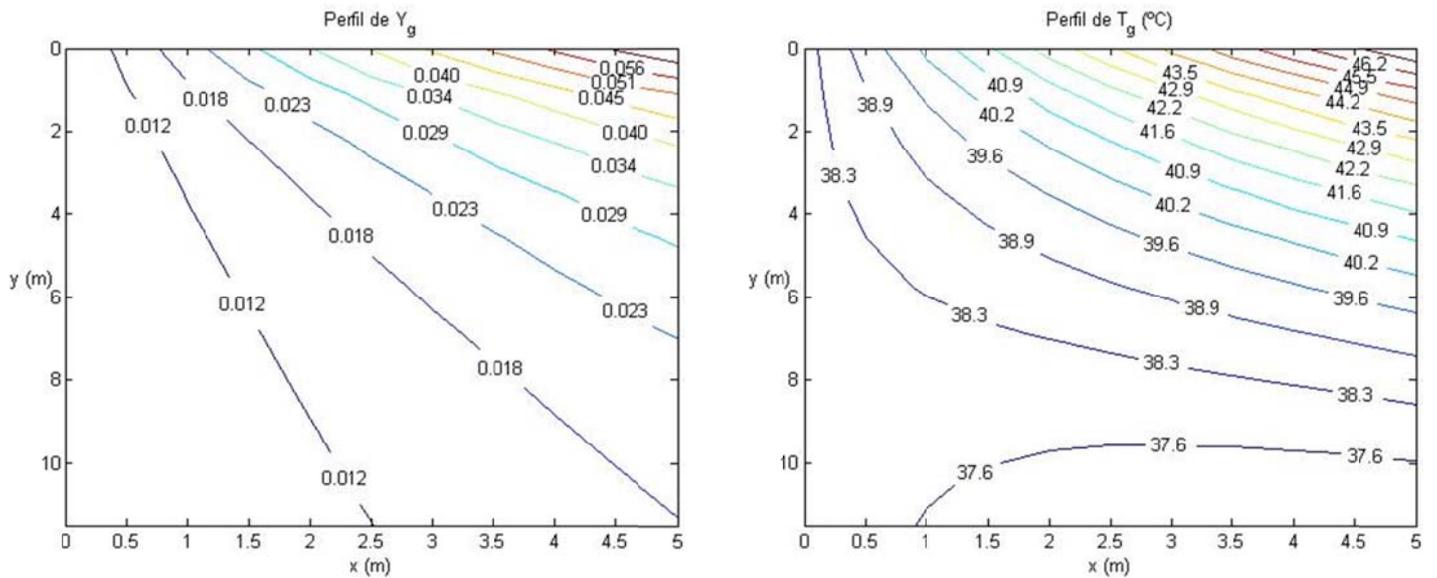


Figura 10: Linhas de contorno das propriedades do ar para o método base.

Observando-se as propriedades do ar pode-se observar uma peculiaridade para a fase gasosa que se encontra entre $y = 8$ m e $y = 12$ m. Nesta parte do recheio, o ar não se aquece e é razoavelmente umedecido. Tal fato provavelmente se deve à combinação de menores valores de temperatura da água nesta região em conjunto com baixos valores de umidade do ar que entra.

Tabela 15: Resultados dos dados de CORTINOVIS ET AL.

Experimento	$(k_Y A)^{exp}$ [kg/(m ³ · s)]	Me^{exp} [-]	\Re [-]	Me^{teor} [-]	$(k_Y A)^{teor}$ [kg/(m ³ · s)]
1	1,0074	0,4401	1,0646	0,4511	1,0326
2	1,3404	0,2347	2,6563	0,2333	1,3323
3	1,3312	0,5816	0,5945	0,6047	1,3841
4	2,2153	0,3879	1,4834	0,3524	2,0126
5	1,1052	0,2763	1,8605	0,2896	1,1585
6	1,8593	0,4648	1,0390	0,4583	1,8330
7	1,3246	0,5787	0,7630	0,5436	1,2443
8	1,6395	0,2871	1,9037	0,2839	1,6215
9	1,4696	0,3674	1,3333	0,3841	1,5365
10	1,4969	0,3742	1,3333	0,3841	1,5365
11	1,6038	0,4010	1,3333	0,3841	1,5365
12	1,4352	0,3588	1,3333	0,3841	1,5365

Finalmente, apresentam-se os resultados dos dados fornecidos por CORTINOVIS ET AL. As primeiras três colunas da Tabela 15 (acima) correspondem ao valor do coeficiente de transferência de massa obtido para cada experimento, o número de Merkel e a razão entre as taxas mássicas de entrada. Uma correlação adimensional foi obtida segundo o desenvolvimento do APÊNDICE G, a partir da qual calcularam-se Me^{teor} e $(k_Y A)^{teor}$. A equação (G.4) foi utilizada para tal correlação com $N = 2$ e o valor obtido para R^2 (coeficiente de correlação) foi de 0,96. Os valores obtidos para os coeficientes da equação (G.4) são apresentados na Tabela 16 abaixo.

Tabela 16: Coeficientes da correlação adimensional.

k	0	1	2
a_k	0,9647	-0,5230	0,0277
b_k	-	0,6760	2,3720

Na Figura 11 abaixo são apresentados o ajuste da correlação adimensional em função dos valores obtidos para o número de Merkel, equação (G.1). Os pontos azuis representam os valores obtidos para o número de Merkel em função da razão entre as taxas mássicas de entrada; a reta contínua representa a correlação obtida. Ao contrário do trabalho de CORTINOVIS ET AL, a correlação obtida neste trabalho é adimensional, o que facilita o cálculo de $k_Y A$ para diferentes sistemas de unidades. Ainda na mesma Figura são apresentados os valores de $(k_Y A)^{teor}$ comparados com $(k_Y A)^{exp}$. A dispersão dos dados, de $\pm 10\%$, é inferior àquela apresentada no trabalho de CORTINOVIS ET AL, igual a $\pm 15\%$.

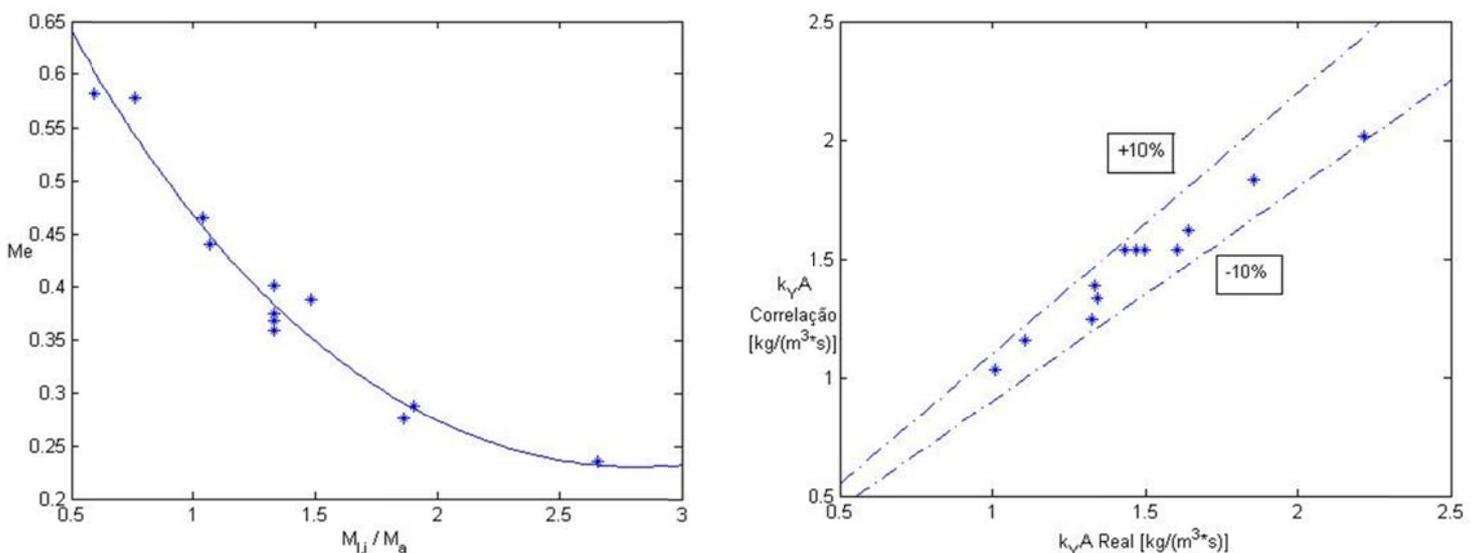


Figura 11: Correlação adimensional e dispersão dos valores de $k_Y A$; dados de CORTINOVIS ET AL.

5.3. Comparativo entre os Métodos Utilizados neste Trabalho

Os dados de BOUROUNI ET AL foram utilizados para a realização das simulações nesta seção. Os diferentes métodos apresentados no APÊNDICE B foram comparados entre si, bem como foi feita uma análise do tempo de execução e da convergência numérica dos métodos. Por último foram realizados testes com as funções de ativação.

5.3.1. Variações do método base: formulação simplificada e método de Euler na direção secundária

O método base foi utilizado em conjunto com a forma simplificada do sistema de equações. Os resultados são apresentados na Tabela 17 abaixo:

Tabela 17: Resultados obtidos usando a formulação simplificada.

$Y_{g,f}$	$T_{g,f}$	$T_{l,f}$	$\Delta \dot{M}_l$	$\Delta \dot{M}_l^{rel}$
[kg/kg]	[°C]	[°C]	[kg/s]	[%]
0,0295	40,84	35,59	-5,11	-4,64

Novamente os resultados independem da direção principal. Pode-se concluir que houve uma pequena redução na transferência de massa, o que acarretou em maiores temperaturas de saída do líquido e do gás, menores valores de umidade e menor perda de água líquida.

Os perfis das propriedades do líquido e do gás se assemelham àqueles mostrados nas Figuras 13 e 14 e, devido à semelhança dos valores de saída obtidos para ambas as formulações os perfis obtidos em ambos os casos são praticamente coincidentes. Tal fato torna redundante a apresentação destes gráficos. Os resíduos das EDPs e os desvios dos balanços de massa e energia, por outro lado, fornecem informações úteis. Tais valores foram calculados para a formulação simplificada e são apresentados na Tabela 18 abaixo:

Tabela 18: Erro do método numérico para a formulação simplificada.

Componente principal	Δf_{RMS}^{rel}				DB_{RMS}	
	Y_g	T_g	N_l	T_l	Massa	Energia
Gás	$3,08 \cdot 10^{-6}$	$1,79 \cdot 10^{-4}$	$3,09 \cdot 10^{-3}$	$2,54 \cdot 10^{-3}$	$7,82 \cdot 10^{-6}$	$5,52 \cdot 10^{-5}$
Líquido	$3,10 \cdot 10^{-6}$	$1,78 \cdot 10^{-4}$	$2,98 \cdot 10^{-3}$	$2,44 \cdot 10^{-3}$	$7,17 \cdot 10^{-6}$	$4,75 \cdot 10^{-5}$

Observa-se que quase todos os resíduos foram menores que aqueles apresentados para a formulação exata, exceto aquele para a temperatura do gás. Novamente os resíduos do líquido são, em geral, menores que os do gás.

Pode-se pensar que a formulação simplificada fornece um resultado fisicamente mais correto que a formulação exata, o que não é propriamente verdadeiro. O fato dos resíduos terem sido menores significa que o método numérico satisfaz o sistema simplificado de equações de maneira mais satisfatória que o

sistema exato. Para fins de engenharia pode-se considerar que ambos os resultados são satisfatórios e iguais devido à proximidade dos valores.

Por último apresentam-se os resultados obtidos utilizando o método base com o método de Euler na direção secundária. Novamente, os perfis das propriedades de cada fase retem, qualitativamente, os mesmos aspectos do método base original e, portanto, tais perfis não são mostrados. Os resultados são apresentados na Tabela 19 abaixo:

Tabela 19: Resultados obtidos usando o método de Euler na direção secundária.

Componente principal	$Y_{g,f}$	$T_{g,f}$	$T_{l,f}$	$\Delta\dot{M}_l$	$\Delta\dot{M}_l^{rel}$
	[kg/kg]	[°C]	[°C]	[kg/s]	[%]
Gás	0,0285	40,25	33,50	-5,52	-5,02
Líquido	0,0305	40,71	34,73	-5,27	-4,79

Observa-se que os resultados obtidos estão próximos dos valores 'exatos' (método base), sendo os valores do líquido visivelmente superiores. Os resultados do gás mostram que, apesar do gás sair com menor valor de umidade, a perda percentual de água foi maior (em relação ao método base) o que é logicamente impossível. Outro fato impossível é a diminuição da temperatura de ambas as fases. Estes fatos sugerem que a direção y é a melhor escolha de direção principal.

A justificativa para esta direção ter apresentado maior exatidão pode residir no fato de que, quando o gás é o componente principal, o método de Euler é utilizado na resolução das variáveis do líquido e vice-versa. Como mencionado anteriormente, a temperatura do líquido varia muito mais rapidamente que a temperatura do gás. Assim, quando o método de Euler é utilizado para resolver as VIs do líquido (gás é o componente principal), devido à grande variação das temperaturas do líquido, tal método perde eficiência. Apresentam-se na Tabela 20 abaixo os resíduos das EDPs e desvios dos balanços para tal caso:

Tabela 20: Erro do método numérico usando o método de Euler na direção secundária.

Componente principal	Δf_{RMS}^{rel}				DB_{RMS}	
	Y_g	T_g	N_l	T_l	Massa	Energia
Gás	$4,12 \cdot 10^{-6}$	$2,15 \cdot 10^{-4}$	$9,91 \cdot 10^{-2}$	$9,79 \cdot 10^{-2}$	$4,76 \cdot 10^{-3}$	$3,05 \cdot 10^{-2}$
Líquido	$9,40 \cdot 10^{-3}$	$4,14 \cdot 10^{-1}$	$5,91 \cdot 10^{-3}$	$5,11 \cdot 10^{-3}$	$3,95 \cdot 10^{-4}$	$2,63 \cdot 10^{-3}$

Observa-se que, para ambos os componentes principais, a fase secundária (na qual foi usado o método de Euler) apresenta uma piora significativa no valor dos resíduos (em comparação com a Tabela 14). O líquido apresenta os menores resíduos dos desvios dos balanços de massa e energia, o que corrobora o fato dos valores de saída do equipamento para tal fase terem se aproximado mais dos valores do método base (Tabela 13).

Utilizando-se a fase líquida como principal observa-se que o resíduo da temperatura do gás é particularmente alto, apesar de outros indicadores apontarem uma grande exatidão do método usando-se tal componente como o principal. A explicação para tal fato pode residir no método de cálculo das derivadas através de interpolação polinomial, o qual é utilizado para calcular os resíduos. Os pontos que apresentam os maiores desvios para a temperatura do gás são aqueles localizados em uma região na qual a temperatura desta fase varia muito lentamente ao longo da direção x. O método de interpolação fornece uma função de aproximação que é relativamente ondulada em comparação com a função original (gás) caso ela seja plana em uma determinada região. Tal fator, combinado com a baixa precisão do método de Euler, é provavelmente o responsável pelo alto valor do resíduo da temperatura do gás. Descartando-se os 10% maiores valores (absolutos) do resíduo da temperatura do gás, o valor do resíduo RMS dessa VI passa a ser de $9,81 \cdot 10^{-2}$. Tal valor é semelhante aos valores obtidos para os resíduos da fase líquida quando o gás é a fase principal.

5.3.2. Tempo de execução e convergência numérica

Nesta seção serão apresentados dados relativos ao tempo de execução das simulações apresentadas na seção anterior. Também serão apresentadas análises da convergência numérica do método base, isto é, a velocidade com que as soluções obtidas pelo método numérico se aproximam da solução correta a medida que são realizadas as operações de extrapolação.

Na Tabela 21 abaixo é apresentado o tempo de execução para as simulações realizadas na seção anterior. São distinguidas as diferentes configurações do método base, bem como o componente principal em cada caso. O tempo de execução para a água é sempre maior e a coluna 'Razão dos tempos' indica o quão maior, em relação ao tempo do gás esse tempo foi. Também são apresentadas o número de extrapolações necessárias em cada intervalo do domínio para as duas direções principais. O primeiro número corresponde ao primeiro intervalo do domínio (para a respectiva direção/componente principal), o segundo número para o segundo intervalo e assim por diante.

O número de extrapolações para o gás em todos os intervalos foi igual a 2 e o número total de extrapolações para esta fase foi sempre inferior ao da fase líquida. Dessa maneira, a coluna 'Razão de Extrap.' indica o quão maior (percentualmente) foi o total de operações de extrapolação para o líquido em relação ao número total da fase gás. Pode-se perceber, pelo APÊNDICE B, que um aumento do número de extrapolações significa um aumento (não linear) na quantidade de operações computacionais, o que é confirmado na Tabela 21, com o aumento (não linear) do tempo de execução de uma fase em relação à outra.

O tempo de execução é maior quando o líquido é o componente principal pois o método de BS utiliza a temperatura das fases para o controle do erro e, assim, decidir se são necessárias ou não mais extrapolações.

Tabela 21: Número de extrapolações e tempo de simulação pelo método base.

Método	Componente Principal	Extrapolações em cada intervalo	Total de Extrapolações	Tempo [s]	Razão de Extrap.	Razão dos tempos
Base	Ar	[2, ..., 2, ..., 2]	20	1,3	+55%	+62%
	Água	[5, 4, 4, 3, 3, 3, 3, 2, 2, 2]	31	2,1		
Formulação simplificada	Ar	[2, ..., 2, ..., 2]	20	1,2	+45%	+50%
	Água	[4, 4, 3, 3, 3, 3, 3, 2, 2, 2]	29	1,8		
Euler na direção secundária	Ar	[2, ..., 2, ..., 2]	20	0,19	+55%	+47%
	Água	[5, 4, 4, 3, 3, 3, 3, 2, 2, 2]	31	0,28		

Observando-se as Figuras 13 e 14 percebe-se como a temperatura do líquido varia mais rapidamente ao longo da sua direção principal (y) que a temperatura do gás (ao longo de x). Como o perfil de temperaturas do líquido é menos suave que o do gás, o controle do erro desta fase é numericamente mais desafiador e são necessárias mais operações de extrapolação para se atingir a tolerância pré-especificada de 10^{-6} °C. De acordo com o que foi mencionado no APÊNDICE B este tempo maior é esperado: o método de BS é tão mais eficiente quanto as funções (no caso, as temperaturas) forem suaves.

Para a formulação simplificada observa-se que o tempo de execução cai para ambas as direções principais, o que era esperado devido ao menor esforço computacional exigido por tal formulação. Além disso, observa-se que a redução no tempo foi maior para o líquido. A explicação para isso está no fato de que o método base tem maior facilidade para resolver com precisão o sistema de equações simplificado. Tal fato foi constatado na análise da Tabela 18, na qual se percebem menores valores dos resíduos e desvios para tal formulação. A resolução da fase líquida, por ser mais problemática, é mais beneficiada com esta maior facilidade de resolução, resultando em um menor número de extrapolações para esta fase. A comparação do número de extrapolações para cada intervalo do líquido (em relação ao método base) confirma esta análise: enquanto o número de extrapolações para o ar se mantém constante o número de extrapolações para a água cai, principalmente nos intervalos onde havia o maior número de extrapolações.

Por último, no caso da substituição do método de RK4 pelo método de Euler observa-se uma grande redução do tempo de simulação para ambos os componentes principais. Observa-se também que a razão entre os tempos de cada fase caiu, o que era esperado: o método de RK4 é tão mais utilizado quantas forem as operações de extrapolação. Como o número de extrapolações continuou igual ao método base (para ambos os componentes principais), aquele componente que tinha maior número de extrapolações (líquido) é o mais beneficiado com tal intercâmbio.

Na Tabela 22 apresenta-se o erro médio quadrático, e_{RMS} , ao avançarmos as propriedades da água da primeira para a segunda linha do domínio, isto é, utilizando a água como componente principal. Utilizam-se

os métodos do Ponto-médio e de BS para o cálculo do erro. A coluna 'Número de extrapolações' refere-se somente ao segundo método, que é o único que as utiliza. Em ambos os casos o erro cai com o aumento de subdivisões, porém o aumento do número de zeros do lado direito da vírgula (correspondente ao número de casas corretas na resposta) ocorre muito mais rapidamente no caso do método de BS. Foi escolhido um número arbitrário máximo de subdivisões do intervalo entre y_1 e y_2 igual a 30.

Tabela 22: Erro RMS para os métodos do Ponto-médio e Bulirsch-Stoer, método base.

Número de subdivisões do domínio	Número de extrapolações	e_{RMS}	
		Ponto-médio	Bulirsch-Stoer
2	0	—	—
4	1	0,009176041077932	0,012234721437244
6	2	0,001761789583844	0,000154457870054
8	3	0,000621627057479	0,000014636615897
10	4	0,000288619873900	0,000001198411772
12	5	0,000157020565477	0,000000131238752
14	6	0,000094760232613	0,000000010607484
16	7	0,000061536040459	0,000000001947999
18	8	0,000042203941625	0,000000000058880
20	9	0,000030195741948	0,000000000091319
22	10	0,000022345469027	0,000000000031811
24	11	0,000016997860605	0,000000000057753
26	12	0,000013229707396	0,000000000124676
28	13	0,000010498224383	0,000000000357097
30	14	0,000008469984234	0,000000001047933

Observa-se que o primeiro valor do erro é menor para o método sem extrapolação, o que em uma primeira análise levaria a intuição de que este método é mais eficiente para o caso de uma única operação de extrapolação. Porém, o erro também pode ser visto como uma medida do quanto se está aproximando da resposta correta ao passa em que aumentam-se o número de subdivisões do intervalo. Assim, o fato do primeiro erro ser maior para o método com extrapolação indica que ele se aproxima mais da resposta correta que o outro método. Observa-se que a operação de extrapolação é eficaz somente até a 8ª

repetição. A partir desse valor o erro passa a aumentar com o número de extrapolações, o que indica que os erros de arredondamento começam ser consideráveis.

A Figura 12 representa o erro RMS acumulado para ambos os métodos, isto é, o somatório dos valores do erro até o valor correspondente de extrapolação. São representados os resultados somente até o 8º valor de extrapolação devido à presença de erros de arredondamento após tal valor. Observa-se que o erro acumulado é sempre maior para o método de BS, indicando novamente que tal método se aproxima mais rapidamente da resposta correta devido ao uso da extrapolação. Observa-se ainda que, com 2 operações de extrapolação, os valores do erro acumulado deste método se aproximam rapidamente de um 'valor final' (próximo de 0,0124). No método sem extrapolação o erro acumulado cresce lentamente, indicando uma aproximação lenta do valor exato.

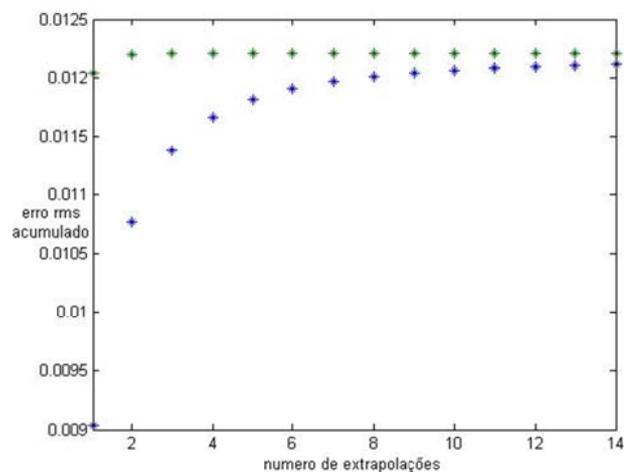


Figura 12: Erro RMS acumulado para os métodos do Ponto-médio e Bulirsch-Stoer.

5.3.3. Métodos de Euler e Ponto-médio

O método do PM, utilizado como proposto inicialmente no APÊNDICE B, gera uma instabilidade numérica na resolução do sistema, e a solução assim obtida para o sistema é insatisfatória. Este método foi adaptado para se assemelhar ao método de BS, porém sem a operação de extrapolação. Dessa maneira, cada intervalo da direção principal foi subdividido em dois subintervalos; o ponto intermediário foi obtido pelo método de Euler; o ponto do final do intervalo foi obtido pela aproximação centrada da derivada primeira. Ao final é utilizada a correção que elimina uma componente oscilatória do erro, assim como mostrado no APÊNDICE B.

A Tabela 23 abaixo resume os resultados encontrados utilizando-se o método de Euler e do PM para resolver a direção principal. Foram mantidas as outras configurações do método base. Os resultados utilizando o método de Euler são os mesmos que aqueles apresentados na Tabela 19, porém invertendo-se as direções principais. Tal resultado é esperado, pois, enquanto o método de Euler foi utilizado na direção secundária na Tabela 19, ele é utilizado na direção principal na Tabela 23 (acima).

Tabela 23: Resultados obtidos pelos métodos de Euler e do Ponto-médio.

Método	Componente principal	Tempo	$Y_{g,f}$	$T_{g,f}$	$T_{l,f}$	$\Delta\dot{M}_l$	$\Delta\dot{M}_l^{rel}$
		[s]	[kg/kg]	[°C]	[°C]	[kg/s]	[%]
Euler	Gás	0,11	0,0305	40,71	34,73	-5,27	-4,79
	Líquido	0,11	0,0286	40,25	33,50	-5,52	-5,02
Ponto-médio	Gás	0,30	0,0303	40,72	34,72	-5,27	-4,79
	Líquido	0,28	0,0303	40,72	34,74	-5,27	-4,79

Além disso, em ambas as Tabelas as outras direções foram resolvidas através de métodos de alta precisão numérica. O conjunto de tais fatores proporcionou a equivalência dos métodos, observadas as trocas entre as direções principais.

Os resultados do método do PM são praticamente iguais aos do método base e novamente o resultado é independente da direção principal. Observou-se uma grande redução do tempo de simulação para ambos os métodos quando comparados com o método base.

Na Tabela 24 apresentam-se os resíduos das EDPs e os desvios dos balanços para ambos os métodos. Como esperado, os resíduos e desvios obtidos utilizando o método de Euler são os mesmos (ou valores muito próximos) que aqueles apresentados na Tabela 20, porém invertendo-se as direções principais. Novamente observam-se grandes valores do resíduo da temperatura da fase gasosa quando o método de Euler é utilizado na solução das propriedades do gás. Tal fato pode ser explicado pelos mesmos argumentos apresentados na seção 5.3.1 para o método base com o método de Euler na direção secundária.

Tabela 24: Erro do método numérico para métodos de Euler e do Ponto-médio.

Método	Componente principal	Δf_{RMS}^{rel}				DB_{RMS}	
		Y_g	T_g	N_l	T_l	Massa	Energia
Euler	Gás	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$4,13 \cdot 10^{-1}$	$6,18 \cdot 10^{-3}$	$5,38 \cdot 10^{-3}$	$3,96 \cdot 10^{-4}$	$2,64 \cdot 10^{-3}$
	Líquido	$4,13 \cdot 10^{-6}$	$2,15 \cdot 10^{-4}$	$9,91 \cdot 10^{-2}$	$9,79 \cdot 10^{-2}$	$4,77 \cdot 10^{-3}$	$3,05 \cdot 10^{-2}$
Ponto-médio	Gás	$2,86 \cdot 10^{-5}$	$3,74 \cdot 10^{-3}$	$6,29 \cdot 10^{-3}$	$5,48 \cdot 10^{-3}$	$2,37 \cdot 10^{-5}$	$1,69 \cdot 10^{-4}$
	Líquido	$4,49 \cdot 10^{-6}$	$2,44 \cdot 10^{-4}$	$6,66 \cdot 10^{-3}$	$5,90 \cdot 10^{-3}$	$7,00 \cdot 10^{-5}$	$4,81 \cdot 10^{-4}$

No método do PM, os resíduos das direções secundárias são os mesmos (ou muito próximos) que aqueles do método base, na Tabela 14. Tal fato pode indicar que os resíduos secundários tornam-se independentes (ou muito pouco dependentes) do método da direção principal caso tal método seja de alta precisão e o método da direção secundária seja o mesmo (RK4, no caso).

Ainda para o método do PM, observa-se como os desvios dos balanços de massa e energia se aproximam daqueles da Tabela 14 para o caso do gás enquanto no caso do líquido estes valores são um pouco diferentes. Tal fato, mais uma vez, corrobora a ideia da influência da grande variação da temperatura do líquido ao longo de sua direção principal na solução numérica do sistema. Explica-se: dentre os métodos do PM e o de RK4, o segundo é o mais preciso. Dentre as fases líquida e gasosa, a primeira é a mais problemática, devido a grande variação de sua temperatura. Quando o gás é o componente principal, o método mais preciso é utilizado para a resolução das variáveis da fase mais problemática, o que corresponde a uma 'otimização' dos esforços computacionais. Nesse caso, a solução numérica do sistema é equivalente à solução do método base.

Na Tabela 25 abaixo são apresentados os resultados obtidos quando o método de Runge-Kutta (na direção secundária) é substituído pelo método de Euler:

Tabela 25: Resultados obtidos pelos métodos de Euler e do Ponto-médio, método de Euler na direção secundária.

Método	Componente principal	Tempo	$Y_{g,f}$	$T_{g,f}$	$T_{l,f}$	$\Delta\dot{M}_l$	$\Delta\dot{M}_l^{rel}$
		[s]	[kg/kg]	[°C]	[°C]	[kg/s]	[%]
Euler	-	0,023	0,0288	40,22	33,51	-5,52	-5,02
Ponto-médio	Gás	0,053	0,0286	40,25	33,50	-5,52	-5,02
	Líquido	0,049	0,0305	40,71	34,75	-5,27	-4,79

Observa-se que os resultados do método de Euler, neste caso, independem da escolha direção principal. Tal resultado é esperado, pois para ambas as escolhas as operações realizadas são as mesmas. Os resultados, portanto, não poderiam ser diferentes. Observa-se também que os resultados do método de Euler aproximam-se daqueles apresentados na Tabela 19 quando o gás é o componente principal, ou na Tabela 23, quando o líquido é o componente principal. Tal fato mais uma vez reforça a influência da grande variação da temperatura da fase líquida na solução numérica do sistema.

No caso do método do PM os resultados obtidos são praticamente os mesmos da Tabela 19. Os resultados obtidos para este método também são comparáveis aos da Tabela 23 para o método de Euler, mas com as fases principais invertidas. Novamente é reforçada a influência da grande variação da temperatura da fase líquida na solução numérica do sistema, bem como remete aos resultados obtidos quando o método de Euler é utilizado para a solução de uma das fases e os métodos de BS ou RK4 são utilizados para a solução da outra fase.

Novamente é observada uma grande redução do tempo de simulação para ambos os métodos, devido à substituição de um método computacionalmente custoso (RK4) por um de menor custo (Euler).

Na Tabela 26 abaixo apresentam-se os resultados para os resíduos das EDPs e os desvios dos balanços de massa e energia para o caso proposto acima. Assim como esperado para o método de Euler, os valores obtidos são independentes da direção principal. Novamente, tanto para o método de Euler quanto para o método do PM observam-se valores grandes para o resíduo da fase gás, causados pela baixa precisão deste método combinada com a baixa precisão dos valores das derivadas de tal fase quando obtidos por interpolação polinomial.

Tabela 26: Erro do método numérico para métodos de Euler e do Ponto-médio, método de Euler na direção secundária.

Método	Componente principal	Δf_{RMS}^{rel}				DB_{RMS}	
		Y_g	T_g	N_l	T_l	Massa	Energia
Euler	-	$8,07 \cdot 10^{-3}$	$6,41 \cdot 10^{-1}$	$9,86 \cdot 10^{-2}$	$9,73 \cdot 10^{-2}$	$4,48 \cdot 10^{-3}$	$2,86 \cdot 10^{-2}$
Ponto-médio	Gás	$3,45 \cdot 10^{-5}$	$6,20 \cdot 10^{-3}$	$9,91 \cdot 10^{-2}$	$9,79 \cdot 10^{-2}$	$4,76 \cdot 10^{-3}$	$3,04 \cdot 10^{-2}$
	Líquido	$9,42 \cdot 10^{-3}$	$3,97 \cdot 10^{-1}$	$6,52 \cdot 10^{-3}$	$5,77 \cdot 10^{-3}$	$4,44 \cdot 10^{-4}$	$2,97 \cdot 10^{-3}$

Novamente observa-se, no método do PM, a influência nos desvios do balanço de massa e energia quando o líquido, sendo a fase secundária, é resolvido pelo método de Euler. Tais efeitos, como já comentados, advêm do maior grau de dificuldade requerida na solução numérica da fase líquida.

5.3.4. Função de ativação e saturação da fase gasosa

O método de BS é um método iterativo, como pode-se perceber pelo exposto no APÊNDICE B.3. Caso ocorra a saturação da fase gasosa ao longo do recheio, o uso da função de ativação suave se faz necessário para que tal método apresente convergência numérica. Caso a função degrau seja utilizada, nos pontos de transição entre gás saturado e insaturado as derivadas sofrem uma alteração abrupta (descontínua) de seus valores. Nesse caso o erro RMS das temperaturas da fase principal apresentará valores crescentes a cada rodada de 'refinamento' dos resultados, o que implica a ineficácia do método, e a inexatidão dos valores encontrados: o método sofre divergência numérica.

Para ilustrar as complicações geradas no uso da função de ativação suave serão usados os mesmos dados de BOUROUNI ET AL mas com a umidade relativa inicial de 80%. O parâmetro de suavização da função de ativação, b , assumiu os seguintes valores: 100, 500, 1000 e 5000. Para os três primeiros valores os resultados obtidos pelo método base foram praticamente os mesmos; para o quarto valor o método de BS não consegue convergir numericamente. Em todos os casos que o método base convergiu havia 14 pontos nos quais ocorreu a saturação do gás. Porém, o valor máximo observado para a função de ativação (o qual ocorre para $b = 1000$) é de somente 0,0676. Como esta função age tomando-se uma média ponderada entre os valores correspondentes à situação de saturação e insaturação, o valor obtido corresponde à

utilização de aproximadamente 93% dos valores correspondentes à situação de insaturação. Tal ocorrido representa uma inverossimilhança da qual o modelo sofre quando tal função de ativação é utilizada.

Um comparativo dos resultados dos métodos de BS do PM e de Euler usando-se as diferentes funções de ativação é mostrado na Tabela 27 abaixo. A coluna ‘Saturação’ indica o percentual de pontos que apresentaram umidade acima daquela de saturação para o gás. O restante das configurações da simulação são aquelas do método base. Para simplificar a análise somente o líquido foi utilizado como componente principal e são mostrados os resultados somente para $b = 1000$.

Tabela 27: Resultados para o primeiro teste das funções de ativação.

Função de ativação	Método	$Y_{g,f}$	$T_{g,f}$	$T_{l,f}$	$\Delta\dot{M}_1$	$\Delta\dot{M}_1^{rel}$	Saturação [%]
		[kg/kg]	[°C]	[°C]	[kg/s]	[%]	
Aproximação Suave	Bulirsch-Stoer	0,0525	41,84	41,12	-3,98	-3,62	11,6
	Ponto-médio	0,0525	41,85	41,13	-3,98	-3,62	11,6
	Euler	0,0508	41,45	40,22	-4,15	-3,78	9,1
Degrau	Ponto-médio	0,0525	42,09	41,12	-3,97	-3,61	0
	Euler	0,0509	41,68	40,23	-4,17	-3,79	0

Observa-se como o método do PM apresenta dois pontos onde ocorre a saturação no domínio quando sua usa a função degrau. Porém, uma vez usando a função de ativação suave o gás passa a apresentar saturação em outros pontos.

Primeiramente, há de se observar que, devido à alta temperatura da água na entrada, o gás ao final das primeiras linhas do domínio possui valores de umidade que se aproximam da saturação (para a função degrau). Em segundo lugar, deve-se levar em consideração não só o ‘atraso’ que a função de ativação suave apresenta para fornecer os valores dos parâmetros correspondentes ao estado de gás saturado, mas também o fato de que tal função ‘adianta’ os valores correspondentes a esse estado (caso não haja saturação do gás). Dentre as mudanças que tal função de ativação ‘adianta’ está a maior inércia térmica da fase gasosa, devido ao maior conteúdo de água.

Esses dois fatores explicam o ocorrido: observa-se que a temperatura do gás nas primeiras linhas é menor ao se utilizar a função suave. Como os pontos dessas linhas já possuíam valores altos de umidade (no caso de se usar a função degrau), as primeiras linhas passam a apresentar pontos onde ocorre a saturação do gás.

O uso da função de ativação suave, apesar de ser fisicamente incorreto, retorna um resultado cujos valores são próximos daqueles obtidos quando se usa a função degrau. Um dos motivos para isso é que função suave somente apresenta inconsistência física em torno da região onde os teores de umidade se

aproximam daqueles da saturação, uma região relativamente pequena no domínio. O outro motivo é que, ao se utilizar a função suave, os pontos que apresentam saturação possuem valores de umidade que estão levemente acima da saturação. O argumento da função de ativação é justamente diferença entre tais valores e devido ao pequeno valor dessa diferença o valor retornado por tal função é próximo de zero. Um valor da função de ativação próximo de zero implica considerar insaturação do gás, condição esta que é a predominante no caso da função degrau. Assim, a consideração de (praticamente) insaturação do gás é o que faz com que os resultados para ambas as funções de ativação se assemelhem.

Como último teste das funções de ativação utilizou-se novamente os dados de BOUROUNI ET AL porém com umidade relativa de entrada igual a 90% e a temperatura de entrada do líquido igual a 95 °C. Para simplificar a análise somente o líquido foi utilizado como componente principal e são mostrados os resultados somente para $b = 1000$. Foi testado o método base, porém utilizando os três diferentes métodos na direção principal e variando-se o número de intervalos em cada direção. Utilizou-se também o método de Euler na direção secundária.

Tabela 28: Resultados para o segundo teste da função de ativação.

Função de ativação	Método na direção secundária	DBE_{RMS}	Tempo [s]	Saturação [%]	[M, N]
Degrau	Runge-Kutta	0,019	0,3	9,9	10
		0,028	2,3	15,1	30
		0,030	6,3	14,5	50
	Euler	0,011	0,3	18,2	[100,10]
		0,021	0,9	18,6	[100,30]
		0,023	1,5	18,4	[100,50]
		0,024	3,0	17,6	[100,100]
Suave	Runge-Kutta	0,017	0,3	38,8	10
		0,013	2,3	40,6	30
		0,016	6,3	40,4	50
	Euler	0,007	0,3	40,0	[100,10]
		0,013	0,9	40,7	[100,30]
		0,015	1,5	40,6	[100,50]
		0,016	3,0	40,5	[100,100]

Os resultados dos métodos de Euler e de BS na direção principal não foram apresentados, o primeiro devido a muito grandes valores de erro e o segundo por não conseguir apresentar convergência numérica. Os resultados foram resumidos na Tabela 28 acima. A coluna 'Saturação' indica o percentual de pontos do domínio que apresentou a fase gasosa saturada.

Utilizou-se o desvio do balanço de energia para a análise do erro, primeiramente por tal valor ter sido sempre superior àquele correspondente ao do balanço de massa e, portanto, mais representativo da precisão do método. Em segundo lugar, os resíduos das derivadas calculados pelo método de interpolação polinomial apresentaram erros muito grandes. A causa disso é atribuída as diferentes características das derivadas espaciais quando calculados em situações distintas: através da formulação utilizada pelo método numérico tais derivadas são descontínuas; através do cálculo com interpolação polinomial a continuidade das derivadas é imposta. Dessa maneira, o cálculo das derivadas com interpolação polinomial fornece um valor inadequado que não pode ser utilizado para o cálculo do resíduo.

Apesar do método de interpolação também ser utilizado no cálculo dos desvios dos balanços de massa e energia, este método é utilizado em uma direção diferente daquela onde se tomam as derivadas espaciais em cada caso. Assim, a presença ou não de discontinuidades nas derivadas em nada afeta o uso deste método para o cálculo destes desvios.

Aparentemente o uso do método de Euler na direção secundária traz uma melhoria com relação ao método de RK4: observam-se menores valores de DBE_{RMS} , o que indica maior precisão. Além disso, observa-se que os valores do percentual de saturação para as diferentes divisões do domínio estão mais próximos, o que indica uma maior exatidão até mesmo para os resultados obtidos com uma menor divisão do domínio. Além disso, a redução do tempo de simulação é considerável quando $N > 10$.

Deve-se atentar para o fato de que o valor de DBE_{RMS} é uma estimativa do quão próximo do resultado exato está a solução encontrada para o sistema e que tal estimativa pode sofrer influência da partição do domínio, devido à distribuição dos valores obtidos. A medida que divide-se o domínio em intervalos cada vez menores, o parâmetro DBE_{RMS} tende para um determinado valor. A resposta assim obtida, excluindo-se os erros de arredondamento numérico, tende a se aproximar cada vez mais do resultado exato.

Assim como no primeiro teste das funções de ativação observou-se a variação do número de pontos saturados ao se trocar a função de ativação. Além dessa variação é esperado que os perfis das VIs sejam alterados, devido aos diferentes valores das derivadas espaciais que são calculados em cada caso. Para se traçar um comparativo entre os métodos foram calculados os valores de saída para ambas as funções de ativação. Utilizou-se o método do PM na direção principal, o método de Euler na direção secundária e $M, N = 100$. Os resultados são exibidos na Tabela 29 abaixo:

Tabela 29: Valores de saída para o segundo teste da função de ativação.

Função de ativação	$Y_{g,f}$	$T_{g,f}$	$T_{l,f}$	$\Delta\dot{M}_l$	$\Delta\dot{M}_l^{rel}$
	[kg/kg]	[°C]	[°C]	[kg/s]	[%]
Degrau	0,0746	47,36	43,83	-7,96	-7,23
Suave	0,0786	47,32	44,43	-8,85	-8,04

Apesar dos valores de saída da temperatura do gás se aproximarem, os outros valores estão relativamente distantes, o que indica uma diferença entre os métodos. Como a única diferença nas configurações dos métodos é a função de ativação, atribui-se a tais funções a causa da mudança observada na Tabela 29 acima. Conclui-se portanto, que o uso da função de ativação suave para situações extremas, nas quais uma grande porção do recheio encontrar-se-á sob estado de saturação, é prejudicial para a exatidão física do modelo.

5.4. Otimização da Resolução Numérica do Sistema

Apresentar-se-á uma discussão para justificar a escolha do melhor conjunto de configurações para a resolução numérica do sistema formado utilizando os dados de BOUROUNI ET AL. O critério utilizado para a determinação da melhor configuração são os valores de saída do sistema: a solução ótima deve apresentar valores próximos àqueles da Tabela 13, porém no menor tempo possível.

O método de Euler apresentou maior inexatidão nos resultados e o método de BS possui precisão comparável à do PM, mas é consideravelmente mais lento. Assim, dentre os métodos utilizados na direção principal o método do PM foi o que apresentou a melhor combinação de precisão com tempo de simulação e é o método de escolha para a resolução das VIs na direção principal.

O sistema de equações simplificado, além não representar a influência da injeção de massa nos mecanismos de transferência de massa e calor, não traz uma redução significativa no tempo de simulação. Portanto, o sistema exato será utilizado. Similarmente, devido à maior exatidão física, a função degrau foi escolhida como função de ativação. O gás foi escolhido como a direção principal pois dessa maneira o método de Runge-Kutta (mais preciso) é utilizado na resolução das propriedades da fase líquida (mais crítica).

Utilizando-se a configuração descrita foram feitos testes com os métodos da direção secundária para descobrir qual deles formaria a melhor configuração. Os resultados são mostrados na Tabela 30 abaixo. Para a confecção de tal Tabela diversos valores foram testados para a subdivisão das diferentes direções do domínio. Ao final de cada teste os resultados obtidos foram comparados àqueles da Tabela 13 (colunas 2 a 5) e calculou-se o desvio percentual relativo para cada um dos valores. Destes desvios percentuais calculou-se o valor RMS, de maneira semelhante ao erro RMS apresentado no APÊNDICE B.3 para o método de BS. O tempo calculado foi aquele em relação ao tempo gasto pelo método base.

Tabela 30: Resultados da otimização da resolução numérica do sistema.

Método na direção secundária	Desvio RMS	Tempo Relativo [%]	[M, N]
Euler	$2 \cdot 10^{-3}$	50	[200,10]
Runge-Kutta	$2 \cdot 10^{-6}$	23,8	[10,10]
	$2 \cdot 10^{-3}$	13,8	[5,10]
	$2 \cdot 10^{-3}$	7,3	[5,5]
	$8 \cdot 10^{-4}$	8,3	[6,5]
	$4 \cdot 10^{-4}$	9,2	[7,5]
	$7 \cdot 10^{-6}$	12,2	[10,5]

O método de Euler (na direção secundária) necessita de um número muito grande de subdivisões para fornecer resultados próximos àqueles obtidos pelo método de RK4. Tal fato implica um tempo de simulação muito grande, o levou ao abandono de tal método.

O método de RK4 utilizando $[M, N] = [6,5]$ apresentou um tempo de simulação igual a 0,10 s, o menor tempo de simulação para o qual o desvio RMS foi inferior a 10^{-3} . Tal configuração foi considerada a melhor possível devido à alta exatidão dos valores encontrados e o baixo tempo computacional.

O sistema de equações apresentado é particularmente desafiador devido à grande variação de temperaturas do líquido. A configuração escolhida, por ter conseguido atingir alta precisão para tal sistema, não deve encontrar grandes dificuldades em apresentar bons resultados na resolução do sistema de equações de outras torres de resfriamento.

6. CONCLUSÕES

Foi desenvolvido um modelo para representar uma torre de resfriamento operando em corrente cruzada a partir de balanços diferenciais de massa e energia. A utilização de uma função de ativação permitiu a unificação das formulações de gás saturado e insaturado, o que simplificou a forma final do sistema de equações resultantes e o seu processo de dedução. O modelo fez uso de expressões para a transferência de massa e energia que foram originadas a partir de analogias com o transporte de vapor e calor através de ar estagnado em um tubo vertical.

O uso da expansão em séries de potência permitiu a criação de um sistema simplificado de equações, o qual é válido para baixos valores de umidade e taxas de transferência de massa. A análise da contribuição de BOSNJAKOVIC ET AL permitiu a criação de uma expressão que relaciona o coeficiente de transferência de massa e o coeficiente de transferência de calor, novamente levando em consideração formulações exata e simplificada.

Vários métodos numéricos foram propostos para a solução do sistema de equações diferenciais resultantes, dentre os quais estão o método de Euler, do Ponto-médio, de Bulirsch-Stoer e de Runge-Kutta de 4ª ordem. Tais métodos foram testados e comparados na resolução do sistema de equações segundo o esquema proposto, o qual requer a combinação de dois desses métodos: um para a direção principal e outro para a direção secundária. Neste esquema cada uma das direções (principal e secundária) está associada a uma das fases (ar ou água) e a solução das equações da direção principal sempre precede a solução daquelas da direção secundária.

As simulações foram realizadas através de scripts em Matlab® R2013b e foram utilizados os dados de BOUROUNI ET AL, GROBBELAAR ET AL E CORTINOVIS ET AL. Exceto para os dados fornecidos por BOUROUNI ET AL, os valores encontrados para os coeficientes de transferência de massa foram próximos daqueles reportados pelos autores. O valor reportado por BOUROUNI ET AL foi aproximadamente 45 vezes maior que o valor encontrado neste trabalho. Associa-se a tal discrepância o uso do método de Gauss-Seidel por tais autores, o qual é um método de convergência lenta e baixa precisão. Os dados de CORTINOVIS ET AL são mais bem representados pelo modelo proposto nesse trabalho que aquele proposto por tais autores. Tal conclusão advém da grande concordância entre os resultados teóricos e experimentais relacionados com a correlação levantada para o coeficiente de transferência de massa.

Utilizou-se os dados de BOUROUNI ET AL para a realização de comparações entre os diferentes métodos numéricos. Dentre os métodos utilizados na direção principal o método de Euler foi aquele que apresentou maior inexactidão nos resultados. O método de Bulirsch-Stoer possuiu precisão comparável ao método do Ponto-médio mas foi consideravelmente mais lento. Dentre os métodos utilizados na direção principal o método do Ponto-médio foi o que apresentou a melhor combinação de precisão com baixo tempo

computacional e foi o método de escolha para a resolução do sistema de equações da direção principal. O método de Runge-Kutta foi o que apresentou a melhor combinação de tais fatores na direção secundária.

Foi realizada uma comparação entre as formulações exata e simplificado. O sistema de equações simplificado, além não representar a influência da injeção de massa nos mecanismos de transferência de massa e calor, não traz uma redução significativa no tempo de simulação em relação ao sistema exato. Conclui-se que o uso do sistema exato deve ser priorizado.

As funções de ativação foram testadas em condições que propiciavam a saturação do gás. Observou-se que para baixas tendências à saturação, o uso da função suave não provoca alterações perceptíveis nos perfis das propriedades do sistema. Porém, em situações onde grande parte do domínio tende a apresentar saturação do gás e grandes quantidades de água sob a forma de gotículas, a função suave provoca uma alteração considerável na solução do sistema e seu uso deve ser evitado.

Considerados tais resultados, o método de resolução foi otimizado. Para tanto utilizou-se a formulação exata do sistema de equações e a função de ativação degrau. O método do Ponto-médio e de Runge-Kutta foram utilizados para a resolução das direções principal e secundária (respectivamente). O gás foi escolhido como componente principal e o domínio foi dividido em cinco intervalos na direção x e seis na direção y .

O sistema de equações apresentado é particularmente desafiador devido à grande variação de temperaturas do líquido ao longo do domínio. A configuração escolhida, por ter conseguido atingir alta precisão para tal sistema, não deve encontrar grandes dificuldades em apresentar bons resultados na resolução do sistema de equações de outras torres de resfriamento.

7. BIBLIOGRAFIA

A bibliografia é listada pela ordem de aparição no texto.

- LIMA JUNIOR, R.C.: **Modelagem fenomenológica do desempenho de torres de resfriamento de água acopladas e estudos de casos**. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química. São Paulo, 2011.
- TREYBAL, R.E.: **Mass-Transfer Operations**. 3ª Edição. McGraw-Hill Kogakusha, 1981.
- WEN ET AL: **Experimental study on heat transfer coefficient between air and liquid in the cross-flow heat source tower**. Building and Environment 57 (2012), p. 205-213.
- MILOSAVLJEVIC ET AL: **A comprehensive approach to cooling tower design**. Applied Thermal Engineering 21 (2001), p. 899-911.
- KLOPPERS, J. C.: **A critical evaluation and refinement of the performance prediction of wet cooling towers**. Tese (Doutorado) - Department of Mechanical Engineering of the University of Stellenbosch. Stellenbosch, 2003.
- BOUROUNI ET AL: **Numerical study of coupled heat and mass transfer in geothermal water cooling tower**. Energy Conversion and Management 49 (2008), p. 988-994.
- HERNÁNDEZ-CALDERÓN ET AL: **Solving the heat and mass transfer equations for an evaporative cooling tower through an orthogonal collocation method**. Computers and Chemical Engineering 71 (2014), p. 24-38.
- CORTINOVIS ET AL: **Integrated Analysis of cooling water systems - Modeling and experimental validation**. Applied Thermal Engineering 29 (2009), p. 3124-3131.
- OLIVEIRA, V.F.: **Diagnóstico de eficiência energética de uma torre de resfriamento de água da Arcelormittal Inox Brasil**. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais. Departamento de Engenharia Mecânica. Belo Horizonte, 2010.
- CUSSLER, E. L.: **Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems**. 3ª Edição. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
- WHITMAN, W.: **The two-film theory of gas absorption**. Chem. Metall. Eng. 29 (1923), p. 146-148.
- VPC: Vapor Pressure Calculation by Antoine Equation (Water).
Retirado de <http://ddbonline.ddbst.de/AntoineCalculation/AntoineCalculationCGI.exe>

- SMITH ET AL; **Introdução à termodinâmica da engenharia química**. 7ª Edição. Rio de Janeiro: LTC, 2007.
- BOSNJAKOVIC ET AL: **Technical Thermodynamics**. 1ª Edição. Nova Iorque, Chicago, etc.: Holt, Rinehart & Winston, 1965.
- GROBBELAAR ET AL: **Performance characteristics of a trickle fill in cross- and counter-flow configuration in a wet-cooling tower**. Applied Thermal Engineering 50 (2013), p. 475-484.
- ACKERMANN, G.: **Wärmeübergang und molekulare Stoffübertragung im gleichen Feld bei großen Temperatur- und Partialdruckdifferenzen**. VDI-Forschungsheft 382 (1937).
- KREITH ET AL: **Principles of Heat Transfer**. 7ª Edição. Stamford: Cengage Learning, 2011.
- WELTY ET AL: **Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer**. 5ª Edição. Hoboken: John Wiley & Sons, 2008.
- KIRPEKAR, S.: **Implementation of the Bulirsch Stöer Extrapolation Method**. Berkeley: Department of Mechanical Engineering, UC Berkeley, 2003.
- KIUSALAAS, J.: **Numerical methods in engineering with MATLAB**. 1ª Edição. New York: Cambridge University Press, 2005.

APÊNDICE A - Demonstrações e Desenvolvimento de Equações

A.1 - Y e y_w : Formulações exata e simplificada

Representando quantidades molares por n e a massa molar de cada componente por MM , pode-se reescrever (1) como

$$Y = \frac{n_w MM_w}{n_a MM_a}, \quad (\text{A.1})$$

em que os subscritos w e a representam vapor d'água e ar, respectivamente. Considerando que a mistura gasosa é composta apenas por ar e vapor d'água pode-se obter a seguinte expressão:

$$\frac{n_w}{n_a} = \frac{n_w/(n_w + n_a)}{n_a/(n_w + n_a)} = \frac{y_w}{y_a} = \frac{y_w}{1 - y_w}. \quad (\text{A.2})$$

Assim, pode-se escrever (A.1) após substituição com (A.2):

$$Y = \frac{n_w MM_w}{n_a MM_a} = \frac{y_w \mathcal{R}}{1 - y_w}, \quad (\text{A.3})$$

em que utilizou-se

$$\mathcal{R} = \frac{MM_w}{MM_a} = \frac{18,02}{28,97} = 0,622. \quad (\text{A.4})$$

Observe que para valores pequenos de y_w , pode-se aproximar (A.4) por

$$Y = y_w \mathcal{R} / (1 - y_w) \cong y_w \mathcal{R}. \quad (\text{A.5})$$

Obtém-se então as seguintes expressões:

$$Y = \begin{cases} y_w \mathcal{R} / (1 - y_w); & (\text{E}) \\ y_w \mathcal{R}. & (\text{S}) \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Resolvendo (A.6) para y_w obtém-se

$$y_w = \begin{cases} Y / (Y + \mathcal{R}); & (\text{E}) \\ Y / \mathcal{R}. & (\text{S}) \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

A.2 - H_g : Formulações insaturada e saturada

Será desenvolvida uma equação para o cálculo da entalpia de uma mistura gasosa ar-água que contenha um quilo de ar seco. Para tanto deve-se somar as entalpias de cada espécie presente na mistura:

$$H_g = \begin{cases} H_a + Y_g H_v ; & (Y_g \leq Y_g^{sat}) \\ H_a + Y_g^{sat} H_v + (Y_g - Y_g^{sat}) H_l & (Y_g > Y_g^{sat}) \end{cases} \quad (A.8)$$

Substituindo-se (16) em (A.8) obtém-se

$$H_g = \begin{cases} C_{p,a} T_g + Y_g (C_{p,v} T_g + \lambda) ; & (Y_g \leq Y_g^{sat}) \\ C_{p,a} T_g + Y_g^{sat} (C_{p,v} T_g + \lambda) + (Y_g - Y_g^{sat}) C_{p,l} T_g & (Y_g > Y_g^{sat}) \end{cases} \quad (A.9)$$

Rearranjando-se (A.9) obtém-se

$$H_g = \begin{cases} C_{p,g} T_g + Y_g \lambda ; & (Y_g \leq Y_g^{sat}) \\ [C_{p,g}^{sat} + (Y_g - Y_g^{sat}) C_{p,l}] T_g + Y_g^{sat} \lambda , & (Y_g > Y_g^{sat}) \end{cases} \quad (A.10)$$

em que utilizou-se

$$\begin{aligned} C_{p,g} &= C_{p,a} + Y_g C_{p,v} ; \\ C_{p,g}^{sat} &= C_{p,a} + Y_g^{sat} C_{p,v} . \end{aligned} \quad (A.11)$$

A.3 - Analogia para o transporte de massa em um tubo vertical

Será desenvolvida uma expressão para o cálculo do fluxo molar de vapor d'água a partir da analogia com o transporte desse componente em um tubo vertical através de ar estagnado.

Um recipiente aberto para a atmosfera contém água líquida em seu interior. A temperatura e a pressão do sistema são constantes e iguais a T e P . O líquido evapora e seu vapor se difunde verticalmente até o topo do recipiente, contatando ao final deste uma corrente gasosa de composição constante e que escoar horizontalmente. A interface do líquido com a mistura gasosa está em y_i e o topo do tubo em y_f . No fundo (início) do recipiente, sobre a superfície do líquido, a concentração de vapor de água é $C_{w,l}$, a concentração de saturação na temperatura T . No topo do tubo (fim) a concentração de vapor é a da corrente gasosa, $C_{w,g} < C_{w,l}$. Um esquema do sistema é representado na Figura A.1 abaixo. São feitas as seguintes considerações sobre o sistema:

- O ar é insolúvel no líquido;
- A mistura gasosa é ideal;

- Regime permanente (RP);
- Dois tipos de transporte ocorrem na mistura gasosa: difusão molecular e advecção;
- O fluxo ao longo do tubo é unidimensional, isto é, o fluxo não é função da posição radial dentro do tubo;
- Como a mistura gasosa é ideal, não há interação entre as moléculas dos diferentes componentes e os coeficientes de difusão são constantes e independentes das concentrações dos compostos.

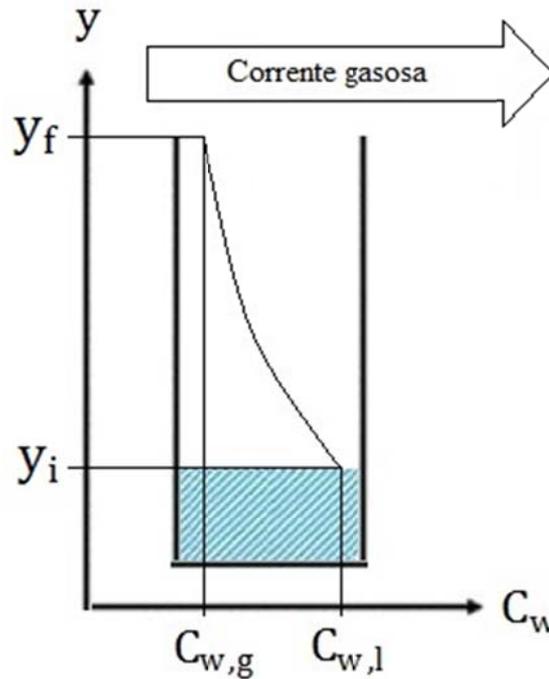


Figura A.1: Perfil de concentrações de vapor d'água no tubo.

O transporte por difusão molecular é causado pela diferença de concentração entre duas regiões adjacentes no espaço. O transporte por advecção é o transporte devido à velocidade do escoamento. O campo de velocidades, neste caso, é gerado pela 'injeção' de massa (vapor d'água) através da interface.

A lei de Fick nos diz que o fluxo difusivo molar, j , na direção y é proporcional à derivada da concentração com relação a tal direção, a constante de proporcionalidade sendo o coeficiente de difusão D :

$$j = -D \frac{dC}{dy}. \quad (\text{A.12})$$

O fluxo advectivo molar, ℓ , na direção y é dado pelo produto da velocidade do escoamento em tal direção, U , e a concentração molar C :

$$\ell = UC. \quad (\text{A.13})$$

O fluxo molar total, n , na direção y é dado pela soma dos fluxos advectivos e difusivos molares em tal direção:

$$n = j + \ell . \quad (\text{A.14})$$

Será utilizada a lei dos gases ideais para determinar o fluxo molar total de vapor de água através do tubo. Os dois constituintes da mistura gasosa são vapor de água e ar. Para um gás ideal, a pressão total é igual à soma da pressão parcial dos componentes:

$$\begin{aligned} P &= P_a + P_w = C_a RT + C_w RT \\ &= C_g RT . \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Na equação acima utilizou-se

$$C_g = C_a + C_w . \quad (\text{A.16})$$

Como $P, T, R = \text{cte}$, C_g também é constante. Assim, derivando-se (A.16) em relação a y obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{dC_g}{dy} &= \frac{dC_a}{dy} + \frac{dC_w}{dy} = 0 ; \\ \frac{dC_a}{dy} &= - \frac{dC_w}{dy} . \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Portanto, para o caso de pressão e temperatura constantes e de considerarmos a mistura gasosa um gás ideal, uma variação na concentração de vapor automaticamente gera uma variação na concentração de ar.

Como a altura da interface é constante (para RP), e o ar é insolúvel na água e $C_g, T, P = \text{cte}$, matéria não pode se acumular no tubo e nem se difundir para dentro do líquido. Conclui-se, portanto, que o fluxo molar de ar deve ser nulo. Porém, como há uma variação da concentração de vapor ao longo de y , obrigatoriamente haverá uma variação na concentração de ar. Assim, ocorre a difusão do vapor de água em um sentido e a difusão do ar no outro. Para que o fluxo de ar seja nulo, a difusão deste 'componente' em direção à interface deve ser neutralizada pela sua advecção em direção ao topo do tubo. Resulta, portanto, a seguinte expressão:

$$n_a = j_a + \ell_a = 0 . \quad (\text{A.18})$$

Para o vapor de água, a conclusão a ser obtida das considerações enunciadas acima (RP; $C_g, T, P = \text{cte}$) é que o fluxo total deste componente é constante:

$$n_w = j_w + \ell_w = \text{cte} . \quad (\text{A.19})$$

Substituindo-se (A.12) e (A.13) em (A.18) obtém-se a velocidade U :

$$\begin{aligned}
-D_a \frac{dC_a}{dy} + UC_a &= 0 ; \\
U &= \frac{D_a}{C_a} \frac{dC_a}{dy} , \\
&= -\frac{D_a}{C_g - C_w} \frac{dC_w}{dy} ,
\end{aligned} \tag{A.20}$$

em que a última igualdade é obtida a partir da substituição com (A.16) e (A.17). Similarmente, substitui-se (A.12), (A.13) e (A.20) em (A.19) e obtém-se

$$\begin{aligned}
n_w &= j_w + \ell_w , \\
&= -D_w \frac{dC_w}{dy} + UC_w , \\
&= -D_w \frac{dC_w}{dy} - D_a \frac{C_w}{C_g - C_w} \frac{dC_w}{dy} , \\
&= -\left(D_w + D_a \frac{C_w}{C_g - C_w} \right) \frac{dC_w}{dy} .
\end{aligned} \tag{A.21}$$

Trabalhando o termo entre parênteses da última igualdade em (A.21) obtém-se

$$\begin{aligned}
D_w + D_a \frac{C_w}{C_g - C_w} &= D_w + D_a \left(\frac{C_g}{C_g - C_w} - 1 \right) , \\
&= \frac{d}{dC_w} [D_w C_w - D_a (C_g \ln[C_g - C_w] + C_w)] , \\
&= -\frac{d}{dC_w} [D_a C_g \ln(C_g - C_w) + (D_a - D_w) C_w] .
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Substituindo-se (A.22) em (A.21) obtém-se

$$n_w = \frac{d}{dy} [D_a C_g \ln(C_g - C_w) + (D_a - D_w) C_w] , \tag{A.23}$$

que após uma integração de y_i a y_f e um rearranjo produz

$$n_w = \frac{D_a C_g}{y_f - y_i} \ln \left(\frac{C_g - C_{w,g}}{C_g - C_{w,l}} \right) + \frac{D_a - D_w}{y_f - y_i} (C_{w,g} - C_{w,l}) . \tag{A.24}$$

Utilizando o conceito de fração molar obtém-se

$$n_w = \frac{D_a C_g}{y_f - y_i} \ln \left(\frac{1 - y_{w,g}}{1 - y_{w,l}} \right) + \frac{(D_a - D_w) C_g}{y_f - y_i} (y_{w,g} - y_{w,l}) , \tag{A.25}$$

$$= \mathcal{K}_a C_g \ln \left(\frac{1 - y_{w,g}}{1 - y_{w,l}} \right) + (\mathcal{K}_a - \mathcal{K}_w) C_g (y_{w,g} - y_{w,l}),$$

em que usou-se

$$\mathcal{K}_a = \frac{D_a}{y_f - y_i};$$

$$\mathcal{K}_w = \frac{D_w}{y_f - y_i}.$$
(A.26)

O exemplo do tubo pode ser adaptado para o caso da evaporação da água através da interface dentro da torre de resfriamento. Ao contrário do tubo, no qual o escoamento é predominantemente laminar, a mistura do fluido através de convecção é a principal responsável pelo transporte de massa e energia entre as duas fases. Teoricamente, as contribuições de mistura macroscópica (convecção) e molecular (difusão) se somam, mas como a contribuição macroscópica é várias ordens de grandeza superior à molecular, pode-se desprezar esta e considerar somente a mistura devido à convecção [CUSSLER]. Considerando uma analogia da lei de Fick para o caso macroscópico, tem-se

$$j_E = -D_E \frac{dC}{dy},$$
(A.27)

em que a dispersão ('difusão' macroscópica) é representada pelo fluxo dispersivo j_E , novamente proporcional à derivada da sua concentração. A constante de proporcionalidade, neste caso, é D_E , um coeficiente de difusão turbilhonar ('*eddy*'), que é independente da natureza do fluido e é característico das propriedades do escoamento. Considerando que tal coeficiente seja constante para a interface gás-líquido no recheio da torre de resfriamento, o desenvolvimento da seção anterior pode ser utilizado. Como D_E é uma propriedade do escoamento (e não do fluido), o valor deste coeficiente é o mesmo para os diferentes componentes do fluido. Faz-se, portanto, $\mathcal{K}_a = \mathcal{K}_w = \mathcal{K}$ em (A.25) e obtém-se

$$n_w = \mathcal{K} C_g \ln \left(\frac{1 - y_{w,g}}{1 - y_{w,l}} \right).$$
(A.28)

Uma simplificação para a equação acima pode ser adotada considerando-se a expansão em série de $\ln(1 - x)$:

$$\ln(1 - x) = - \left(x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4} + \dots \right).$$
(A.29)

Para x pequeno pode-se desprezar todos os termos da série exceto o primeiro, e obtém-se

$$\ln(1 - x) \cong -x.$$
(A.30)

Assim, para y pequeno obtém-se

$$\ln\left(\frac{1 - y_{w,g}}{1 - y_{w,l}}\right) = \ln(1 - y_{w,g}) - \ln(1 - y_{w,l}) \quad (\text{A.31})$$

$$\cong y_{w,l} - y_{w,g}.$$

Substituindo-se (A.31) em (A.28) obtém-se

$$n_w = \mathcal{K}C_g(y_{w,l} - y_{w,g}). \quad (\text{A.32})$$

Fica-se, portanto, com duas equações para o cálculo de n_w . Para o cálculo aproximado de n_w (em que y é pequeno) utiliza-se (A.32); para o cálculo exato deve-se usar (A.28). Substituindo-se (A.7) em (A.28) e (A.32) obtém-se a taxa de evaporação em função da concentração absoluta mássica, Y :

$$n_w = \begin{cases} \mathcal{K}C_g \ln\left(\frac{Y_l + \mathcal{R}}{Y_g + \mathcal{R}}\right); & (\text{E}) \\ \mathcal{K}C_g (Y_l - Y_g)/\mathcal{R}; & (\text{S}) \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

As expressões acima utilizam o valor total da umidade do gás para o cálculo de n_w . Caso ocorra a saturação do gás a concentração de vapor no fim da interface não é adequadamente representada por Y_g mas sim por Y_g^{sat} , o valor de umidade de saturação à temperatura do gás.

Quando o gás torna-se saturado, ainda assim pode ocorrer a evaporação e migração de água para a fase gasosa. A explicação para isto está no fato de que, mesmo com a saturação da fase gasosa, pode-se estabelecer um gradiente da concentração de vapor ao longo da interface. Nesse caso, a equação de Antoine explica a existência de tal gradiente: a fase com maior temperatura terá maior concentração de vapor.

Assim, para o caso de haver gotículas de água em suspensão no gás usa-se $Y_g = Y_g^{\text{sat}}$. Como a fração mássica de vapor do lado do líquido é também uma concentração de saturação, passa-se a utilizar o sobrescrito 'sat' para estas duas grandezas. Assim, reescreve-se (A.33):

$$n_w = \begin{cases} \mathcal{K}C_g \ln\left(\frac{Y_l^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g + \mathcal{R}}\right); & (\text{E}, Y_g \leq Y_g^{\text{sat}}) \\ \mathcal{K}C_g \ln\left(\frac{Y_l^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^{\text{sat}} + \mathcal{R}}\right); & (\text{E}, Y_g > Y_g^{\text{sat}}) \\ \mathcal{K}C_g (Y_l^{\text{sat}} - Y_g)/\mathcal{R}; & (\text{S}, Y_g \leq Y_g^{\text{sat}}) \\ \mathcal{K}C_g (Y_l^{\text{sat}} - Y_g^{\text{sat}})/\mathcal{R}; & (\text{S}, Y_g > Y_g^{\text{sat}}) \end{cases} \quad (\text{A.34})$$

A.4 - Analogia para o transporte de calor em um tubo vertical

Será desenvolvida uma expressão para o cálculo do fluxo de calor através da interface. Novamente utiliza-se o sistema do tubo, o mesmo utilizado para descrever o fluxo mássico de evaporação no APÊNDICE A.3. Porém, nesse caso, a temperatura varia ao longo da interface, começando sobre o líquido com valor igual a T_l e terminando no seio da fase gasosa valendo $T_g, T_g < T_l$.

Dois fenômenos são responsáveis pela troca de calor entre o gás e o líquido: convecção na película de gás e ‘injeção’ de massa através da interface. O primeiro fenômeno é devido simplesmente à agitação macroscópica turbulenta do escoamento. O segundo fenômeno está relacionado com o carreamento de calor sensível pelo vapor que migra entre as fases, as quais estão a temperaturas distintas.

Para o sistema do tubo considerado observa-se que, pela condição de RP e a de não propagação do ar para dentro do tubo, a única espécie que atravessa uma seção transversal (ST) qualquer do tubo é o vapor d’água. Devido à consideração de RP não há acúmulo de massa dentro do tubo, e as taxas mássicas de vapor entrando e saindo de uma ST são iguais. Escreve-se a seguinte expressão para o fluxo mássico do vapor através da ST:

$$\text{entra} = \text{sai} = n_w MM_w . \quad (\text{A.35})$$

A Figura A.2 representa a situação descrita e servirá de base para o balanço de entalpia do sistema. Observa-se que o fluxo de energia em cada face é composto pelo fluxo de entalpia do vapor e o fluxo de calor (devido ao gradiente de temperaturas).

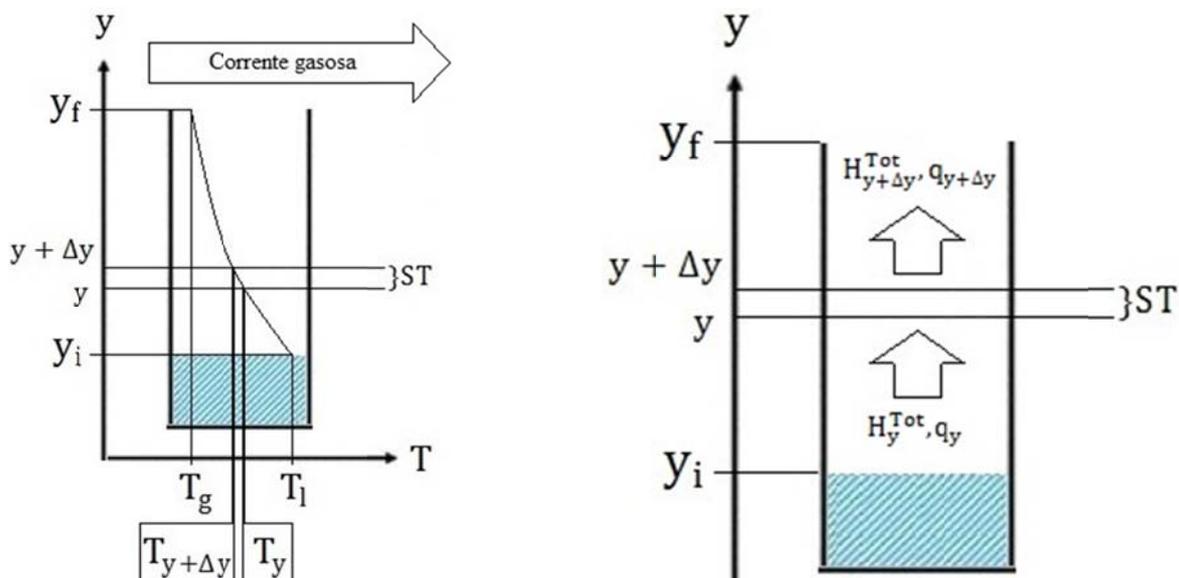


Figura A.2: Perfil de temperaturas no tubo e esquema para o balanço de entalpia.

Na ST considerada na Figura A.2, pela condição de RP, o fluxo de energia que entra por uma das faces é igual àquele que sai pela outra:

$$\begin{aligned} H_{y+\Delta y}^{\text{Tot}} + q_{y+\Delta y} &= H_y^{\text{Tot}} + q_y, \\ H_{y+\Delta y}^{\text{Tot}} - H_y^{\text{Tot}} + q_{y+\Delta y} - q_y &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Identificam-se os termos correspondentes aos fluxos de entalpia total do vapor:

$$\begin{aligned} H_{y+\Delta y}^{\text{Tot}} &= n_w MM_w (C_{p,v} T_{y+\Delta y} + \lambda); \\ H_y^{\text{Tot}} &= n_w MM_w (C_{p,v} T_y + \lambda); \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Substituindo-se (A.37) em (A.36) e simplificando obtém-se:

$$n_w MM_w C_{p,v} (T_{y+\Delta y} - T_y) + q_{y+\Delta y} - q_y = 0. \quad (\text{A.38})$$

Pode-se dividir a expressão acima por Δy para obter

$$n_w MM_w C_{p,v} \frac{T_{y+\Delta y} - T_y}{\Delta y} + \frac{q_{y+\Delta y} - q_y}{\Delta y} = 0. \quad (\text{A.39})$$

Tomando o limite da expressão acima para o caso de $\Delta y \rightarrow 0$, ambas as frações, por definição, se tornam derivadas no ponto y da interface:

$$n_w MM_w C_{p,v} \frac{dT}{dy} + \frac{dq}{dy} = 0. \quad (\text{A.40})$$

Em analogia à lei de Fick utiliza-se a lei de Fourier para o fluxo de calor em regime laminar:

$$q = -k \frac{dT}{dy}, \quad (\text{A.41})$$

em que k é o coeficiente de condutividade térmica. Após substituição de (A.41) em (A.40) obtém-se uma equação diferencial ordinária (EDO) homogênea:

$$\frac{d^2 T}{dy^2} - \mathcal{A} \frac{dT}{dy} = 0; \quad (\text{A.42})$$

$$\mathcal{A} = n_w MM_w C_{p,v} / k.$$

A EDO pode ser resolvida através da seguinte solução hipotética:

$$T = \exp(ry), \quad (\text{A.43})$$

na qual r é uma constante a ser determinada. Após substituição de (A.43) em (A.42) e simplificação da equação resultante obtém-se a seguinte equação de segunda ordem

$$r^2 - \mathcal{A}r = 0, \quad (\text{A.44})$$

cujas soluções são $r_1 = 0$ e $r_2 = \mathcal{A}$. A solução da EDO é uma combinação linear das duas soluções individuais:

$$\begin{aligned} T &= B_1 \exp(r_1 y) + B_2 \exp(r_2 y), \\ &= B_1 + B_2 \exp(\mathcal{A}y), \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

em que B_1, B_2 são constantes a serem determinadas. Para encontrar uma expressão para q é necessário encontrar a derivada de T com relação à posição y :

$$\frac{dT}{dy} = \mathcal{A}B_2 \exp(\mathcal{A}y). \quad (\text{A.46})$$

Aplica-se as condições de contorno do sistema à EDO para se obter a constante B_2 . As duas condições de contorno são as temperaturas do gás no início e fim da interface:

$$\begin{aligned} T(y_i) &= T_1; \\ T(y_f) &= T_g. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Aplicadas à solução da EDO obtém-se:

$$\begin{aligned} T_1 &= B_1 + B_2 \exp(\mathcal{A}y_i); \\ T_g &= B_1 + B_2 \exp(\mathcal{A}y_f); \\ B_2 &= \frac{T_1 - T_g}{\exp(\mathcal{A}y_i) - \exp(\mathcal{A}y_f)}. \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Substituindo B_2 em (A.46) obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dy} &= \frac{\mathcal{A} \exp(\mathcal{A}y)}{\exp(\mathcal{A}y_i) - \exp(\mathcal{A}y_f)} (T_1 - T_g), \\ &= \frac{\mathcal{A}}{\exp[\mathcal{A}(y_i - y)] - \exp[\mathcal{A}(y_f - y)]} (T_1 - T_g). \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

O calor que chega a fase gasosa, q^* , é aquele avaliado em y_f :

$$\begin{aligned} q^* &= -k \left(\frac{dT}{dy} \right)_{y_f}, \\ &= \frac{k\mathcal{A}}{1 - \exp[\mathcal{A}(y_i - y_f)]} (T_1 - T_g). \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Multiplicando o numerador e o denominador de (A.50) por $y_f - y_i$ obtém-se, finalmente:

$$q^* = \left(\frac{k}{y_f - y_i} \right) \frac{\mathcal{A}(y_f - y_i)}{1 - \exp[-\mathcal{A}(y_f - y_i)]} (T_l - T_g); \quad (A.51)$$

$$= h\mathcal{F}(T_l - T_g).$$

Em que usou-se

$$h = \frac{k}{y_f - y_i};$$

$$\mathcal{F} = \frac{a}{1 - \exp(-a)}; \quad (A.52)$$

$$a = \mathcal{A}(y_f - y_i) = \frac{n_w MM_w C_{p,v}}{k} (y_f - y_i) = \frac{n_w MM_w C_{p,v}}{h}.$$

\mathcal{F} é conhecido como o “Fator de Ackermann” [TREYBAL, WEN ET AL] por ter sido primeiramente introduzido por pelo autor de mesmo nome [ACKERMANN].

Similarmente ao transporte de massa, a transferência de calor no tubo pode ser adaptada para o caso da torre de resfriamento. Considerando uma analogia da lei de Fourier para o caso macroscópico, obtém-se

$$q_E = -k_E \frac{dT}{dy}. \quad (A.53)$$

Novamente, a constante de proporcionalidade é k_E , um coeficiente de condutividade térmica turbilhonar (*‘eddy’*), que é independente da natureza do fluido e característico das propriedades do escoamento. Considerando que tal coeficiente seja constante para a interface gás-líquido no recheio da torre de resfriamento, o desenvolvimento da seção anterior pode ser utilizado.

Observe que, para o desenvolvimento realizado, o vapor que chega ao seio da fase gasosa está à mesma temperatura que ela (T_g). Tal observação será importante para quando realizarmos os balanços de entalpia de ambas as fases. Uma segunda observação se torna pertinente considerando-se a expansão em série de $\exp(x)$:

$$\exp(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots;$$

$$\exp(-x) = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} - \dots; \quad (A.54)$$

$$1 - \exp(-a) = a - \frac{a^2}{2} + \frac{a^3}{3!} - \frac{a^4}{4!} + \dots.$$

Para $a \ll 1$ ignoram-se todos os termos do lado direito de (A.55) exceto o primeiro e obtém-se

$$1 - \exp(-a) \approx a ;$$

$$\mathcal{F} = \frac{a}{1 - \exp(-a)} \approx 1 .$$
(A.55)

Assim obtém-se

$$q^* = \begin{cases} h\mathcal{F}(T_l - T_g) ; & \text{(E)} \\ h(T_l - T_g) . & \text{(S)} \end{cases}$$
(A.56)

A.5 - Funções de ativação

A função degrau de Heaviside, $\mathcal{H}(x)$, é definida como

$$\mathcal{H}(x) = \begin{cases} 0 , & x \leq 0 ; \\ 1 , & x > 0 . \end{cases}$$
(A.57)

Ela funcionará como uma ‘função de ativação’, selecionando uma formulação ou outra, dependendo do vapor estar em um estado saturado ou insaturado. A função de ativação é dada por

$$\mathcal{H}^d(Y_g - Y_g^{\text{sat}}) = \begin{cases} 0 , & Y_g \leq Y_g^{\text{sat}} ; \\ 1 , & Y_g > Y_g^{\text{sat}} . \end{cases}$$
(A.58)

A função degrau é descontínua na transição entre o estado saturado e insaturado, o que pode gerar complicações na resolução numérica do sistema. A função de ativação \mathcal{H}^d pode ser substituída por uma função de ativação contínua, a qual pode ser escrita a partir da tangente hiperbólica:

$$\tanh(x) = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)} = \frac{1 - \exp(-2x)}{1 + \exp(-2x)} .$$
(A.59)

O seu gráfico é traçado na Figura A.3 abaixo:

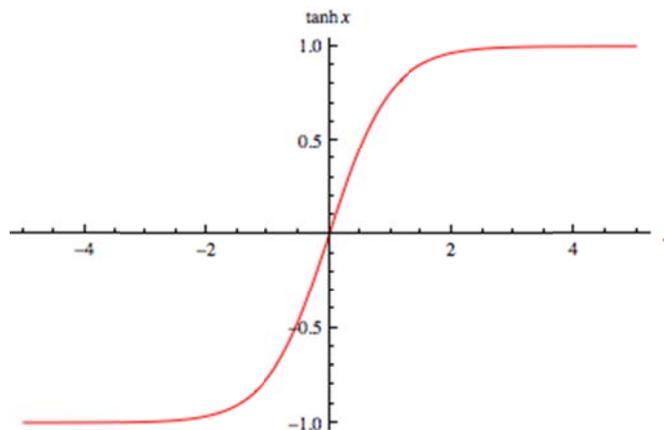


Figura A.3: Tangente hiperbólica de x, $\tanh(x)$.

Observa-se que o gráfico de $\tanh(x)$ vai de -1 a 1 , sendo ambos valores atingidos assintoticamente em $x = -\infty$ e $x = +\infty$, respectivamente. Define-se agora a nova função, $\mathcal{H}'(x)$, que assume valores entre 0 e 1 :

$$\mathcal{H}'(x) = \frac{1 + \tanh(x)}{2} = \frac{1}{1 + \exp(-2x)}. \quad (\text{A.60})$$

A função obtida é composta por uma translação (de uma unidade para cima) seguida de uma compressão (para a metade do valor) da função resultante. Observa-se que $\mathcal{H}'(0) = 1/2$. Isso significa que a transição de 0 para 1 começa a ocorrer antes de $x = 0$. A função será transladada para a direita de forma que o seu valor em $x = 0$ seja de $0,001$. Pode-se escolher um valor tão pequeno quanto se desejar. Para $\mathcal{H}'(K') = 0,001$, tem-se que $K' = -(\ln 999)/2$. Cria-se então uma nova função, a partir da translação de \mathcal{H}' para a direita:

$$\mathcal{H}''(x) = \mathcal{H}'(x + K'). \quad (\text{A.61})$$

Com tal translação assegura-se que a transição ocorrerá praticamente à direita de $x = 0$. Por último, pode-se acelerar a transição ao redor da origem, fazendo a curva se assemelhar mais à função degrau. Para tanto define-se

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'''(x) &= \mathcal{H}''(b'x) = \mathcal{H}'(b'x + K'), \\ &= \frac{1}{1 + \exp[-2(b'x + K')]} = \frac{1}{1 + \exp(K - bx)}, \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

em que utilizou-se

$$\begin{aligned} K &= -2K' = \ln 999 ; \\ b &= 2b' > 0 . \end{aligned} \quad (\text{A.63})$$

A Figura A.4 ilustra a curva obtida para diferentes valores de b :

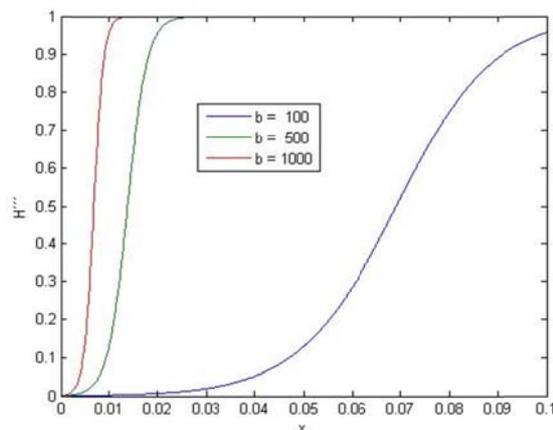


Figura A.4: $\mathcal{H}'''(x)$ para diferentes valores de b .

A função de ativação contínua e suave é escrita da seguinte maneira:

$$\mathcal{H}^s(Y_g - Y_g^{\text{sat}}) = \frac{1}{1 + \exp[K - b(Y_g - Y_g^{\text{sat}})]}. \quad (\text{A.64})$$

Na Figura A.4, observa-se que $0 \leq x \leq 0,1$. Tal intervalo foi escolhido pois a função de ativação é parametrizada por $x = Y_g - Y_g^{\text{sat}}$. Como os valores de Y são pequenos, espera-se que a diferença $Y_g - Y_g^{\text{sat}}$ seja bastante pequena e que sejam necessários valores grandes de b para que \mathcal{H}^s se assemelhe à função degrau.

As funções de ativação podem ser resumidas da seguinte forma:

$$\mathcal{H}^* = \begin{cases} \mathcal{H}^d(Y_g - Y_g^{\text{sat}}) & \text{(função degrau de Heaviside)} \\ \mathcal{H}^s(Y_g - Y_g^{\text{sat}}) & \text{(aproximação contínua suave)} \end{cases} \quad (\text{A.65})$$

A.6 - $\partial H_g / \partial x$: Formulações insaturada e saturada

Serão desenvolvidas equações para o cálculo da derivada da entalpia do gás com a posição x a partir das equações (A.10). Tais equações são utilizadas nos balanços de energia. Para $Y_g \leq Y_g^{\text{sat}}$ obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_g}{\partial x} &= \frac{\partial Y_g}{\partial x} C_{p,v} T_g + C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \lambda \frac{\partial Y_g}{\partial x}, \\ &= C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} (C_{p,v} T_g + \lambda), \\ &= C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_v. \end{aligned} \quad (\text{A.66})$$

Para o segundo caso, $Y_g > Y_g^{\text{sat}}$, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_g}{\partial x} &= \left[\frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} \frac{\partial T_g}{\partial x} C_{p,v} + \left(\frac{\partial Y_g}{\partial x} - \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) C_{p,l} \right] T_g + [C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l}] \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} \frac{\partial T_g}{\partial x} \lambda, \\ &= \left[\frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} \frac{\partial T_g}{\partial x} (C_{p,v} - C_{p,l}) + \frac{\partial Y_g}{\partial x} C_{p,l} \right] T_g + \left[C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l} + \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} \lambda \right] \frac{\partial T_g}{\partial x}, \\ &= \left[C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l} + \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} (\lambda + C_{p,v} T_g - C_{p,l} T_g) \right] \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} C_{p,l} T_g, \\ &= \left[C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l} + \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} (H_v - H_l) \right] \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_l. \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

Assim, são obtidas as seguintes equações para a derivada da entalpia do gás:

$$\frac{\partial H_g}{\partial x} = \begin{cases} C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_v; & (Y_g \leq Y_g^{\text{sat}}) \\ \left[C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l} + \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} (H_v - H_l) \right] \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_l. & (Y_g > Y_g^{\text{sat}}) \end{cases} \quad (\text{A.68})$$

A.7 - Formulação unificada para H_g , $\partial H_g / \partial x$ e n_w

Serão utilizadas as funções de ativação do APÊNDICE A.5 para promover a unificação das formulações entre o gás saturado e insaturado. Primeiramente serão introduzidos alguns termos para escrever as expressões a seguir de maneira mais compacta:

$$\begin{aligned} \Delta Y_g &= Y_g - Y_g^{\text{sat}}; \\ \Delta H_w &= H_v - H_l = (C_{p,v} - C_{p,l}) T_g + \lambda; \\ Y_g^* &= Y_g - \mathcal{H}^* \Delta Y_g; \\ C_{p,g}^* &= C_{p,g} - \mathcal{H}^* \Delta Y_g (C_{p,v} - C_{p,l}); \\ H_w^* &= H_v - \mathcal{H}^* \Delta H_w; \\ \alpha^* &= \mathcal{H}^* \Delta H_w \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g}. \end{aligned} \quad (\text{A.69})$$

A entalpia do gás é dada por (A.8):

$$H_g = \begin{cases} C_{p,g} T_g + Y_g \lambda; & (Y_g \leq Y_g^{\text{sat}}) \\ [C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l}] T_g + Y_g^{\text{sat}} \lambda. & (Y_g > Y_g^{\text{sat}}) \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Utilizando a função de ativação escreve-se

$$\begin{aligned} H_g &= \{C_{p,g} + \mathcal{H}^* [-C_{p,g} + C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l}]\} T_g + [Y_g + \mathcal{H}^* (-Y_g + Y_g^{\text{sat}})] \lambda \\ &= \{C_{p,g} - \mathcal{H}^* [C_{p,g} - C_{p,g}^{\text{sat}} - (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l}]\} T_g + [Y_g - \mathcal{H}^* (Y_g - Y_g^{\text{sat}})] \lambda \\ &= \{C_{p,g} - \mathcal{H}^* [(Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,v} - (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l}]\} T_g + [Y_g - \mathcal{H}^* (Y_g - Y_g^{\text{sat}})] \lambda \\ &= [C_{p,g} - \mathcal{H}^* \Delta Y_g (C_{p,v} - C_{p,l})] T_g + [Y_g - \mathcal{H}^* \Delta Y_g] \lambda \\ &= C_{p,g}^* T_g + Y_g^* \lambda \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

A derivada da entalpia do gás com a posição x é dada por (A.68):

$$\frac{\partial H_g}{\partial x} = \begin{cases} C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_v; & (Y_g \leq Y_g^{\text{sat}}) \\ \left[C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l} + \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} (H_v - H_l) \right] \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_l. & (Y_g > Y_g^{\text{sat}}) \end{cases} \quad (\text{A.68})$$

Novamente com a função de ativação pode-se escrever

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_g}{\partial x} &= \left\{ C_{p,g} + \mathcal{H}^* \left[-C_{p,g} + C_{p,g}^{\text{sat}} + (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l} + \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} (H_v - H_l) \right] \right\} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} [H_v + \mathcal{H}^* (-H_v + H_l)] \\ &= \left\{ C_{p,g} - \mathcal{H}^* \left[C_{p,g} - C_{p,g}^{\text{sat}} - (Y_g - Y_g^{\text{sat}}) C_{p,l} - \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} (H_v - H_l) \right] \right\} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} [H_v - \mathcal{H}^* (H_v - H_l)] \\ &= \left[C_{p,g}^* + \mathcal{H}^* \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} (H_v - H_l) \right] \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_w^*, \\ &= (C_{p,g}^* + \alpha^*) \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_w^*. \end{aligned}$$

Obtém-se, portanto, a seguinte expressão para $\partial H_g / \partial x$:

$$\frac{\partial H_g}{\partial x} = (C_{p,g}^* + \alpha^*) \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial Y_g}{\partial x} H_w^* \quad (\text{A.71})$$

O mesmo pode ser feito para n_w , na equação (A.34):

$$n_w = \begin{cases} \mathcal{K} C_g \ln \left(\frac{Y_l^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right); & (\text{E}) \\ \mathcal{K} C_g (Y_l^{\text{sat}} - Y_g^*) / \mathcal{R}. & (\text{S}) \end{cases} \quad (\text{A.72})$$

A.8 - Balanços de massa e energia

Serão desenvolvidos os balanços diferenciais de massa e de energia para a obtenção do sistema de equações que governa o funcionamento da torre. Utilizando coordenadas cartesianas, o sistema a ser representado é a região de volume $V = \Delta x \Delta y \Delta z$ esquematizado abaixo na Figura A.5. A direção z é perpendicular ao plano da página e não é representada devido à simetria do problema em relação ao plano xy . Para simplificar o equacionamento serão introduzidas agora duas grandezas, \mathfrak{m} e \mathfrak{Q} , as taxas volumétricas de massa e calor entre as fases, respectivamente. Tais taxas são o produto entre o fluxo e a área disponível para a troca, de massa ou calor:

$$\begin{aligned} \mathfrak{m} &= n_w M M_w A; \\ \mathfrak{Q} &= q^* A, \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

em que A é a área superficial do recheio por unidade de volume.

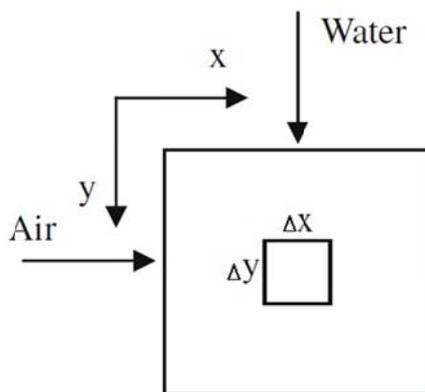


Figura A.5: Volume de controle da torre.

Serão realizados primeiramente os balanços de massa da água nas fases líquida e gasosa. Para o volume de controle da Figura A.5 o balanço de massa para o líquido é dado pela seguinte expressão:

$$\text{entra} = \text{sai} + \text{evaporado} + \text{acúmulo} . \quad (\text{A.74})$$

Para a fase gasosa o balanço de massa de vapor é dado por:

$$\text{entra} + \text{evaporado} = \text{sai} + \text{acúmulo} . \quad (\text{A.75})$$

Em ambos os casos acúmulo = 0, pois opera-se em regime permanente. Para as fases líquida e gasosa os termos de entrada e saída são dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \text{entra} &= (\bar{N}_l)_y \Delta x \Delta z ; \\ \text{sai} &= (\bar{N}_l)_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z ; \\ \text{entra} &= N_a (\bar{Y}_g)_x \Delta y \Delta z ; \\ \text{sai} &= N_a (\bar{Y}_g)_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z , \end{aligned} \quad (\text{A.76})$$

em que N é o fluxo de massa e os subscritos l e a indicam a fase líquida ou o ar, respectivamente. A notação com traço e parênteses foi utilizada para indicar valores médios das VIs, o subscrito indicando um parâmetro fixo no espaço, por exemplo:

$$(\bar{Y}_g)_{x+\Delta x} = \frac{1}{\Delta y} \int_y^{y+\Delta y} Y_g(x + \Delta x, y) dy = Y_g(x + \Delta x, \bar{y}) . \quad (\text{A.77})$$

A última igualdade na equação acima é válida para $y \geq \bar{y} \geq y + \Delta y$ e é originada do teorema do valor médio para integrais. O termo evaporado é igual para ambas as fases:

$$\text{evaporado} = \bar{m} \Delta x \Delta y \Delta z . \quad (\text{A.78})$$

Para o balanço de massa na fase líquida, com o termo de acúmulo sendo negligenciado e rearranjando a equação tem-se:

$$\text{sai} - \text{entra} = -\text{evaporado} ;$$

$$[(\bar{N}_1)_{y+\Delta y} - (\bar{N}_1)_y] \Delta x \Delta z = -\bar{m} \Delta x \Delta y \Delta z . \quad (\text{A.79})$$

Dividindo tudo por $\Delta x \Delta y \Delta z$ e tomando o limite em que $\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$, tem-se:

$$\lim_{\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0} \left[\frac{(\bar{N}_1)_{y+\Delta y} - (\bar{N}_1)_y}{\Delta y} \right] = \lim_{\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0} [-\bar{m}] . \quad (\text{A.80})$$

O termo da esquerda é a definição da derivada parcial de N_1 em relação a y . Ao se tomar o limite os valores médios convergem para os valores no ponto (x, y) . Assim, tem-se que

$$\frac{\partial N_1}{\partial y} = -\bar{m} . \quad (\text{A.81})$$

Similarmente para o balanço de massa na fase gasosa, com o termo de acúmulo sendo negligenciado e rearranjando-se a equação tem-se:

$$\text{sai} - \text{entra} = \text{evaporado} ;$$

$$N_a \left[(\bar{Y}_g)_{x+\Delta x} - (\bar{Y}_g)_x \right] \Delta y \Delta z = \bar{m} \Delta x \Delta y \Delta z . \quad (\text{A.82})$$

Repetindo o procedimento utilizado no balanço de massa da água obtém-se:

$$N_a \frac{\partial Y_g}{\partial x} = \bar{m} ; \quad (\text{A.83})$$

$$\frac{\partial Y_g}{\partial x} = \frac{\bar{m}}{N_a} .$$

Serão realizados agora os balanços de energia (entalpia) para o mesmo volume de controle utilizado no balanço de massa. O balanço de entalpia para ambas as fases pode ser dado pela seguinte expressão:

$$\text{sai} + \underbrace{\text{acúmulo}}_{=0} - \text{entra} = \text{calor} , \quad (\text{A.84})$$

em que o termo de acúmulo foi novamente colocado como zero devido ao estado de regime permanente.

Para a fase líquida os termos são dados por

$$\text{entra} = (\bar{N}_1 \bar{H}_1)_y \Delta x \Delta z ,$$

$$\text{sai} = (\bar{N}_1 \bar{H}_1)_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z + \bar{m} \bar{H}_v \Delta x \Delta y \Delta z . \quad (\text{A.85})$$

O equacionamento foi realizado considerando-se um volume de controle em que a temperatura da água fosse maior que a do ar, ocorrendo, portanto, transferência de calor para a fase gasosa. Por sua definição,

q^* é positivo em (A.56) (e, por conseguinte, \bar{Q} também). Como a água está perdendo energia, este valor deve ser subtraído no seu balanço de energia:

$$\text{calor} = -\bar{Q}\Delta x\Delta y\Delta z. \quad (\text{A.86})$$

Caso a temperatura da água seja menor que a do ar o valor de q^* será negativo. Neste caso, o calor adicionado à fase líquida em (A.86) é positivo, corroborando o fato de energia ser recebida pela fase líquida e não doada. Verifica-se, portanto, que os sinais estão corretos para todos os casos. Para a fase gasosa os termos são dados por

$$\begin{aligned} \text{entra} &= N_a(\bar{H}_g)_x \Delta y\Delta z + \bar{m}\bar{H}_v \Delta x\Delta y\Delta z, \\ \text{sai} &= N_a(\bar{H}_g)_{x+\Delta x} \Delta y\Delta z, \\ \text{calor} &= \bar{Q}\Delta x\Delta y\Delta z. \end{aligned} \quad (\text{A.87})$$

Substituindo os termos para a fase líquida obtém-se:

$$[(\bar{N}_1\bar{H}_1)_{y+\Delta y} - (\bar{N}_1\bar{H}_1)_y]\Delta x\Delta z = -(\bar{Q} + \bar{m}\bar{H}_v)\Delta x\Delta y\Delta z. \quad (\text{A.88})$$

Repetindo o processo utilizado no balanço de massa obtém-se:

$$\frac{\partial(N_1H_1)}{\partial y} = -(\bar{Q} + \bar{m}H_v). \quad (\text{A.89})$$

A derivada parcial em (A.89) pode ser expandida pela regra do produto:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(N_1H_1)}{\partial y} &= \frac{\partial N_1}{\partial y}H_1 + N_1\frac{\partial H_1}{\partial y}, \\ &= (-\bar{m})H_1 + N_1C_{p,l}\frac{\partial T_1}{\partial y}. \end{aligned} \quad (\text{A.90})$$

com a última igualdade vindo de (A.81) e de (16). Substituindo (A.90) em (A.89) e rearranjando obtém-se

$$\frac{\partial T_1}{\partial y} = \frac{\bar{Q} + \bar{m}\Theta_1}{\Theta_2}, \quad (\text{A.91})$$

em que utilizou-se

$$\begin{aligned} \Theta_1 &= H_v - H_l = C_{p,v}T_g + \lambda - C_{p,l}T_1; \\ \Theta_2 &= -N_1C_{p,l}. \end{aligned} \quad (\text{A.92})$$

Realiza-se agora o balanço de entalpia da fase gasosa. Substituindo os termos para tal fase no balanço de entalpia obtém-se:

$$N_a \left[(\bar{H}_g)_{x+\Delta x} - (\bar{H}_g)_x \right] \Delta y \Delta z = (\bar{Q} + \bar{m} \bar{H}_v) \Delta x \Delta y \Delta z. \quad (\text{A.93})$$

Repetindo o processo utilizado no balanço de massa obtém-se:

$$N_a \frac{\partial H_g}{\partial x} = \bar{Q} + \bar{m} H_v. \quad (\text{A.94})$$

Utilizando-se (A.71) e (A.81) escreve-se a seguinte expressão:

$$N_a \frac{\partial H_g}{\partial x} = N_a (C_{p,g}^* + \alpha^*) \frac{\partial T_g}{\partial x} + \bar{m} H_w^*. \quad (\text{A.95})$$

Substituindo (A.95) em (A.94) e rearranjando obtém-se

$$\frac{\partial T_g}{\partial x} = \frac{\bar{Q} + \bar{m} \Lambda_1}{\Lambda_2}, \quad (\text{A.96})$$

em que usou-se

$$\Lambda_1 = H_v - H_w^* = \mathcal{H}^* \Delta H_w; \quad (\text{A.97})$$

$$\Lambda_2 = N_a (C_{p,g}^* + \alpha^*).$$

Para a solução do sistema de equações diferenciais geradas será interessante que as variáveis independentes sejam adimensionalizadas. As seguintes grandezas são introduzidas

$$\begin{aligned} x^* &= x/\mathcal{X}; \\ y^* &= y/\mathcal{Y}. \end{aligned} \quad (\text{A.98})$$

em que \mathcal{X} e \mathcal{Y} são as dimensões horizontal e 'vertical' do recheio (comprimento da parte inclinada do recheio). Assim, as variáveis adimensionais x^* e y^* assumem valores entre 0 e 1. As derivadas parciais nessas variáveis são dadas pela regra da cadeia. Para o fluxo de massa da fase líquida obtém-se

$$\frac{\partial N_l}{\partial y^*} = \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial y^*} = \frac{\partial N_l}{\partial y} \mathcal{Y}. \quad (\text{A.99})$$

Repetindo-se o processo para as outras equações diferenciais as seguintes expressões são obtidas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_l}{\partial y^*} &= -\bar{m} \mathcal{Y}. \\ \frac{\partial Y_g}{\partial x^*} &= \frac{\bar{m} \mathcal{X}}{N_a}; \\ \frac{\partial T_l}{\partial y^*} &= \mathcal{Y} \left(\frac{\bar{Q} + \bar{m} \Theta_1}{\Theta_2} \right); \end{aligned} \quad (\text{A.100})$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial x^*} = \mathcal{X} \left(\frac{Q + m\Lambda_1}{\Lambda_2} \right).$$

A.9 - Carta psicrométrica

A carta psicrométrica é um diagrama típico para a representação das condições do ar úmido. A Figura A.6 mostra uma carta psicrométrica típica. No eixo horizontal tem-se a temperatura do ar e no eixo vertical à direita a umidade absoluta do ar. As linhas inclinadas coloridas de preto, verde e azul representam valores constantes de entalpia, volume específico e de temperatura de saturação adiabática (ou de búlbo úmido) do gás.

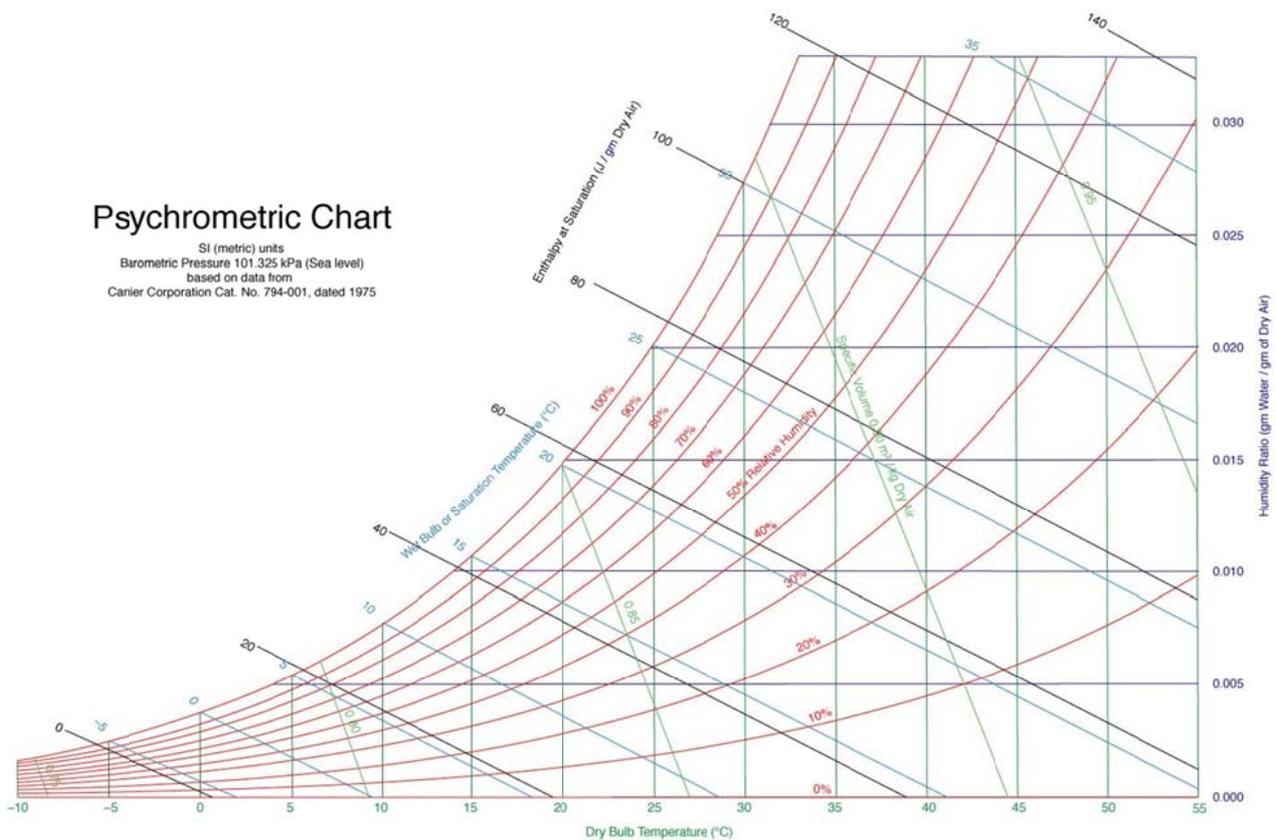


Figura A.6: Exemplo de uma carta psicrométrica típica.

A temperatura de saturação adiabática e a temperatura de bulbo úmido são dois conceitos interessantes que surgem em operações de umidificação. Ambas representam aproximações em situações limites.

Para a temperatura de saturação adiabática pode-se imaginar uma massa gasosa, inicialmente insaturada, e que possa ser representada por um ponto $(T_{g,i}, Y_{g,i})$ qualquer na carta (abaixo da curva de saturação, a curva vermelha mais acima na carta). Para tal massa insaturada a entalpia específica é dada por (A.8):

$$H_g = C_{p,g}T_g + Y_g\lambda. \quad (\text{A.101})$$

A massa gasosa contata um grande corpo de líquido e sai saturada, isto é, na condição (T_g^{SA}, Y_g^{SA}) . A operação é adiabática no sentido em que o calor fornecido pelo gás serve somente para evaporar a parcela

de líquido necessária para que tal massa torne-se saturada. A temperatura do corpo líquido não é alterada devido à sua grande massa e a entalpia total do gás mantém-se constante. Assim, para o gás que sai, a entalpia específica é novamente dada por (A.8):

$$H_g^{\text{sat}} = C_{p,g}^{\text{SA}} T_g^{\text{SA}} + Y_g^{\text{SA}} \lambda = H_g . \quad (\text{A.102})$$

De maneira simplificada, pode-se considerar que $C_{p,g}^{\text{SA}} \approx C_{p,g}$. Assim, subtraindo-se (A.101) de (A.102) obtém-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} C_{p,g}(T_g^{\text{SA}} - T_{g,i}) + (Y_g^{\text{SA}} - Y_{g,i})\lambda &= 0 ; \\ Y_g^{\text{SA}} - Y_{g,i} &= -(C_{p,g}/\lambda)(T_g^{\text{SA}} - T_{g,i}) \end{aligned} \quad (\text{A.103})$$

A equação acima define uma curva no gráfico da carta psicrométrica. Devido à baixa influência de Y_g no termo $C_{p,g}$, tal curva se aproxima de uma reta, a qual passa pelos pontos $(T_{g,i}, Y_{g,i})$ e $(T_g^{\text{SA}}, Y_g^{\text{SA}})$, e cuja inclinação é $-C_{p,g}/\lambda$.

Para a temperatura de bulbo úmido pode-se imaginar uma massa gasosa em condições iguais às anteriores $(T_{g,i}, Y_{g,i})$, mas que contata um pequeno corpo líquido. Como a massa gasosa é bem maior que o corpo líquido, tal massa retém as suas condições iniciais. A massa líquida, devido ao processo de evaporação, tem a sua temperatura diminuída abaixo da temperatura do gás. Devido à diferença de temperatura que se estabelece entre as fases ocorre transferência de calor do gás para o líquido. Quando o equilíbrio é atingido, a energia perdida na evaporação é a mesma que o calor absorvido. A variação da entalpia específica da água no sistema é dada por:

$$\begin{aligned} \Delta H = H_v - H_l &= C_{p,v} T_g + \lambda - C_{p,l} T_l^{\text{BU}} , \\ &\approx \lambda . \end{aligned} \quad (\text{A.104})$$

Observe que, na última igualdade, escolhe-se desprezar os calores sensíveis, em virtude de o calor latente ser bem maior que estes. Considerando baixas taxas de evaporação, as formulações aproximadas são usadas e escreve-se o seguinte balanço de energia para o sistema:

$$\begin{aligned} n_w M M_w \Delta H &= -q^* ; \\ \frac{\mathcal{K} C_g M M_w}{\mathcal{R}} (Y_l^{\text{BU}} - Y_{g,i}) \lambda &= -h (T_l^{\text{BU}} - T_{g,i}) ; \\ Y_l^{\text{BU}} - Y_{g,i} &= -(h \mathcal{R} / \mathcal{K} C_g M M_w \lambda) (T_l^{\text{BU}} - T_{g,i}) . \end{aligned} \quad (\text{A.105})$$

No equilíbrio, as condições do gás no filme de vapor formado sobre o corpo líquido são $(T_l^{\text{BU}}, Y_l^{\text{BU}})$, isto é, as condições na temperatura de bulbo úmido. Tal temperatura é assim conhecida pois é a temperatura medida por um termômetro, imerso em uma corrente de ar, e que possui em seu bulbo um chumaço de

algodão umedecido com líquido. A equação acima também define uma reta na carta psicrométrica, porém de inclinação igual a $-(h\mathcal{R}/\mathcal{K}C_gMM_w\lambda)$.

Em ambos os casos Y_g^{SA} e Y_l^{BU} são umidades de saturação cujos valores estão associados à temperatura DA fase saturada, isto é, $Y_g^{SA} = Y^{sat}(T_g^{SA})$ e $Y_l^{BU} = Y^{sat}(T_l^{BU})$. Comparando (A.103) e (A.105) observa-se que, caso $T_g^{SA} = T_l^{BU}$, as inclinações das retas nessas equações serão iguais. Tal condição raramente é cumprida, mas é aproximadamente satisfeita no caso de sistemas ar-água [TREYBAL]. Portanto, tem-se que

$$\frac{C_{p,g}}{\lambda} \approx \frac{h\mathcal{R}}{\mathcal{K}C_gMM_w\lambda}. \quad (\text{A.106})$$

Alternativamente pode-se rescrever (A.106) como

$$\frac{h\mathcal{R}}{\mathcal{K}C_gMM_wC_{p,g}} = \frac{h}{k_Y C_{p,g}} \approx 1, \quad (\text{A.107})$$

em que utilizou-se

$$k_Y = \mathcal{K}C_gMM_w/\mathcal{R}. \quad (\text{A.108})$$

A.10 - Relação entre k_Y e h : Fator de Lewis

A relação entre k_Y e h passa intrinsicamente pelo Fator de Lewis. Observa-se que este termo é um grupo adimensional (GA). Na análise dimensional, correlações experimentais (expressões matemáticas) podem ser construídas de modo a se parametrizar um determinado GA em função dos outros [WELTY ET AL].

Serão introduzidos alguns GAs antes do desenvolvimento que se seguirá. O número de Lewis, Le , expressa a relação entre a difusividade de calor e de massa em sistemas onde ambos os tipos de transporte ocorrem. Para $Le = 1$ pode-se esperar que os perfis adimensionais de concentração e temperatura sejam iguais [KLOPPERS]. O número de Le pode ser escrito em função de outros dois grupos adimensionais, conhecidos como os números de Schmidt e de Prandtl:

$$Le = \frac{Sc}{Pr}. \quad (\text{A.109})$$

O número de Schmidt reflete a relação entre a difusividade de quantidade de movimento e a difusividade de massa. É expresso pela relação entre a viscosidade cinemática, ν , e o coeficiente de difusão D :

$$Sc = \frac{\nu}{D}. \quad (\text{A.110})$$

O número de Prandtl reflete a relação entre a difusividade térmica e a difusividade de massa. É expresso pela relação entre a viscosidade cinemática, ν , e o coeficiente de difusividade térmica α :

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha}. \quad (\text{A.111})$$

Substituindo (A.110) e (A.111) em (A.109) obtém-se

$$\text{Le} = \frac{\alpha}{D}. \quad (\text{A.112})$$

O número de Sherwood é definido pela razão entre as taxas de transporte convectivo e difusivo de massa:

$$\text{Sh} = \frac{\mathcal{K}L}{D}, \quad (\text{A.113})$$

em que \mathcal{K} é o coeficiente de transferência de massa e L é um comprimento característico do sistema. O número de Nusselt é definido pela razão entre as taxas de transporte convectivo e condutivo de calor:

$$\text{Nu} = \frac{hL}{k}, \quad (\text{A.114})$$

em que h é o coeficiente de transferência de calor e k é o coeficiente de condutividade térmica. Ambos os números de Sherwood e Nusselt estão relacionados com o transporte de massa e energia em regimes turbulentos [CUSSLER].

O número de Reynolds dá razão entre as forças de inércia e as forças viscosas para um determinado escoamento [WELTY ET AL]:

$$\text{Re} = \frac{UL}{\nu}, \quad (\text{A.115})$$

em que U é a velocidade do escoamento.

O Fator de Lewis, Le_f , expressa a razão entre as taxas de transferência de calor e de massa em um sistema. Ele pode ser escrito como a razão entre os dois números adimensionais: o número de Stanton para transferência de calor (St_h), e o número de Stanton para transferência de massa (St_m):

$$\text{Le}_f = \frac{\text{St}_h}{\text{St}_m}. \quad (\text{A.116})$$

St_h é um indicativo da relação entre a taxa de calor transferido para um sistema e a sua capacidade térmica. É definido como a razão entre os números de Nusselt, Reynolds, e Prandtl:

$$\text{St}_h = \frac{\text{Nu}}{\text{RePr}} = \frac{h\alpha}{Uk}. \quad (\text{A.117})$$

Pela definição da difusividade térmica, α , obtém-se

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p}; \quad (\text{A.118})$$

$$\frac{\alpha}{k} = \frac{1}{\rho C_p},$$

em que ρ é a massa específica do gás. Substituindo (A.118) em (A.117) obtém-se

$$St_h = \frac{h\alpha}{Uk} = \frac{h}{U\rho C_p}. \quad (\text{A.119})$$

St_m é um indicativo da relação entre a taxa de massa transferida para um sistema e a sua ‘capacidade mássica’, isto é, a sua capacidade de reter e transportar um determinado componente (‘solubilizado’, como o vapor de água em ar). É definido como a razão entre os números de Sherwood, Reynolds, e Schmidt:

$$St_m = \frac{Sh}{ReSc} = \frac{\mathcal{K}}{U}. \quad (\text{A.120})$$

Substituindo (A.117) e (A.120) em (A.116) obtém-se

$$Le_f = \frac{NuSc}{PrSh} = \frac{h}{\mathcal{K}\rho C_p}. \quad (\text{A.121})$$

Observe que, enquanto h e \mathcal{K} são parâmetros bem definidos nas expressões adimensionais, não foi encontrada em literatura alguma a especificação de qual ponto do sistema deve ser utilizado para fazer a medida de ρ e C_p . A correlação (A.126), a qual será utilizada para o cálculo de Le_f , foi determinada para a troca de calor entre um gás e uma superfície sólida [CUSSLER]. Assim sendo, consideram-se as propriedades do gás (e não do líquido) para determinar os valores de ρ e C_p . Deve-se observar ainda que ρ e C_p dependem da temperatura e da concentração de vapor e que tais valores (T e Y) variam ao longo da interface. Pelo mesmo motivo anterior, considera-se ser válido o uso das propriedades do gás no final da interface para a determinação de ρ e C_p . Assim, pode-se substituir a equação (A.143) do APÊNDICE A.11 em (A.121) obtém-se

$$Le_f = \frac{h(\mathcal{R} + Y_g^*)}{\mathcal{K}C_g M M_w (C_{p,g}^* + \alpha^*)}. \quad (\text{A.122})$$

Multiplicando-se o numerador e o denominador da equação acima por \mathcal{R} e utilizando-se (A.108) obtém-se

$$Le_f = \frac{h}{k_Y(C_{p,g}^* + \alpha^*)} \left(\frac{\mathcal{R} + Y_g^*}{\mathcal{R}} \right). \quad (\text{A.123})$$

(A.123) é a definição de Le_f para o sistema da torre de resfriamento, a qual é obtida simplesmente pela substituição das variáveis relativas a cada GA em (A.121). Pode-se obter ainda uma segunda expressão para Le_f através da análise dimensional, parametrizando tal termo em função dos outros GAs do sistema. Chilton e Colburn desenvolveram uma expressão para a transferência de calor entre um gás e uma parede em sistemas com fluxo forçado [KLOPPERS, CUSSLER]:

$$St_h = CRe^{-1/2}Pr^{-2/3} \quad (A.124)$$

em que C é uma constante de ajuste. Uma vez que uma correlação tenha sido levantada para certo processo é comum que uma analogia possa ser estabelecida para outros processos em um mesmo sistema. Dessa maneira, através de uma analogia com a equação anterior, obtém-se uma expressão caracterizando o transporte de massa nesse mesmo sistema [KLOPPERS, CUSSLER]:

$$St_m = CRe^{-1/2}Sc^{-2/3} \quad (A.125)$$

Substituindo (A.124) e (A.125) em (A.116) obtém-se

$$Le_f = \frac{St_h}{St_m} = \left(\frac{Sc}{Pr}\right)^{\frac{2}{3}} = Le^{\frac{2}{3}}. \quad (A.126)$$

Observou-se nas seções 4.4 e 4.5 como a injeção de massa através da interface influencia ambos os processos de troca de calor e de massa. Obviamente, as correlações (A.124) a (A.126) não levam em consideração tais efeitos e pode-se esperar que tais considerações sejam válidas somente para o caso de baixa troca de massa (injeção desprezível). Caso os efeitos da injeção não sejam desprezíveis, a forma funcional de Le_f para tal sistema provavelmente será diferente. Como não foram encontrados experimentos ou bibliografia que justifiquem o uso de outras correlações que abarquem o caso mais geral (com ou sem injeção de massa) tal correlação será considerada válida para o sistema da torre. Inserindo (A.126) em (A.123) obtém-se

$$\frac{h}{k_Y(C_{P,g}^* + \alpha^*)} \left(\frac{\mathcal{R} + Y_g^*}{\mathcal{R}}\right) = Le^{\frac{2}{3}}. \quad (A.127)$$

A.11 - Massa específica (ρ) e capacidade calorífica (C_p) do ar úmido

Será determinada uma expressão para a massa específica da mistura gasosa da corrente livre, isto é, aquela que está além da interface. Para uma mistura binária ar-água o número total de moles é igual à soma das quantidades molares de cada espécie:

$$n = n_a + n_w. \quad (A.128)$$

Pode-se então definir a massa total m_i , de cada componente i , através de sua massa molar MM_i :

$$m_i = n_i MM_i. \quad (A.129)$$

A massa total m é dada pela soma das massas individuais:

$$m = m_a + m_w. \quad (A.130)$$

Define-se agora a fração mássica w_i :

$$w_i = \frac{m_i}{m}. \quad (\text{A.131})$$

Rearranjando (A.131) e substituindo (A.129) obtém-se:

$$m = \frac{m_j}{w_j} = \frac{n_j MM_j}{w_j}. \quad (\text{A.132})$$

Dividindo-se (A.128) por (A.132) obtém-se:

$$\frac{n}{m} = \frac{n_a + n_w}{(n_j MM_j / w_j)} = \frac{n_a}{(n_a MM_a / w_a)} + \frac{n_w}{(n_w MM_w / w_w)} = \frac{w_a}{MM_a} + \frac{w_w}{MM_w}. \quad (\text{A.133})$$

Pode-se agora obter a massa molar média da mistura, que é o quociente entre a massa total pelo numero total de moles:

$$\overline{MM}_g = \frac{m}{n} = \frac{1}{\frac{w_a}{MM_a} + \frac{w_w}{MM_w}}. \quad (\text{A.134})$$

Observe que

$$Y_g = \frac{m_w}{m_a} = \frac{m_w/m}{m_a/m} = \frac{w_w}{w_a}. \quad (\text{A.135})$$

Assim, obtém-se

$$\overline{MM}_g = \frac{1}{w_a \left(\frac{1}{MM_a} + \frac{Y_g}{MM_w} \right)}. \quad (\text{A.136})$$

Porém, para o cálculo da massa molar média será considerada somente a fração de água na forma de vapor, e será desconsiderado o volume das gotículas de água. Assim, utiliza-se $Y_g = Y_g^*$ e obtém-se

$$\overline{MM}_g = \frac{1}{w_a \left(\frac{1}{MM_a} + \frac{Y_g^*}{MM_w} \right)}. \quad (\text{A.137})$$

Observa-se que a expressão acima é correta para $Y_g \leq Y_g^{\text{sat}}$ e aproximada caso contrário. Multiplicando o numerador e o denominador por MM_w obtém-se

$$\overline{MM}_g = \frac{MM_w}{w_a (\mathcal{R} + Y_g^*)}. \quad (\text{A.138})$$

Para um quilo de ar seco

$$\frac{1}{w_a} = \frac{m}{m_a} = \frac{1 + Y_g}{1}; \quad (\text{A.139})$$

$$\overline{MM}_g = MM_w \frac{1 + Y_g}{\mathcal{R} + Y_g^*}.$$

Calcula-se então a massa específica da mistura gasosa, considerando-a um gás ideal:

$$\begin{aligned} \rho &= C_g \overline{MM}_g, \\ &= C_g MM_w \frac{1 + Y_g}{\mathcal{R} + Y_g^*}. \end{aligned} \quad (\text{A.140})$$

Agora será determinada uma expressão para a capacidade calorífica do gás. Pela regra da cadeia, como H_g é uma função de Y_g e T_g

$$\frac{\partial H_g}{\partial x} = \frac{\partial H_g}{\partial T_g} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\partial H_g}{\partial Y_g} \frac{\partial Y_g}{\partial x}. \quad (\text{A.141})$$

Comparando-se (A.141) com (10) e (A.71) a expressão abaixo é obtida

$$C_P = (C_{P,g}^* + \alpha^*) / (1 + Y_g). \quad (\text{A.142})$$

O fator no denominador de (A.142) ‘normaliza’ o valor da capacidade calorífica do gás, pois o numerador é escrito para 1 + Y_g kg de gás. Multiplicando-se (A.140) e (A.142) encontra-se o seguinte produto

$$\rho C_P = \frac{C_g MM_w (C_{P,g}^* + \alpha^*)}{\mathcal{R} + Y_g^*}, \quad (\text{A.143})$$

o qual é utilizado na expressão (A.122).

A.12 - Correção de Bosnjakovic

A chamada “Correção de Bosnjakovic”, muito utilizada por diversos autores, considera a influência da injeção de massa no valor de n_w . Comparando o fluxo mássico de vapor através da interface obtido pelas formulações exata e aproximada obtém-se:

$$MM_w n_w = MM_w \mathcal{K} C_g \ln \left(\frac{Y_l^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) = \frac{MM_w \mathcal{K}' C_g}{\mathcal{R}} (Y_l^{\text{sat}} - Y_g^*). \quad (\text{A.144})$$

Assim, o mesmo valor de fluxo mássico de vapor pode ser associado a dois coeficientes de transferência de massa: \mathcal{K} , pela formulação exata, e \mathcal{K}' , pela formulação aproximada. Tal expressão não seria possível caso ambos coeficientes fossem iguais, daí a necessidade de se ter dois coeficientes de transferência de massa. Assim, obtém-se que

$$\frac{MM_w \mathcal{K}' C_g / \mathcal{R}}{MM_w \mathcal{K} C_g / \mathcal{R}} = \mathcal{R} \frac{\ln \left(\frac{Y_l^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right)}{Y_l^{\text{sat}} - Y_g^*}. \quad (\text{A.145})$$

Realiza-se agora duas manipulações para reescrever a equação acima de outra maneira. Primeiramente, observa-se que

$$\begin{aligned}
 Y_1^{\text{sat}} - Y_g^* &= Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R} - \mathcal{R} - Y_g^* , \\
 &= Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R} - (Y_g^* + \mathcal{R}) , \\
 &= (Y_g^* + \mathcal{R}) \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} - 1 \right) .
 \end{aligned} \tag{A.146}$$

Usando (A.146) o lado direito de (A.145) pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 &\mathcal{R} \ln \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) / (Y_1^{\text{sat}} - Y_g^*) , \\
 &= \left(\frac{\mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) \ln \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) / \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} - 1 \right) , \\
 &= \left(\frac{\mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) \mathbb{F}(\xi) ,
 \end{aligned} \tag{A.147}$$

em que utilizou-se

$$\begin{aligned}
 \mathbb{F}(\xi) &= \ln \xi / (\xi - 1) ; \\
 \xi &= \frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} .
 \end{aligned} \tag{A.148}$$

Em segundo lugar, utilizando-se (A.108) escreve-se a seguinte expressão:

$$\frac{MM_w \mathcal{K}' C_g / \mathcal{R}}{MM_w \mathcal{K} C_g / \mathcal{R}} = \frac{k'_Y}{k_Y} . \tag{A.149}$$

Substituindo-se (A.149) e (A.147) em (A.145) obtém-se

$$\begin{aligned}
 \frac{k'_Y}{k_Y} &= \left(\frac{\mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) \mathbb{F}(\xi) ; \\
 1 / \left[k_Y \left(\frac{\mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right) \right] &= \frac{\mathbb{F}(\xi)}{k'_Y} ;
 \end{aligned} \tag{A.150}$$

Inserindo (A.150) em (A.127) obtém-se

$$\frac{h}{k'_Y (C_{p,g}^* + \alpha^*)} = \frac{\text{Le}^{\frac{2}{3}}}{\mathbb{F}(\xi)} . \tag{A.151}$$

Por último, BOSNJAKOVIC ET AL não consideraram a possibilidade de o gás estar saturado. Assim, para $\Delta Y_g < 0$ e utilizando a função degrau obtém-se

$$C_{P,g}^* + \alpha^* = C_{P,g} ;$$

$$\frac{h}{k_Y C_{P,g}} = \frac{Le^{\frac{2}{3}}}{F(\xi)} . \quad (A.152)$$

A última expressão em (A.152) é conhecida como a “Correção de Bosnjakovic para Le_f ”.

A.13 - Adequação das equações envolvendo os coeficientes de transferência

Reescreve-se a expressão (A.127) para evidenciar os produtos dos coeficientes de transferência com a área superficial específica, A:

$$h = k_Y Le^{\frac{2}{3}} \frac{\mathcal{R}(C_{P,g}^* + \alpha^*)}{\mathcal{R} + Y_g^*} .$$

$$(hA) = (k_Y A) Le^{\frac{2}{3}} \frac{\mathcal{R}(C_{P,g}^* + \alpha^*)}{\mathcal{R} + Y_g^*} . \quad (A.153)$$

Considerando-se baixos valores de Y, pode-se fazer

$$\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{R} + Y_g^*} \approx \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{R}} = 1 ;$$

$$C_{P,g}^* = C_{P,a} + Y_g C_{P,v} - \mathcal{H}^* \Delta Y_g (C_{P,v} - C_{P,l}) \approx C_{P,a} ;$$

$$\alpha^* = \mathcal{H}^* \Delta H_w \frac{BY_g^{sat}}{(T_g + C)^2} \approx 0 ; \quad (A.154)$$

$$\frac{\mathcal{R}(C_{P,g}^* + \alpha^*)}{\mathcal{R} + Y_g^*} = \left(\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{R} + Y_g^*} \right) (C_{P,g}^* + \alpha^*) \approx C_{P,a} .$$

Observa-se não se está desconsiderando a presença de gotículas na corrente gasosa, mas sim desprezando todos os termos em que Y aparece multiplicado. Obtém-se, portanto, duas expressões para o coeficiente de troca térmica:

$$(hA) = \begin{cases} (k_Y A) Le^{\frac{2}{3}} \frac{\mathcal{R}(C_{P,g}^* + \alpha^*)}{\mathcal{R} + Y_g^*} ; & (E) \\ (k_Y A) Le^{\frac{2}{3}} C_{P,a} . & (S) \end{cases} \quad (A.155)$$

Reescrevem-se também as expressões para a taxa mássica de vapor e a taxa de calor através da interface, (A.73), utilizando-se a definição de k_Y , (A.108):

$$m = n_w MM_w A = \begin{cases} (k_Y A) \mathcal{R} \ln \left(\frac{Y_1^{\text{sat}} + \mathcal{R}}{Y_g^* + \mathcal{R}} \right); & \text{(E)} \\ (k_Y A) (Y_1^{\text{sat}} - Y_g^*). & \text{(S)} \end{cases} \quad (\text{A.156})$$

$$Q = q^* A = \begin{cases} (hA) \mathcal{F} (T_1 - T_g); & \text{(E)} \\ (hA) (T_1 - T_g), & \text{(S)} \end{cases}$$

Reescreve-se também a expressão para o termo a do Fator de Ackermann, (A.52):

$$a = \frac{n_w MM_w C_{p,v}}{h} = \frac{n_w MM_w A C_{p,v}}{hA} = \frac{m C_{p,v}}{(hA)}. \quad (\text{A.157})$$

A.14 - Cálculo de $\partial Y_g^{\text{sat}} / \partial T_g$ a partir da equação de Antoine

Para a equação (4), considerando-se $T = T_g$ tem-se que $Y^{\text{sat}} = Y_g^{\text{sat}}$. Derivando-se tal equação em relação T_g obtém-se, primeiro para a formulação exata:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} &= \frac{\frac{\partial P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} (P - P_w^{\text{sat}}) - P_w^{\text{sat}} \frac{\partial}{\partial T_g} (P - P_w^{\text{sat}})}{(P - P_w^{\text{sat}})^2} \mathcal{R}, \\ &= \frac{\frac{\partial P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} (P - P_w^{\text{sat}}) + \frac{\partial P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} P_w^{\text{sat}}}{(P - P_w^{\text{sat}})^2} \mathcal{R}, \\ &= \frac{\frac{\partial P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} P}{(P - P_w^{\text{sat}})^2} \mathcal{R}. \end{aligned} \quad (\text{A.158})$$

Multiplicando o numerador e o denominador de (A.158) por P_w^{sat} e rearranjando obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} &= \frac{1}{P_w^{\text{sat}}} \frac{\partial P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} \frac{P}{P - P_w^{\text{sat}}} \left[\frac{P_w^{\text{sat}}}{P - P_w^{\text{sat}}} \mathcal{R} \right], \\ &= \frac{\partial \ln P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} \frac{P}{P - P_w^{\text{sat}}} Y_g^{\text{sat}}. \end{aligned} \quad (\text{A.159})$$

P_w^{sat} é somado e subtraído no numerador de (A.159) e substitui-se (3) na derivada:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} &= \frac{\partial}{\partial T_g} \left(A - \frac{B}{T_g + C} \right) \left(\frac{P - P_w^{\text{sat}} + P_w^{\text{sat}}}{P - P_w^{\text{sat}}} \right) Y_g^{\text{sat}}, \\ &= \frac{B}{(T_g + C)^2} \left(\frac{P - P_w^{\text{sat}}}{P - P_w^{\text{sat}}} + \frac{P_w^{\text{sat}}}{P - P_w^{\text{sat}}} \right) Y_g^{\text{sat}}, \end{aligned} \quad (\text{A.160})$$

$$= \frac{BY_g^{\text{sat}}}{(T_g + C)^2} \left(1 + \frac{Y_g^{\text{sat}}}{\mathcal{R}} \right).$$

Para a formulação simplificada tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} &= \frac{\partial P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} \frac{1}{P} \mathcal{R} = \left(\frac{1}{P_w^{\text{sat}}} \frac{\partial P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} \right) \left(\frac{P_w^{\text{sat}}}{P} \mathcal{R} \right), \\ &= \frac{\partial \ln P_w^{\text{sat}}}{\partial T_g} Y_g^{\text{sat}} = \frac{B}{(T_g + C)^2} Y_g^{\text{sat}}. \end{aligned} \tag{A.161}$$

Fica-se então com

$$\frac{\partial Y_g^{\text{sat}}}{\partial T_g} = \begin{cases} BY_g^{\text{sat}}(1 + Y_g^{\text{sat}}/\mathcal{R})/(T_g + C)^2 ; & \text{(E)} \\ BY_g^{\text{sat}}/(T_g + C)^2 . & \text{(S)} \end{cases} \tag{A.162}$$

Observa-se que a formulação simplificada corresponde à seguinte aproximação na formulação exata:

$$1 + Y_g^{\text{sat}}/\mathcal{R} \approx 1. \tag{A.163}$$

APÊNDICE B - Análise Numérica

B.1 - Resolução numérica de sistemas de equações diferenciais

As equações diferenciais obtidas para o modelo constituem um sistema de EDPs, isto é, um sistema de equações diferenciais com derivadas parciais. Um sistema de EDOs é um sistema que possui somente derivadas ordinárias. Em um sistema comum de EDOs, as derivadas das funções são todas em relação à mesma variável. Toma-se, por exemplo, um sistema comum de $N + 1$ EDOs. Deseja-se encontrar as $N + 1$ funções $z^{(j)}$, no domínio $x_i \leq x \leq x_f$, e que satisfaçam:

$$\begin{aligned} \frac{dz^{(j)}}{dx} &= f^{(j)}(z^{(1)}, z^{(2)}, z^{(3)}, \dots, z^{(N)}, z^{(N+1)}, x); \\ z^{(j)}(x_i) &= z_i^{(j)}; \\ 1 &\leq j \leq N + 1. \end{aligned} \tag{B.1}$$

Observe que as funções $f^{(j)}$ são conhecidas. A notação com parênteses em sobrescrito é utilizada para nomear e distinguir as diferentes funções $z^{(j)}$ e $f^{(j)}$. Assim como no sistema da torre de resfriamento, o sistema acima é um Problema de Valor Inicial: além das EDOs nos é fornecido o valor inicial de cada função na extremidade inicial do domínio, isto é, $z^{(j)}(x_i) = z_i^{(j)}$. Dentre os sistemas comuns de EDOs, o mais simples é o com uma única equação:

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dx} &= f(z, x); \\ z(x_i) &= z_i. \end{aligned} \tag{B.2}$$

Todo o desenvolvimento neste e nos outros APÊNDICES será baseado nesse sistema de uma equação. A extensão para sistemas com mais de uma equação segue através aplicação dos algoritmos aqui apresentados para as equações de maneira simultânea.

A base dos métodos numéricos reside em obter valores para a função z em determinados pontos do domínio, ou seja, realizar uma amostragem dos valores da função de modo a determinar o seu comportamento. Inicialmente determinam-se os $N + 1$ pontos do domínio que serão utilizados para tal amostragem:

$$\begin{aligned} x &= \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_{N+1}\} = \{x_k\}; \\ 1 &\leq k \leq N + 1. \end{aligned} \tag{B.3}$$

Observe que o domínio, antes um intervalo contínuo, agora é substituído por um conjunto de $N + 1$ pontos. Quanto mais finamente dividido for o domínio, maior é a resolução do método (mais exata é a solução obtida) e maior é o custo computacional. Neste trabalho utilizou-se

$$x_{lk+1} - x_{lk} = \Delta x = \frac{x_f - x_i}{N}, \quad (\text{B.4})$$

isto é, a distancia entre dois pontos consecutivos do domínio (o ‘tamanho do passo’) é constante e existem N intervalos no domínio. Observe que $x_1 = x_i$ e $x_{N+1} = x_f$. Similarmente, obtém-se um conjunto de valores da função z:

$$\begin{aligned} z &= \{z_{lk}\}; \\ 1 &\leq lk \leq N + 1, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

sendo que cada z_{lk} está associado ao seu valor de x_{lk} correspondente. Observe que $z_1 = z_i$.

Serão utilizados quatro métodos numéricos para a resolução de sistemas comuns de EDOs:

- Método de Euler;
- Método do Ponto-médio;
- Método de Bulirsch-Stoer;
- Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem.

B.2 - Método de Euler e método do Ponto-médio

O método de Euler é o método mais simples para a resolução de sistemas de EDOs (e o que apresenta menor exatidão). Utilizando uma aproximação de diferenças finitas pode-se escrever a derivada no ponto x_{lk} como sendo

$$\left(\frac{dz}{dx}\right)_{(z_{lk}, x_{lk})} = f(z_{lk}, x_{lk}) \approx \frac{z_{lk+1} - z_{lk}}{\Delta x}. \quad (\text{B.6})$$

Fazendo um rearranjo da equação acima obtém-se

$$z_{lk+1} \approx z_{lk} + \Delta x \cdot f(z_{lk}, x_{lk}). \quad (\text{B.7})$$

O algoritmo para a determinação da função z no domínio (discreto) é dado então por

$$\begin{aligned} z_1 &= z_i; \\ z_{lk+1} &= z_{lk} + \Delta x \cdot f(z_{lk}, x_{lk}). \\ 1 &\leq lk \leq N. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

O método de Euler usa a ‘aproximação de diferença progressiva’ da derivada primeira. O método do Ponto-médio (PM) usa a ‘aproximação de diferença centrada’ da derivada primeira:

$$\left(\frac{dz}{dx}\right)_{(z_{lk}, x_{lk})} = f(z_{lk}, x_{lk}) \approx \frac{z_{lk+1} - z_{lk-1}}{2\Delta x}; \quad (\text{B.9})$$

$$z_{\mathbb{k}+1} \approx z_{\mathbb{k}-1} + 2\Delta x \cdot f(z_{\mathbb{k}}, x_{\mathbb{k}}).$$

No método do PM, para determinar o valor da função em $x_{\mathbb{k}+1}$ utilizam-se os valores da função em $x_{\mathbb{k}-1}$ e em $x_{\mathbb{k}}$. Isso gera um problema, pois inicialmente dispomos de apenas um valor da função, $z_1 = z_i$. Pode-se contornar tal dificuldade gerando z_2 pelo método de Euler. Dessa maneira 2 valores $z_{\mathbb{k}}$ consecutivos são obtidos. A obtenção dos outros valores $z_{\mathbb{k}}$ prossegue utilizando a nova aproximação da derivada. O algoritmo do método é dado por

$$\begin{aligned} z_1 &= z_i ; \\ z_2 &= z_1 + \Delta x \cdot f(z_1, x_1) ; \\ z_{\mathbb{k}+1} &= z_{\mathbb{k}-1} + 2\Delta x \cdot f(z_{\mathbb{k}}, x_{\mathbb{k}}) ; \\ 2 &\leq \mathbb{k} \leq N ; \\ z_f &= [z_{N+1} + z_N + \Delta x \cdot f(z_{N+1}, x_{N+1})]/2 . \end{aligned} \tag{B.10}$$

A última igualdade em (B.10) decorre de uma correção que elimina uma componente oscilatória do erro [KIRPEKAR].

B.3 - Método de Bulirsch-Stoer

O erro e do método do PM em x_f é da forma

$$e = c_1(\Delta x)^2 + c_2(\Delta x)^4 + c_3(\Delta x)^6 + \dots, \tag{B.11}$$

isto é, uma série das potências pares de Δx [KIUSALAAS]. Para $\Delta x < 1$, os primeiros termos da série são os termos dominantes (maiores termos). Pode-se eliminar termos da expressão do erro, refinando assim a solução tanto quanto se desejar. A tal processo dar-se-á o nome de extrapolação. Caso o método do PM fosse utilizado com dois tamanhos de passo, $(\Delta x)^{(1)} > (\Delta x)^{(2)}$, obter-se-ia:

$$\begin{aligned} z_f^{(1)} &= z_f^* + e^{(1)} \approx z_f^* + c_1 [(\Delta x)^{(1)}]^2 ; \\ z_f^{(2)} &= z_f^* + e^{(2)} \approx z_f^* + c_1 [(\Delta x)^{(2)}]^2 , \end{aligned} \tag{B.12}$$

em que z_f^* é o valor correto de z em x_f e $z_f^{(1)}$ e $z_f^{(2)}$ são os valores obtidos utilizando $(\Delta x)^{(1)}$ e $(\Delta x)^{(2)}$. Somente o primeiro termo da série do erro foi mantido e os termos restantes, de menor valor, foram descartados. Subtraindo-se a primeira igualdade da segunda em (B.12) obtém-se

$$z_f^{(2)} - z_f^{(1)} \approx c_1 \left\{ [(\Delta x)^{(2)}]^2 - [(\Delta x)^{(1)}]^2 \right\}. \tag{B.13}$$

Rearranjando-se (B.13) obtém-se

$$\begin{aligned}
c_1 &\approx \frac{z_f^{(2)} - z_f^{(1)}}{[(\Delta x)^{(2)}]^2 - [(\Delta x)^{(1)}]^2}, \\
&\approx \frac{1}{[(\Delta x)^{(2)}]^2} \cdot \frac{z_f^{(2)} - z_f^{(1)}}{1 - [(\Delta x)^{(1)}/(\Delta x)^{(2)}]^2}; \\
c_1 [(\Delta x)^{(2)}]^2 &\approx \frac{z_f^{(2)} - z_f^{(1)}}{1 - [(\Delta x)^{(1)}/(\Delta x)^{(2)}]^2}.
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Substitui-se (B.14) em (B.12) e obtém-se:

$$\begin{aligned}
z_f^* &= z_f^{(2)} - e^{(2)}, \\
&\approx z_f^{(2)} - c_1 [(\Delta x)^{(2)}]^2, \\
&\approx z_f^{(2)} - \frac{z_f^{(2)} - z_f^{(1)}}{1 - [(\Delta x)^{(1)}/(\Delta x)^{(2)}]^2}.
\end{aligned} \tag{B.15}$$

Para o valor de z_f obtido em (B.12) o termo dominante no erro é aquele que acompanha a primeira potência par de Δx , pois geralmente utiliza-se $\Delta x < 1$. Como Δx está elevado ao quadrado na expressão do erro, diz-se que o erro é de ordem quadrática, $O(\Delta x^4)$, ou seja, decai com o quadrado do refinamento da malha (diminuição de Δx). Ao se obter o valor de z_f pelo método do PM para dois valores diferentes de passo, um dos termos do erro pode ser eliminado. O valor de z_f obtido em (B.15) é um valor refinado em relação a (B.12), isto é, é uma melhor aproximação para z_f^* que $z_f^{(2)}$ e $z_f^{(1)}$ e o erro nesse caso é de quarta ordem, $O(\Delta x^4)$. Caso z_f fosse obtido para três valores diferentes de passo, $(\Delta x)^{(1)} > (\Delta x)^{(2)} > (\Delta x)^{(3)}$, o método de extrapolação poderia ser utilizado duas vezes. Assim dois termos da expressão do erro seriam eliminados e um resultado com precisão de sexta ordem seria obtido, $O(\Delta x^6)$.

Com \mathbb{L} valores z_f calculados (para \mathbb{L} tamanhos de passo diferentes) pode-se eliminar $\mathbb{L} - 1$ termos no erro, e obtém-se um erro que é de ordem $2\mathbb{L}$, $O(\Delta x^{2\mathbb{L}})$. A eficiência da extrapolação utilizando-se o método do PM torna-se clara: a cada termo do erro eliminado o erro aumenta duas ordens de magnitude. Isso significa que uma grande precisão pode ser obtida com um baixo esforço computacional.

O refinamento das soluções pelo método de extrapolação acima é válido somente para o valor referente ao ponto x_f . O método de Bulirsch-Stoer (BS) permite que as soluções obtidas em todos os pontos $x_{\mathbb{k}}$ do nosso domínio (discreto) sejam refinadas, e não só em x_f . Neste método, os intervalos entre dois $x_{\mathbb{k}}$ consecutivos são subdivididos e aplica-se o método do PM para se obter $z_{\mathbb{k}+1}$ utilizando $z_{\mathbb{k}}$ como valor inicial. O valor de $z_{\mathbb{k}+1}$ é obtido para diferentes valores do passo $(\Delta x)^{(\mathbb{L})}$:

$$(\Delta x)^{(\mathbb{L})} = \Delta x / \mathcal{N}^{(\mathbb{L})}, \tag{B.16}$$

em que $\mathcal{N}^{(\mathbb{I})}$ é o número de subdivisões do intervalo. Realizando a extrapolação dos diferentes valores $z_{\mathbb{k}+1}$ obtidos pode-se ter uma estimativa tão precisa quanto se desejar dos valores da função z ao longo do domínio. Neste trabalho será utilizada a seguinte sequência para o número de subdivisões do intervalo [KIRPEKAR]:

$$\begin{aligned} \{\mathcal{N}^{(\mathbb{I})}\} &= \{2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, \dots\}; \\ \mathcal{N}^{(\mathbb{I})} &= 2\mathbb{I}; \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

$$\mathbb{I} = \{\mathbb{N}\} = \{1, 2, 3, 4, 5, \dots\}.$$

A seguinte notação é introduzida: o valor de $z_{\mathbb{k}+1}$ obtido para $\mathcal{N}^{(\mathbb{I})}$ subdivisões de Δx e que foi refinado por extrapolação para um valor de ordem $2\mathbb{m}$ é representado por $z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})}$. Portanto, para se obter um termo de ordem $2(\mathbb{m} + 1)$ com $\mathcal{N}^{(\mathbb{I})}$ subdivisões pode-se realizar a extrapolação com dois termos de mesma ordem ($2\mathbb{m}$) porém com diferentes subdivisões de Δx ($\mathcal{N}^{(\mathbb{I})}$ e $\mathcal{N}^{(\mathbb{I}-1)}$). Os dois termos de ordem $2\mathbb{m}$ são representados por

$$\begin{aligned} z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}-1, \mathbb{m})} &= z_{\mathbb{k}+1}^* + e^{(\mathbb{I}-1, \mathbb{m})} \approx z_{\mathbb{k}+1}^* + c_{\mathbb{m}} [(\Delta x)^{(\mathbb{I}-1)}]^{2\mathbb{m}}; \\ z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})} &= z_{\mathbb{k}+1}^* + e^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})} \approx z_{\mathbb{k}+1}^* + c_{\mathbb{m}} [(\Delta x)^{(\mathbb{I})}]^{2\mathbb{m}}. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Novamente, os termos de ordem superior a $2\mathbb{m}$ foram desprezados na expressão do erro. Pelo mesmo procedimento realizado anteriormente obtém-se

$$z_{\mathbb{k}+1}^* \approx z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}, \mathbb{m}+1)} = z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})} - \frac{z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})} - z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}-1, \mathbb{m})}}{1 - d^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})}}, \quad (\text{B.19})$$

em que utilizou-se

$$d^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})} = \left[\frac{(\Delta x)^{(\mathbb{I}-1)}}{(\Delta x)^{(\mathbb{I})}} \right]^{2\mathbb{m}} = \left(\frac{\mathbb{I}}{\mathbb{I}-1} \right)^{2\mathbb{m}}. \quad (\text{B.20})$$

A equação (B.19) sugere a construção da Tabela B.1 abaixo, que remete à ordem de obtenção dos elementos $z_{\mathbb{k}+1}^{(\mathbb{I}, \mathbb{m})}$. A Tabela B.1 é construída da esquerda para a direita e de cima para baixo. O primeiro termo, $z_{\mathbb{k}+1}^{(1,1)}$, é obtido pelo método do PM para a subdivisão de Δx em 2 intervalos iguais. Em seguida obtém-se o segundo termo, $z_{\mathbb{k}+1}^{(2,1)}$, com a subdivisão de Δx em 4 intervalos iguais. O terceiro termo, $z_{\mathbb{k}+1}^{(2,2)}$, é obtido utilizando extrapolação com os dois valores obtidos anteriormente. Os valores cuja obtenção é computacionalmente mais custosa são aqueles da primeira coluna, que são obtidos pelo método do PM para diferentes valores de \mathbb{I} .

Tabela B.1: Elementos $z_{lk+1}^{(l,m)}$.

l	$\mathcal{N}^{(l)}$	$O(\Delta x^2)$	$O(\Delta x^4)$	$O(\Delta x^6)$	$O(\Delta x^{10})$	$O(\Delta x^{12})$
1	2	$z_{lk+1}^{(1,1)}$	-	-	-	-
2	4	$z_{lk+1}^{(2,1)}$	$z_{lk+1}^{(2,2)}$	-	-	-
3	6	$z_{lk+1}^{(3,1)}$	$z_{lk+1}^{(3,2)}$	$z_{lk+1}^{(3,3)}$	-	-
4	8	$z_{lk+1}^{(4,1)}$	$z_{lk+1}^{(4,2)}$	$z_{lk+1}^{(4,3)}$	$z_{lk+1}^{(4,4)}$	-
5	10	$z_{lk+1}^{(5,1)}$	$z_{lk+1}^{(5,2)}$	$z_{lk+1}^{(5,3)}$	$z_{lk+1}^{(5,4)}$	$z_{lk+1}^{(5,5)}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots

As outras colunas são obtidas por extrapolação dos valores obtidos anteriormente. Como a extrapolação é uma operação bem menos custosa (computacionalmente) que o método do PM, caso algum valor $z_{lk+1}^{(l,1)}$ (da primeira coluna) seja obtido, calculam-se todos os outros valores da linha até o valor da diagonal, $z_{lk+1}^{(l,l)}$. Os valores das diagonais são os valores mais precisos em cada linha da Tabela B.1 e são, portanto, aqueles de maior interesse. Como os valores calculados para z_{lk+1} devem se aproximar do valor real (correto), z_{lk+1}^* , fazendo a diferença entre dois valores diagonais consecutivos (os valores mais precisos) obtém-se uma estimativa do erro para o valor diagonal $z_{lk+1}^{(l,l)}$:

$$e_{lk+1}^{(l,l)} = z_{lk+1}^{(l,l)} - z_{lk+1}^{(l-1,l-1)}. \quad (B.21)$$

O número de zeros à direita da vírgula em $e_{lk+1}^{(l,l)}$ é uma estimativa do número de casas decimais corretas em $z_{lk+1}^{(l,l)}$. Considerando que tal valor diagonal seja o último valor calculado para z_{lk+1} , este valor é a melhor aproximação que dispomos para z_{lk+1}^* , e ele será aceito caso o seu erro seja menor que uma tolerância pré-especificada, geralmente da ordem de 10^{-6} . No caso do sistema de equações da torre de resfriamento utiliza-se a temperatura do gás e da água para o controle do valor do erro. Porém, devido ao fato de termos dividido nosso domínio em linhas e colunas, tem-se um número de equações e o erro obtido deverá ser uma média dos valores do erro em cada equação. Para a fase gás, por exemplo, ter-se-á $M + 1$ equações para a temperatura e, portanto, $M + 1$ termos de erro, e_i . Nesse caso, calcula-se o erro médio quadrático, e_{RMS} :

$$e_{RMS} = \sqrt{\frac{\sum e_i^2}{M + 1}}. \quad (B.22)$$

Deve-se ter em mente que o método de extrapolação apresentado é tão mais eficiente quanto a função f (a derivada da função z) for suave [KIUSALAAS].

B.4 - Método de Runge-Kutta de 4ª ordem

O método de Runge-Kutta de 4ª ordem (RK4) é um dos mais conhecidos e utilizados métodos de resolução de EDOs e foi utilizado nos trabalhos de MILOSAVLJEVIC ET AL, KLOPPERS e HERNÁNDEZ-CALDORÓN ET AL. A dedução do método não será abordada neste trabalho e somente o algoritmo para obtenção dos $\{z_{lk}\}$ será apresentado:

$$\begin{aligned}z_1 &= z_i ; \\K_{1, lk+1} &= \Delta x \cdot f(z_{lk}, x_{lk}) ; \\K_{2, lk+1} &= \Delta x \cdot f\left(z_{lk} + K_{1, lk+1}/2, x_{lk} + \Delta x/2\right) ; \\K_{3, lk+1} &= \Delta x \cdot f\left(z_{lk} + K_{2, lk+1}/2, x_{lk} + \Delta x/2\right) ; \\K_{4, lk+1} &= \Delta x \cdot f\left(z_{lk} + K_{3, lk+1}, x_{lk} + \Delta x\right) ; \\z_{lk+1} &= \left(K_{1, lk+1} + 2K_{2, lk+1} + 2K_{3, lk+1} + K_{4, lk+1}\right)/6 ; \\1 &\leq lk \leq N .\end{aligned}\tag{B.23}$$

Observe que, para a obtenção de z_{lk+1} , o método de RK4 avalia a derivada da função z (função f) em ‘pontos’ que estão além de x_{lk} . Para um sistema de EDOs com somente uma variável a avaliação das $f^{(j)}$ em tais pontos é possível já que as soluções das funções $z^{(j)}$ são obtidas simultaneamente para tal sistema. Porém, para o caso sistema de equações da torre de resfriamento isso gerará uma complicação na resolução do sistema, a qual é abordada no APÊNDICE C.

APÊNDICE C - Método das Linhas e Esquema de Resolução do Sistema

C.1- Método das linhas

As equações diferenciais obtidas para o modelo constituem um sistema de EDPs. O Método das Linhas converte um sistema de EDPs em um sistema de EDOs. A divisão do domínio em linhas e colunas, como mostra a Figura 4, nos ajudará a realizar a transformação desejada.

O sistema de EDPs mostrado na Tabela 1 pode ser representado utilizando-se as seguintes funções genéricas:

$$\begin{aligned}\frac{\partial N_l}{\partial y^*} &= d(N_l, T_l, Y_g, T_g) = d^*(x^*, y^*); \\ \frac{\partial T_l}{\partial y^*} &= e(N_l, T_l, Y_g, T_g) = e^*(x^*, y^*); \\ \frac{\partial Y_g}{\partial x^*} &= f(N_l, T_l, Y_g, T_g) = f^*(x^*, y^*); \\ \frac{\partial T_g}{\partial x^*} &= g(N_l, T_l, Y_g, T_g) = g^*(x^*, y^*); \end{aligned} \tag{C.1}$$

isto é, as derivadas espaciais são funções das quatro VIs. Como as quatro VIs são funções da posição x^* e y^* , pode-se considerar que as derivadas possuem uma forma funcional parametrizada por essas duas variáveis. As condições de contorno destas VIs são

$$\begin{aligned}N_l(x^*, 0) &= N_{l,i}, \\ T_l(x^*, 0) &= T_{l,i}, \\ Y_g(0, y^*) &= Y_{g,i}; \\ T_g(0, y^*) &= T_{g,i}, \end{aligned} \tag{C.2}$$

ou seja, os valores das VIs na borda superior do domínio ($y^* = 0$) e na borda esquerda do domínio ($x^* = 0$) são os seus valores na entrada do equipamento. No método das linhas transformam-se as funções de duas ou mais variáveis em funções de uma variável. Para uma divisão do domínio com $M + 1$ linhas e $N + 1$ colunas ter-se-á

$$\begin{aligned}x^* &= \left\{0, \frac{1}{N}, \frac{2}{N}, \dots, \frac{N-1}{N}, 1\right\} = \{x_1^*, x_2^*, x_3^*, \dots, x_N^*, x_{N+1}^*\}; \\ y^* &= \left\{0, \frac{1}{M}, \frac{2}{M}, \dots, \frac{M-1}{M}, 1\right\} = \{y_1^*, y_2^*, y_3^*, \dots, y_M^*, y_{M+1}^*\}. \end{aligned} \tag{C.3}$$

Utilizam-se as propriedades do ar para exemplificar a transformação. Dentre as EDPs obtidas, as equações para Y_g e T_g são derivadas parciais com relação à x^* . Criam-se $M + 1$ funções de x^* a partir de cada uma destas VIs:

$$\begin{aligned} Y_g^{(i)}(x^*) &= Y_g(x^*, y_i^*); \\ T_g^{(i)}(x^*) &= T_g(x^*, y_i^*); \\ 1 &\leq i \leq M + 1. \end{aligned} \tag{C.4}$$

Observa-se então que

$$\left(\frac{\partial Y_g}{\partial x^*}\right)_{(x^*, y_i^*)} = \left(\frac{\partial Y_g^{(i)}}{\partial x^*}\right)_{(x^*)} = \left(\frac{dY_g^{(i)}}{dx^*}\right)_{(x^*)} = f(x^*, y_i^*) = f^{(i)}(x^*). \tag{C.5}$$

Explica-se a equação (C.5): com a transformação realizada, a derivada parcial de Y_g no ponto (x^*, y_i^*) (função de duas variáveis) pode ser expressa como a derivada parcial de $Y_g^{(i)}$ no ponto x^* (função de uma variável). Como $Y_g^{(i)}$ é uma função de uma variável, a sua derivada parcial é equivalente a uma derivada ordinária. Analogamente à divisão do domínio em linhas, a criação das $M + 1$ funções $Y_g^{(i)}$ equivale à criação das $M + 1$ funções $f^{(i)}$, que representam os valores das derivadas parciais de Y_g na direção x^* em cada linha do domínio. Repetindo o procedimento para cada uma das VIs obtém-se o seguinte sistema de EDOs:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1^{(j)}}{dy^*} &= d^{(j)}(y^*); \\ \frac{dT_1^{(j)}}{dy^*} &= e^{(j)}(y^*); \\ 1 &\leq j \leq N + 1; \\ \frac{dY_g^{(i)}}{dx^*} &= f^{(i)}(x^*); \\ \frac{dT_g^{(i)}}{dx^*} &= g^{(i)}(x^*); \\ 1 &\leq i \leq M + 1. \end{aligned} \tag{C.6}$$

Intuitivamente, o método das linhas consiste em avaliar as derivadas espaciais das VIs (Tabela 1) ao longo de uma linha ou coluna do domínio (observadas as direções das derivadas parciais em cada caso). Dessa maneira o sistema de EDPs pode ser visto como um sistema de EDOs a ser resolvido simultaneamente através de um dos métodos numéricos apresentados.

C.2 - Esquema de resolução do sistema

Em um sistema comum de EDOs, todas as derivadas e funções são parametrizadas pela mesma variável, o que não é o caso do sistema obtido. As EDOs das propriedades da água são funções de y^* enquanto as EDOs das propriedades do ar são funções em x^* . Assim, um esquema de resolução deve ser seguido, de modo que as técnicas apresentadas nas seções anteriores possam ser devidamente utilizadas. Inicialmente, possuímos os valores das VIs do ar nos pontos da borda esquerda do domínio. Para a água, possuímos os valores das VIs na borda superior do domínio. A Figura C.1 ilustra a situação descrita. A orientação dos eixos é a mesma que aquela apresentada na Figura 6. Pontos onde as propriedades da água e do ar são conhecidas são indicados, respectivamente, por um 'x' azul e um '+' preto. Pontos em que todos os parâmetros são conhecidos são indicados por um 'o' vermelho.

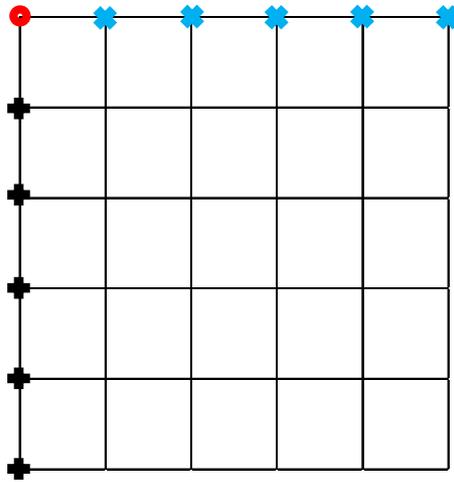


Figura C.1: Relação dos pontos onde as VIs da água e do ar são conhecidas.

A solução do sistema pode ser 'avançada' através dos métodos numéricos para a solução de sistemas de EDOs: a partir dos pontos iniciais nos quais os valores das VIs são conhecidos pode-se estimar os valores das VIs nos pontos vizinhos. Porém, os métodos numéricos apresentados só permitem que as soluções das propriedades da água sejam avançadas na vertical (ao longo das colunas) e as do ar na horizontal (ao longo das linhas). Além disso, só se pode avançar as soluções das VIs a partir de pontos cujas propriedades estejam completamente determinadas. Inicialmente, somente o ponto $(0,0)$ possui informação de todas as VIs.

A partir desse ponto inicial pode-se resolver os valores das VIs do ar ou da água na primeira linha ou coluna do nosso domínio, respectivamente. A Figura C.2 ilustra a progressão da solução para ambos os casos, linha superior e inferior correspondendo ao avanço das soluções das VIs para os três primeiros valores de x^* e y^* , respectivamente.

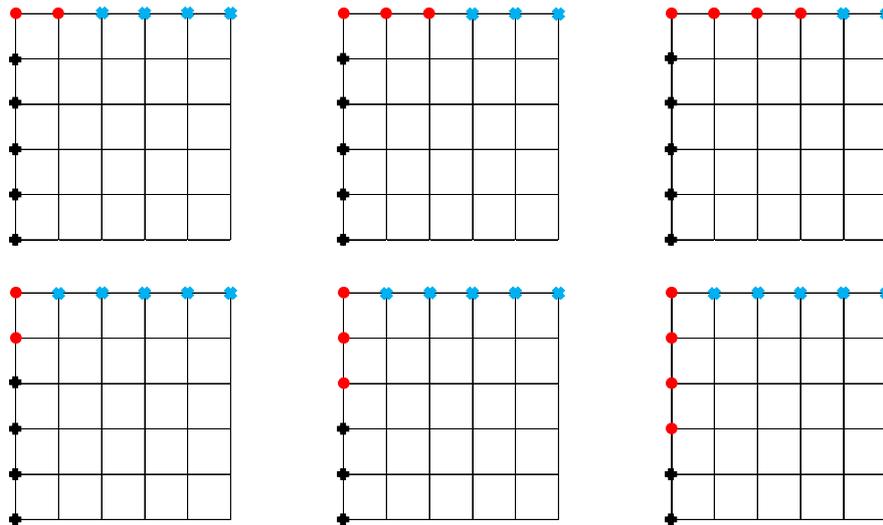


Figura C.2: Progressão da resolução do sistema para a primeira linha ou coluna.

Ao avançar a solução das VIs do ar na 1ª linha determina-se completamente o sistema nesses pontos. Assim, pode-se avaliar as derivadas espaciais das propriedades da água em cada um desses pontos, o que por sua vez permite o avanço das soluções da água em cada coluna. De maneira semelhante, caso as soluções das VIs da água sejam determinadas para a 1ª coluna, pode-se então avançar as VIs do ar em cada uma das linhas a partir desses pontos na primeira coluna nos quais a solução do sistema está completamente determinada.

Pode-se, de maneira alternada, avançar as propriedades da água e do ar, para determinar os valores das VIs no domínio. Determinar-se-á, inicialmente, as propriedades do ar na primeira linha: avança-se a solução das EDOs do ar a partir do valor inicial de entrada no ponto $(0,0)$ até a última coluna. Obtidas tais propriedades do ar avança-se a solução das propriedades da água em cada coluna. Observa-se que, neste segundo passo, são determinados os valores de cada uma das funções $N_1^{(j)}$ e $T_1^{(j)}$ em $y^* = y_2^*$, enquanto no primeiro passo foram determinadas completamente (para todos os x^*) as funções $Y_g^{(1)}$ e $T_g^{(1)}$.

Ao avançar as propriedades do líquido em todas as colunas (no segundo passo) obtém-se uma linha em que, novamente, as propriedades do ar não estão determinadas (exceto pelo primeiro ponto). Repetem-se os procedimentos para avançar as propriedades do ar e do líquido, obtendo assim os valores das VIs no domínio. A Figura C.3 ilustra a progressão da resolução do sistema: a primeira figura corresponde à informação inicial das bordas do domínio, igual à Figura C.1; as outras três figuras correspondem ao avanço das soluções das VIs para as três primeiras rodadas de cálculo:

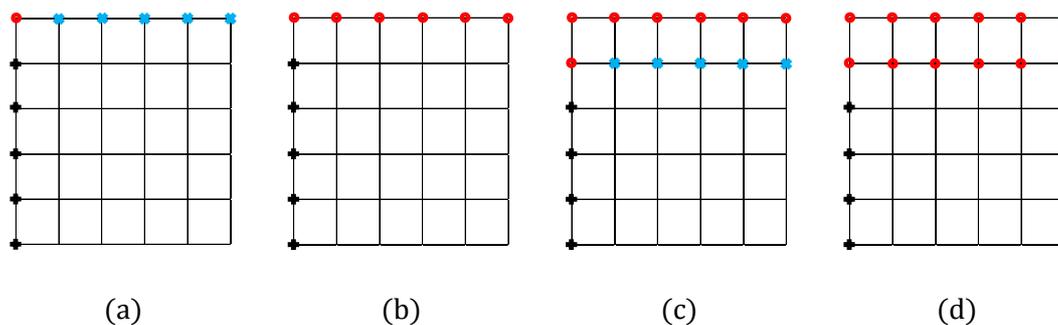


Figura C.3: Progressão da resolução do sistema.

Quando todos os pontos do sistema forem obtidos pode-se prosseguir à obtenção dos valores de saída das propriedades de cada fase: na saída tanto o ar quanto a água tem suas diferentes 'linhas' e 'colunas' misturadas e o valor das VIs é uma combinação dos os valores finais de cada linha e coluna.

No caso ilustrado na Figura C.3 o ar foi escolhido para ter as suas propriedades completamente determinadas linha a linha: as VIs do ar são determinadas da figura (a) para (b) e da figura (c) para (d). Nessa mesma Figura, as propriedades da água são determinadas simultaneamente para todas as colunas, porém avançando-se um valor de y^* por vez, da figura (b) para (c). Para tal situação denomina-se x^* a direção secundária e y^* a direção principal, ou pode-se chamar o ar de componente principal e a água de componente secundário. Obviamente pode-se trocar as direções principal e secundária: nesse caso as propriedades da água são determinadas completamente, coluna por coluna, enquanto as propriedades do ar são determinadas simultaneamente, porém avançando um valor de x^* de cada vez.

Na direção principal serão testados a maioria dos diferentes métodos de resolução de EDOs apresentados, excluindo-se o método de RK4. A isso deve-se o fato de que tal método requer a avaliação das EDOs em pontos do nosso domínio discreto nos quais algumas das VIs ainda não foram determinadas. Para o nosso sistema de EDOs, em que as equações são funções ou de y^* ou de x^* , somente na direção secundária a avaliação de tais valores é possível.

A observação da Figura C.3 explica tal situação: a solução das VIs do ar ocorre sempre em uma linha na qual as VIs da água já foram determinadas. Nessa linha pode-se determinar completamente os valores das propriedades da água por um processo de interpolação polinomial (para x^* entre 0 e 1, ou seja, não só nos valores discretos do domínio). Assim, a avaliação das derivadas espaciais das VIs do ar nesta linha (necessária ao método de RK4) é trivial, já que dispomos dos valores das VIs da água em qualquer ponto. Na direção principal, o avanço das VIs da água por tal método similarmente requereria a avaliação das VIs do ar, as quais ainda não teriam sido determinadas segundo o esquema proposto.

APÊNDICE D - Interpolação com Polinômios Cúbicos

A interpolação com polinômios cúbicos permite que as VIs sejam determinadas em um ponto qualquer do nosso domínio, e não somente para os valores discretos de x^* e y^* . Para a explicação do método será considerado novamente o sistema com somente uma EDO, apresentado no APÊNDICE B, para o qual deseja-se determinar a função z em $x_i \leq x \leq x_f$. Para uma divisão do domínio com $N + 1$ valores de x obtém-se o intervalo $[x_i, x_f]$ com N subdivisões.

Resolvido o sistema de EDOs por um método numérico qualquer obtém-se um conjunto de $N + 1$ pares ordenados, $\{z_{lk}, x_{lk}\}$. A idéia por detrás deste método consiste em conectar tais pares através de polinômios cúbicos, os quais representarão a função em cada um destes intervalos. A vantagem por detrás do uso de polinômios cúbicos está no fato de que poderemos obter representações cujas derivadas são contínuas (até a 2ª derivada) como veremos a seguir.

Assim, para cada uma das subdivisões será considerado um polinômio cúbico $p^{(lk)}$:

$$\begin{aligned} p^{(lk)}(x) &= a^{(lk)}x^3 + b^{(lk)}x^2 + c^{(lk)}x + d^{(lk)}, \\ x_{lk} &\leq x \leq x_{lk+1}, \\ 1 &\leq lk \leq N. \end{aligned} \tag{D.1}$$

Considerando o conjunto $\{z_{lk}, x_{lk}\}$, o problema de interpolação consiste em achar os $4N$ coeficientes $a^{(lk)}$, $b^{(lk)}$, $c^{(lk)}$ e $d^{(lk)}$ dos N polinômios. Para tanto é necessário resolver um sistema linear com $4N$ equações, as quais correspondem à imposições de suavidade e continuidade dos polinômios $p^{(lk)}$. As restrições de continuidade impõem que

$$\begin{aligned} p^{(lk)}(x_{lk}) &= z_{lk}; \\ p^{(lk)}(x_{lk+1}) &= z_{lk+1}; \\ 1 &\leq lk \leq N; \end{aligned} \tag{D.2}$$

isto é, os valores dos polinômios $p^{(lk)}$ devem coincidir com os valores z_{lk} nas suas extremidades, estabelecendo assim a continuidade da função. As restrições de suavidade requerem a continuidade das derivadas primeira e segunda entre tais polinômios:

$$\begin{aligned} (p^{(lk)})'(x_{lk+1}) &= (p^{(lk+1)})'(x_{lk+1}); \\ (p^{(lk)})''(x_{lk+1}) &= (p^{(lk+1)})''(x_{lk+1}); \\ 1 &\leq lk \leq N - 1; \end{aligned} \tag{D.3}$$

Observe que todas as condições citadas acima somam $4N - 2$ condições: a continuidade da função z implica em duas restrições, uma para cada extremidade dos N polinômios, como visto em (D.2); a

continuidade das derivadas primeira e segunda implicam outras duas restrições para cada x_{lk} do domínio, mas não pode ser aplicada para os dois extremos do domínio, x_i e x_f . As duas condições restantes são impostas ao sistema de equações fazendo com que a derivada terceira seja contínua ao longo do segundo e penúltimo ponto do conjunto de pares ordenados:

$$\begin{aligned}(p^{(1)})'''(x_2) &= (p^{(2)})'''(x_2); \\ (p^{(N-1)})'''(x_N) &= (p^{(N)})'''(x_N).\end{aligned}\tag{D.4}$$

Avaliados os coeficientes $a^{(lk)}$, $b^{(lk)}$, $c^{(lk)}$ e $d^{(lk)}$ pode-se calcular não só os valores da função z em qualquer ponto do domínio mas também as suas derivadas ou integrais através da respectiva operação com os polinômios $p^{(k)}$.

APÊNDICE E - Avaliação do Erro dos Métodos Numéricos

O método de interpolação dos valores das VIs com polinômios cúbicos (APÊNDICE D) nos permite calcular as derivadas espaciais das VIs. Tais valores devem se aproximar daqueles calculados através das equações da Tabela 1. Comparando ambos os valores pode-se estimar o erro do método numérico.

A variável Y_g será utilizada como exemplo para explicar o processo de cálculo. O erro na obtenção de tal VI pode ser estimado da seguinte maneira: resolvido o sistema de equações por um método numérico qualquer, para cada linha do nosso domínio tem-se os valores de Y_g . Os valores de Y_g para a linha \bar{i} correspondem aos valores da função $Y_g^{(\bar{i})}(x^*)$ para $x^* = \{x_j^*\}$. Com os valores $\{Y_g^{(\bar{i})}(x_j^*), x_j^*\}$ resolve-se o problema de interpolação e pode-se determinar, a partir dos polinômios cúbicos obtidos, a derivada de $Y_g^{(\bar{i})}$ em cada um dos valores x_j^* . Ao valor dessa derivada, calculada por interpolação polinomial, será dado o nome de f_{IP} . Calcula-se agora a derivada espacial de cada ponto da linha \bar{i} pela EDP de Y_g da Tabela 1. A tal valor é dado o nome de f_{EDP} :

$$f_{EDP} = \frac{m\mathcal{X}}{N_a}, \quad (E.1)$$

em que m é avaliado usando os valores das VIs para $x^* = \{x_j^*\}$ e $y^* = y_{\bar{i}}$. Caso o sistema de EDPs fosse satisfeito exatamente $f_{EDP} = f_{IP}$. Porém, como há um erro inerente ao método numérico (e também ao método de interpolação), é esperado que tal igualdade não seja satisfeita. Forma-se assim o resíduo de tal igualdade:

$$\Delta f^{rel} = \frac{f_{EDP}}{f_{IP}} - 1. \quad (E.2)$$

Similarmente, tal processo pode ser repetido para as outras EDPs e seus resíduos podem ser calculados. Enquanto as EDPs das propriedades do ar possuem derivadas na direção x^* , as EDPs da água possuem na direção y^* . Certamente, tais direções devem ser observadas ao se formar os respectivos resíduos.

Os erros calculados dessa maneira indicam o quanto os métodos numéricos foram exatos na resolução do sistema de EDOs. Tais erros serão calculados para os pontos discretos do nosso domínio, isto é, os pontos $(x_j^*, y_{\bar{i}}^*)$. Um valor médio de tais desvios será calculado para a comparação dos diferentes métodos numéricos:

$$\Delta f_{RMS}^{rel} = \sqrt{\frac{\sum [\Delta f^{rel}(x_j^*, y_{\bar{i}}^*)]^2}{(M+1)(N+1)}}. \quad (E.3)$$

APÊNDICE F - Balanços de Massa e Energia ao Longo do Equipamento

Realizando balanços de massa e energia ao longo do equipamento pode-se determinar valores médios das VIs, bem como determinar os desvios das leis de conservação de massa e energia devido ao erro numérico do método. Além disso, o método para o cálculo dos valores médios das VIs são importantes para se conhecer os seus valores de saída do equipamento.

A Figura F.1 ilustra o volume de controle que será utilizado para realizar tais balanços de massa: um retângulo (um prisma, se considerarmos o eixo z) através do qual o ar flui na horizontal e a água na vertical. Os lados do retângulo medem x^* e y^* e ao entrar as VIs do ar e da água são aquelas da entrada do equipamento. Ao sair, tais VIs possuem os valores adquiridos ao longo do seu trajeto pelo recheio, trocando massa e energia com a outra fase.

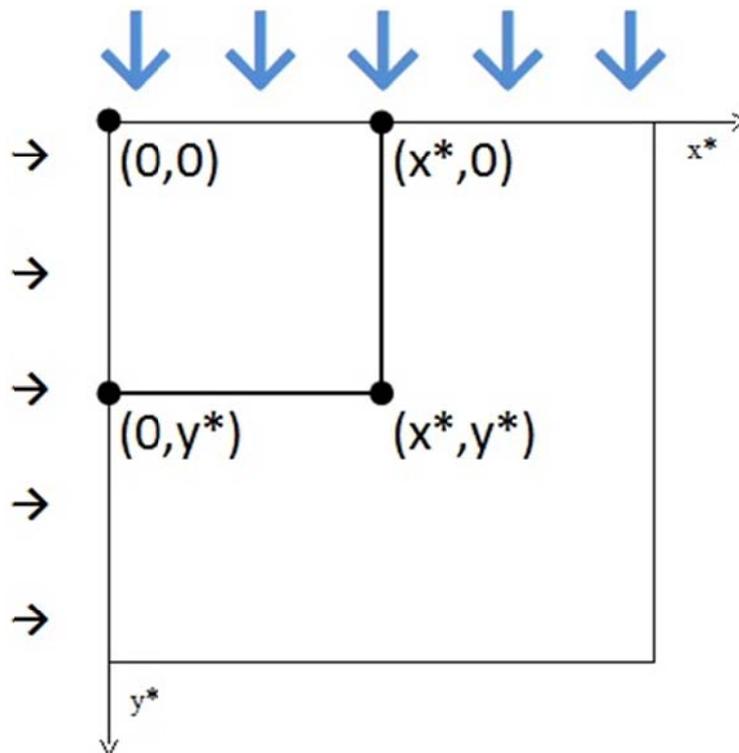


Figura F.1: Volume de controle para os balanços de massa e energia ao longo do equipamento.

Os balanços de massa e energia (entalpia) são do tipo.

$$\text{entra} = \text{sai} . \quad (\text{F.1})$$

Antes de prosseguirmos com tais balanços é instrutivo definirmos uma maneira de calcular os valores médios das VIs para o ponto $(x^*, y^*) = (x_j^*, y_i^*)$. Tomando o volume de controle representado na figura Isso significa obter os valores médios das VIs da água ao longo da linha \bar{i} (para a qual $y^* = y_i^*$) e tomando valores da coluna 1 até a coluna \bar{j} , isto é, $0 \leq x^* \leq x_j^*$. Para as VIs do ar serão seus valores médios ao longo da coluna \bar{j} e tomando valores da linha 1 até a linha \bar{i} .

O processo de obtenção do valor médio envolve integração das VIs nas linhas ou colunas. Para tanto será utilizada a interpolação com polinômios cúbicos, assim como definido no APÊNDICE D, e os polinômios cúbicos resultantes serão integrados. Para o ponto (x_j^*, y_i^*) o fluxo médio de água é dado por:

$$\begin{aligned}\bar{N}_{l,(i,j)} &= \frac{1}{x_j} \int_0^{x_j} N_l^{(i)} dx, \\ &= \frac{1}{x_j^* \mathcal{X}} \int_0^{x_j^*} N_l^{(i)} \mathcal{X} dx^* = \frac{1}{x_j^*} \int_0^{x_j^*} N_l^{(i)} dx^*.\end{aligned}\tag{F.2}$$

Similarmente, define-se a umidade média do gás:

$$\bar{Y}_{g,(i,j)} = \frac{1}{y_i^*} \int_0^{y_i^*} Y_g^{(j)} dy^*.\tag{F.3}$$

Observe que $i, j = 0$ corresponde a primeira linha ou coluna e as VIs são aquelas da entrada do equipamento: $\bar{N}_{l,(0,j)} = N_{l,i}$ e $\bar{Y}_{g,(i,0)} = Y_{g,i}$. Definem-se agora os fluxos de água que entram e saem para ambas as fases:

$$\begin{aligned}(\text{entra})_l &= \bar{N}_{l,(0,j)} A_{y,(0,j)} = N_{l,i} \mathcal{Z} \mathcal{X} x_j^*, \\ (\text{entra})_g &= N_a \bar{Y}_{g,(i,0)} A_{x,(i,0)} = N_a Y_{g,i} \mathcal{Z} \mathcal{Y} y_i^*, \\ (\text{sai})_l &= \bar{N}_{l,(i,j)} A_{y,(i,j)} = \bar{N}_{l,(i,j)} \mathcal{Z} \mathcal{X} x_j^*, \\ (\text{sai})_g &= N_a \bar{Y}_{g,(i,j)} A_{x,(i,j)} = N_a \bar{Y}_{g,(i,j)} \mathcal{Z} \mathcal{Y} y_i^*.\end{aligned}\tag{F.4}$$

Forma-se então o desvio do balanço de massa, semelhante o erro dos métodos numéricos:

$$\begin{aligned}\text{DBM}(x_j^*, y_i^*) &= \frac{\text{sai}}{\text{entra}} - 1, \\ &= \frac{\bar{N}_{l,(i,j)} x_j^* \mathcal{X} + N_a \bar{Y}_{g,(i,j)} y_i^* \mathcal{Y}}{N_{l,i} x_j^* \mathcal{X} + N_a Y_{g,i} y_i^* \mathcal{Y}} - 1.\end{aligned}\tag{F.5}$$

O desvio do balanço de energia (entalpia) pode ser formado de maneira semelhante. Definem-se inicialmente as seguintes quantidades médias:

$$\begin{aligned}\bar{H}_{l,(i,j)}^{\text{Tot}} &= \frac{1}{x_j^*} \int_0^{x_j^*} N_l^{(i)} H_l^{(i)} dx^*, \\ \bar{H}_{g,(i,j)} &= \frac{1}{y_i^*} \int_0^{y_i^*} H_g^{(j)} dy^*.\end{aligned}\tag{F.6}$$

Observe que, para a água, calcula-se a entalpia média TOTAL, pois o fluxo mássico de água varia ao longo do espaço. Como o fluxo de ar seco é constante, no caso do ar calcula-se a entalpia média específica. Definem-se agora as entalpias totais que entram e saem para ambas as fases:

$$\begin{aligned}
 (\text{entra})_l &= N_{l,i} H_{l,i} \mathcal{Z} \mathcal{X} x_j^* ; \\
 (\text{entra})_g &= N_a H_{g,i} \mathcal{Z} \mathcal{Y} y_i^* ; \\
 (\text{sai})_l &= \bar{H}_{l,(i,j)}^{\text{Tot}} \mathcal{Z} \mathcal{X} x_j^* ; \\
 (\text{sai})_g &= N_a \bar{H}_{g,(i,j)} \mathcal{Z} \mathcal{Y} y_i^* .
 \end{aligned}
 \tag{F.7}$$

Novamente, as equações (F.7) foram escritas levando em consideração que os valores das VIs na entrada são constantes. O desvio do balanço de energia é então calculado:

$$\begin{aligned}
 \text{DBE} (x_j^*, y_i^*) &= \frac{\text{sai}}{\text{entra}} - 1 , \\
 &= \frac{\bar{H}_{l,(i,j)}^{\text{Tot}} x_j^* \mathcal{X} + N_a \bar{H}_{g,(i,j)} y_i^* \mathcal{Y}}{N_{l,i} H_{l,i} x_j^* \mathcal{X} + N_a H_{g,i} y_i^* \mathcal{Y}} - 1 .
 \end{aligned}
 \tag{F.8}$$

Similarmente aos resíduos das derivadas, calculados no APÊNDICE E, calcula-se um valor médio dos desvios dos balanços de massa e energia. Para o balanço de massa tem-se:

$$\text{DBM}_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{\sum [\text{DBM} (x_j^*, y_i^*)]^2}{(M + 1)(N + 1)}} ,
 \tag{F.9}$$

e similarmente para o balanço de energia.

Para o cálculo do DBM e do DBE é necessário calcular a umidade média e o fluxo médio de líquido em cada ponto, mas não são necessárias as temperaturas médias. O cálculo dos valores médios da temperaturas é útil somente para conhecer tais valores na saída do equipamento.

Para calcular o DBE utiliza-se a entalpia média TOTAL (e não a específica) da água. Obtém-se a entalpia específica dividindo a entalpia total pelo fluxo mássico médio:

$$\bar{H}_{l,(i,j)} = \bar{H}_{l,(i,j)}^{\text{Tot}} / \bar{N}_{l,(i,j)} ;
 \tag{F.10}$$

Usando-se (16) e (A.70) obtém-se

$$\begin{aligned}
 \bar{H}_{l,(i,j)} &= C_{p,l} \bar{T}_{l,(i,j)} ; \\
 \bar{H}_{g,(i,j)} &= \bar{C}_{p,g,(i,j)}^* \bar{T}_{g,(i,j)} + \bar{Y}_{g,(i,j)}^* \lambda .
 \end{aligned}
 \tag{F.11}$$

Para o líquido, a obtenção da temperatura média em (F.11) é direta:

$$\bar{T}_{l,(i,j)} = \bar{H}_{l,(i,j)}^{\text{Tot}} / (\bar{N}_{l,(i,j)} C_{p,l}). \quad (\text{F.12})$$

Já para o gás a equação em (F.11) é não-linear em $\bar{T}_{g,(i,j)}$. Assim, obtidos os valores de $\bar{H}_{g,(i,j)}$ e $\bar{Y}_{g,(i,j)}$, por (F.6) e (F.3), um método (geralmente numérico) de resolução de equações não lineares deve ser utilizado para resolver a equação para $\bar{T}_{g,(i,j)}$.

APÊNDICE G - Correlação adimensional para $k_Y A$

Foi mencionado no APÊNDICE A.10 que um GA pode ser parametrizado em função dos outros GAs de um sistema. Será desenvolvida uma metodologia para a obtenção de uma expressão adimensional que permita o cálculo de $k_Y A$ a partir das taxas mássicas de entrada de líquido e gás.

Primeiramente serão introduzidos dois novos GAs não mencionados anteriormente. O primeiro GA é conhecido como o número de Merkel:

$$Me = (k_Y A) X Y Z / \dot{M}_{1,i} . \quad (G.1)$$

O segundo GA é simplesmente a razão entre as taxas mássicas de ar e água na entrada:

$$\mathfrak{N} = \dot{M}_a / \dot{M}_{1,i} . \quad (G.2)$$

Uma possível relação entre os dois GAs se dá sob a forma de um polinômio de grau S:

$$Me(\mathfrak{N}) = a_0 + a_1 \mathfrak{N} + a_2 \mathfrak{N}^2 + \dots + a_N \mathfrak{N}^S \dots \quad (G.3)$$

Uma relação ainda mais exata pode ser obtida caso os expoentes de cada termo da série em (G.3) possam ser ajustados. Propõe-se a seguinte relação entre os dois GAs:

$$Me(\mathfrak{N}) = a_0 + a_1 \mathfrak{N}^{b_1} + a_2 \mathfrak{N}^{b_2} + \dots + a_N \mathfrak{N}^{b_s} . \quad (G.4)$$

A expressão (G.4) pode ser obtida a partir de um conjunto de m pares ordenados $\{Me_{lk}^{exp}, \mathfrak{N}_{lk}^{exp}\}$. Para tanto, ajustam-se os coeficientes a_{lk} e b_{lk} em tal equação de modo a minimizar a diferença entre os valores calculados por tal correlação, $\{Me_{lk}^{teor}\} = \{Me(\mathfrak{N}_{lk}^{exp})\}$, e aqueles obtidos experimentalmente, $\{Me_{lk}^{exp}\}$. Deve-se, portanto, minimizar o seguinte resíduo:

$$\mathbb{R} = \sum_{lk=1}^{lk=m} (Me_{lk}^{teor} - Me_{lk}^{exp})^2 . \quad (G.5)$$

Observa-se que o problema estabelecido configura uma otimização não linear. Utiliza-se a função *fminsolve* do Matlab® para a determinação dos coeficientes a_{lk} e b_{lk} .

APÊNDICE H - Scripts de Matlab

Apresentam-se os scripts utilizados para realizar os cálculos. Os nomes dos scripts são escritos antes de cada um deles.

DO_BOUR

```
% DADOS DE BOUROUNI ET AL - CALCULO DOS PARAMETROS

clear all; close all; clc

global var1 var2 R P Cpa Cpv Cpl lamb

[var1,var2] = deal(1,0);          % formulacao exata, Hstar é função degrau

[MMA,MMw] = deal(28.97,18.02);    R = MMw/MMA;          P = 101.325;

Tg_i = 38;          [Tl_i,Tl_f] = deal(64,34.7236);

Tl_avg = (Tl_i+Tl_f)/2;

[Cpa,Cpv,Cpl,lamb] = props(Tl_avg,Tg_i);

[X,Y,Z] = deal(5,11.5,5);          [Ay,Ax] = deal(X*Z,Y*Z);

[Ml_i,Ma] = deal(110,224);          [Nl_i,Na] = deal(Ml_i/Ay,Ma/Ax);

hA = 17;          kYA = hA/Cpa;

Yg_REL_0 = 0.1544;          Yg_i_0 = Yg_REL_0*Y_Ydot_sat(Tg_i);
Yg_REL_1 = 0.80;          Yg_i_1 = Yg_REL_1*Y_Ydot_sat(Tg_i);
Yg_REL_2 = 0.90;          Yg_i_2 = Yg_REL_2*Y_Ydot_sat(Tg_i);

Yg_i = [Yg_i_0,Yg_i_1,Yg_i_2];

table(Nl_i,Na,Yg_i,kYA,Tg_i,Tl_i,Tl_f)
```

DO_GROB

```
% DADOS DE GROBBELAAR ET AL - CALCULO DOS PARAMETROS

clear all; close all; clc

global var1 var2 R P Cpa Cpv Cpl lamb

[var1,var2] = deal(1,0);          % formulacao exata, Hstar é função degrau

[MMA,MMw] = deal(28.97,18.02);    R = MMw/MMA;          P = 100.9;

[Tg_i,Tg_f] = deal(13.1,20);          [Tl_i,Tl_f] = deal(34,17.4);

Tg_avg = (Tg_i+Tg_f)/2;          Tl_avg = (Tl_i+Tl_f)/2;

[Cpa,Cpv,Cpl,lamb] = props(Tl_avg,Tg_avg);
```

```

TgBU = 10.5;                                YgBU = Y_Ydot_sat(TgBU);
HgBU = EntalpiaG(YgBU,TgBU);                Hg_i = @(Y) EntalpiaG(Y,Tg_i);
OBJ = @(Y) HgBU/Hg_i(Y) - 1;                 Yg_i = fzero(OBJ,0.01);
[X,Y,Z] = deal(1.5,2,2);                     [Ay,Ax] = deal(X*Z,Y*Z);
[Ml_i,Ma] = deal(4.3,11.4);                  [Nl_i,Na] = deal(Ml_i/Ay,Ma/Ax);
Me_Y = 1.16;                                Me = Me_Y*Y;                                kYA = Me_Y*Nl_i;
table(Nl_i,Na,Me,Yg_i,kYA)

```

BOUROUNI

```
% DADOS DE BOUROUNI ET AL
```

```
global P Tg_i Yg_i Tl_i Tl_s Nl_i Na X Y Z kYA0
```

```

P = 101.325;                                [Tl_i,Tl_s] = deal(64,34.7236);
Tg_i = 38;                                  [Nl_i,Na] = deal(4.40,3.8957);
Yg_i = 0.0067017;                          [X,Y,Z] = deal(5,11.5,5);

```

```
kYA0 = 16.875;
```

CORTINOVIS

```
function [] = CORTINOVIS(n) % DADOS DE CORTINOVIS ET AL
```

```
global P Tg_i Yg_i Tl_i Tl_s Nl_i Na X Y Z kYA0
```

```
P = 101.325;                                [X,Y,Z] = deal(.6,.9,.9);
```

```

Tg_i    = [16.5,19.6,21.9,17.3,19.3,21.3,17.5,21.3,18.4,16.8,19.9,18.9];
Yg_i    = [7.42,7.12,6.23,6.86,8.32,11.4,6.79,11.2,6.70,8.06,7.42,6.68]*1e-3;
Tl_i    = [29.4,28.9,27.4,25.8,29.4,29.0,28.0,29.7,27.4,27.7,27.5,27.7];
Tl_s    = [25.4,26.9,23.1,23.2,27.0,26.0,23.4,27.6,24.5,24.8,24.6,24.8];
Nl_i    = [2.06,5.14,2.06,5.14,3.60,3.60,2.06,5.14,3.60,3.60,3.60,3.60];
Na      = [1.29,1.29,2.31,2.31,1.29,2.31,1.80,1.80,1.80,1.80,1.80,1.80];
kYA0    = [1.24,1.74,1.58,2.97,1.34,2.27,1.68,2.09,1.83,1.87,2.11,1.77];

```

```

[Tg_i,Yg_i,Tl_i,Tl_s,Nl_i,Na,kYA0] = ...
deal(Tg_i(n),Yg_i(n),Tl_i(n),Tl_s(n),Nl_i(n),Na(n),kYA0(n));

```

GROBBELAAR

```
% DADOS DE GROBBELAAR ET AL
```

```
global P Tg_i Yg_i Tl_i Tl_s Nl_i Na X Y Z kYA0
```

```

P = 100.9;                                [Tl_i,Tl_s] = deal(34,17.4);
Tg_i = 13.1;                              [Nl_i,Na] = deal(1.4333,2.85);
Yg_i = 0.00683;                          [X,Y,Z] = deal(1.5,2,2);

```

```
kYA0 = 1.663;
```

Programa_TFA1

```
% DADOS DE BOUROUNI ET AL - PRIMEIRO TESTE DA FUNCAO DE ATIVACAO
```

```
global P Tg_i Yg_i Tl_i Nl_i Na X Y Z kYA0
```

```
P = 101.325;          Tl_i = 64;  
Tg_i = 38;           [Nl_i,Na] = deal(4.40,3.8957);  
Yg_i = 0.034724;    [X,Y,Z] = deal(5,11.5,5);
```

```
kYA0 = 16.875;
```

Programa_TFA2

```
% DADOS DE BOUROUNI ET AL - SEGUNDO TESTE DA FUNCAO DE ATIVACAO
```

```
global P Tg_i Yg_i Tl_i Nl_i Na X Y Z kYA0
```

```
P = 101.325;          Tl_i = 95;  
Tg_i = 38;           [Nl_i,Na] = deal(4.40,3.8957);  
Yg_i = 0.039064;    [X,Y,Z] = deal(5,11.5,5);
```

```
kYA0 = 16.875;
```

Programa_0

```
global...
```

```
var1 var2 b K var3 var4 tol var5 M N...           % config.  
P Tg_i Yg_i Tl_i Tl_s Nl_i Na X Y Z kYA0 kYA...   % input  
Ml_i Ml_f Ma R Tg_s Cpa Cpv Cpl lamb Le Hm Hn x1 x2... % parametros  
v0 u0 EDU EDV Num_extrap nSteps Sum_extrap Yg Tg Nl Tl x y...
```

```
[Ay,Ax] = deal(X*Z,Y*Z);          [Ml_i,Ma] = deal(Nl_i*Ay,Na*Ax);
```

```
% parametros operacionais
```

```
[MMA,MMw] = deal(28.97,18.02);      R = MMw/MMA;
```

```
Tg_avg = (Tg_i+Tg_s)/2;          Tl_avg = (Tl_i+Tl_s)/2;
```

```
[Cpa,Cpv,Cpl,lamb] = props(Tl_avg,Tg_avg);      Le = 0.865^(2/3);
```

```
% definindo o dominio inicial
```

```
[Hm,Hn] = deal(1/M,1/N);
```

```
[x1,x2] = deal(linspace(0,1,N+1),linspace(0,1,M+1));
```

```
[U1,U2,V1,V2] = deal(zeros(M+1,N+1));
```

```
[u1,u2] = deal(zeros(M+1,1));
```

```

v0 = zeros(M+1,2);

% resolucao numerica: criando as matrizes solucoes

if var3 == 0,

    u0 = [Yg_i,Tg_i];    v0(1,:) = [Nl_i,Tl_i];

    [EDU,EDV] = deal(@EDG,@EDL);

else

    u0 = [Nl_i,Tl_i];    v0(1,:) = [Yg_i,Tg_i];

    [EDU,EDV] = deal(@EDL,@EDG);

end

Num_extrap = zeros(N,1);    nSteps = 2; % n° de extrap. em função do numero de
subintervalos

% primeira 'coluna'

[u1(:),u2(:)] = deal(u0(1),u0(2));    [v1,v2] = AvancaV(u1,u2);

[U1(:,1),U2(:,1)] = deal(u1,u2);
[V1(:,1),V2(:,1)] = deal(v1,v2);

tic
for i = 2:(N+1)

    %    contador = N+2-i

    [u1,u2] = AvancaU(u1,u2,v1,v2);    [v1,v2] = AvancaV(u1,u2);

    [U1(:,i),U2(:,i)] = deal(u1,u2);
    [V1(:,i),V2(:,i)] = deal(v1,v2);

    Num_extrap(i-1) = nSteps/2 - 1;

end

ET = toc;    Sum_extrap = sum(Num_extrap);

% organizando as matrizes solucoes

if var3 == 0,

    [Yg,Tg,Nl,Tl] = deal(U1,U2,V1,V2);    [x,y] = deal(x1,x2);

else

    [Nl,Tl,Yg,Tg] = deal(U1.',U2.',V1.',V2. ');    [x,y] = deal(x2,x1);

end

```

OBJ

```
function F = OBJ(x0)

global...
    var1 var2 b K var3 var4 tol var5 M N...           % config.
    P Tg_i Yg_i Tl_i Tl_s Nl_i Na X Y Z kYA0 kYA...   % input
    Ml_i Ml_f Ma R Tg_s Cpa Cpv Cpl lamb Le Hm Hn x1 x2... % parametros
    v0 u0 EDU EDV Num_extrap nSteps Sum_extrap Yg Tg Nl Tl x y...
    Tableau                                           % Analise1

[kYA,Tg_s] = deal(x0(1),x0(2));

Programa_0,Analise1

F1 = Tl_f - Tl_s;
F2 = Tg_f - Tg_s;

F = [F1;F2];
```

OBJ_TFA

```
function F = OBJ_TFA(x0)

global...
    var1 var2 b K var3 var4 tol var5 M N...           % config.
    P Tg_i Yg_i Tl_i Tl_s Nl_i Na X Y Z kYA0 kYA...   % input
    R Tg_s Cpa Cpv Cpl lamb Le Hm Hn x1 x2 v0 u0 EDU EDV... % parametros
    Num_extrap nSteps Sum_extrap Yg Tg Nl Tl x y...
    Tableau                                           % Analise1Analise1

[Tl_s,Tg_s] = deal(x0(1),x0(2));

Programa_0,Analise1

F1 = Tl_f - Tl_s;
F2 = Tg_f - Tg_s;

F = [F1;F2];
```

Correlacao

```
clear all; close all; clc

load('data.mat')

Me = X*Y*Z*kYA./Ml_i;           Ratio = Ml_i./Ma;

Corr = @(A,Ratio) A(1) + A(2)*Ratio.^A(3) + A(4)*Ratio.^A(5);

Objec1 = @(A) sum((Corr(A,Ratio) - Me).^2);           x0 = [1,1,1,1,1];
Objec2 =          sum((          mean(Me)          - Me).^2);

options = optimset('Display','off','TolX',1e-3);

A = fminsearch(Objec1,x0,options)
```

```

plot(Ratio,Me,'*');      hold on,      kYA_corr = Corr(A,Ratio).*Ml_i/(X*Y*Z);

Ratio1 = linspace(0.5,3,100)';      plot(Ratio1,Corr(A,Ratio1))

xlabel('M_{1,i} / M_a'),      ylabel('Me', 'Rotation',0)

R2 = 1 - Objec1(A)/Objec2

figure(2),      plot(kYA,kYA_corr,'*'),      hold on
                plot(Ratio1,1.1*Ratio1,'-.')
                plot(Ratio1,0.9*Ratio1,'-.')

xlabel({'k_YA Real [kg/(m^3*s)]'})
ylabel({'k_YA'; 'Correlação'; '[kg/(m^3*s)]'}, 'Rotation',0, 'Position', [.35,1.1])

xlim([0.5 2.5]),      ylim([0.5 2.5])

table(kYA,Me,Ratio,Corr(A,Ratio),kYA_corr)

```

Analise0

```

clear all; close all; clc

global...
    var1 var2 b K var3 var4 tol var5 M N...           % config.
    P Tg_i Yg_i Tl_i Tl_s Nl_i Na X Y Z kYA0 kYA...   % input
    Ml_i Ml_f Ma R Tg_s Cpa Cpv Cpl lamb Le Hm Hn x1 x2... % parametros
    v0 u0 EDU EDV Num_extrap nSteps Sum_extrap Yg Tg Nl Tl x y...
    Tableau                                           % Analise1

%% opções do programa

var1 = 1;      % 0: formulacao aproximada; 1: formulacao exata;

var2 = 1;      % 0: Hstar é função degrau; 1: Hstar é tanh;
K = log(999);  % fator de deslocamento da tanh
b = 1000;     % fator de 'amacramento' da tanh

var3 = 0;      % 0: gas é principal; 1: liquido é principal;

% DIRECAO PRINCIPAL
var4 = 2;      % 0: metodo de euler; 1: midpoint; 2: metodo de BS;
tol = 10^-6;   % erro permitido (estimado) do metodo de BS

% DIRECAO SECUNDARIA
var5 = 1;      % 0: metodo de euler; 1: RK4;

[M,N] = deal(10,10);

%% Resolvendo o sistema de equações

BOUROUNI,    x0 = [1;Tg_i]; % dados de entrada e estimativas iniciais

options = optimoptions('fsolve','Display','iter','TolX',1e-3,'TolFun',1e-3);

fsolve(@OBJ,x0,options);      % encontra kYA e Tg_s

```

Tableau

```
%% Testes das funções de ativação

% clc
%
% [var1,var2,var3,var4,var5,M,N] = deal(1,0,1,1,0,100,100);
%
% TFA2
%
% % x0 = [Tl_i;Tg_i]; % estimativas iniciais
% x0 = [Tl_s;Tg_s]; % estimativas secundárias
%
% fsolve(@OBJ_TFA,x0,options); % encontra Tl_s e Tg_s (TFA1 e 2)
%
% Programa_0, Analise1, Tableau
%
% Analise3, Analise6

%% Testes dos diversos métodos

% clc
%
% [var1,var2,var3,var4,var5,M,N] = deal(1,0,1,1,0,10,10);
%
% Programa_0, Analise1, Tableau
%
% Analise3, Analise4

%% Obtendo os dados de CORTINOVIS para a correlacao adimensional

% options = optimoptions('fsolve','Display','iter','TolX',1e-3,'TolFun',1e-3);
%
% out = zeros(12,4);
%
% for n = 1:12
%
% CORTINOVIS(n), x0 = [1;Tg_i]; % dados de entrada e estimativas iniciais
%
% fsolve(@OBJ,x0,options); % encontra kYA e Tg_s
%
% out(n,:) = [kYA,Ml_i,Ml_f,Ma];
%
% end
%
% [kYA,Ml_i,Ml_f,Ma] = deal(out(:,1),out(:,2),out(:,3),out(:,4));
%
% save('data.mat','kYA','Ml_i','Ml_f','Ma','X','Y','Z');

%% Analises diversas

% Gráficos
% Analise2

% Desvios
% Analise3

% Resíduos
% Analise4
```

```

% Resíduos filtrados
% Analise5

% Analise da funcao de ativacao e saturacao
% Analise6

% Valores de Saída do gás frio/umido
% Analise7

% Erro RMS da coluna seguinte pelo método de BS
% Analise8

```

Analise1

```
global Tableau Ml_f
```

```
% umidade e temperatura medias de saida do gas
```

```

Yg_pp = spline(y,Yg(:,end)); % PP de Yg na saida
Yg_pp = fnint(Yg_pp);
Yg_f = ppval(Yg_pp,1);

```

```

Hg = EntalpiaG(Yg(:,end),Tg(:,end)); % Hg na saida
Hg_pp = spline(y,Hg); % PP de Hg na saida
Hg_pp = fnint(Hg_pp); % PP de HgM
HgM = ppval(Hg_pp,1); % HgM na saida
Tg_f = fzero(@(Tg_f) EntalpiaG(Yg_f,Tg_f) - HgM,Tg_s);

```

```
% massa e temperatura de saida da agua
```

```

Nl_pp = spline(x,Nl(end,:)); % PP do Nl na saida
Nl_pp = fnint(Nl_pp); % PP de NlM
Nl_f = ppval(Nl_pp,1);
Ml_f = Nl_f*Ay; % massa de L na
saida

HlT = Tl(end,:).*Nl(end,:); % HlT na saida
HlT_pp = spline(x,HlT); % PP de HlT na saida
HlT_pp = fnint(HlT_pp); % PP de HlTM
HlT_f = ppval(HlT_pp,1);
Tl_f = HlT_f/Nl_f;

```

```
evap = Ml_f - Ml_i; evapR = 100*(evap/Ml_i);
```

```
DTA_kYA_REL = kYA0/kYA - 1;
```

```
Tableau = table(ET,kYA,DTA_kYA_REL,Yg_f,Tg_f,Tl_f,evap,evapR);
```

Analise2

```
% plotando Nl
```

```
figure(1)
```

```
Analise_plot = Nl; TIT = 'N_1 [kg/(m^2*s)]'; dig = '2'; num_CL = 10;
```

```
dig = ['%0.',dig,'f'];
```

```

[C,h] = contour(x*X,y*Y,Analise_plot,num_CL,'ShowText','on');
texth = clabel(C,h,'FontSize',10,'Color','k','Rotation',0);

for i = 1:length(texth)

    textstr = get(texth(i),'String');        textnum = str2double(textstr);
    textstr = sprintf(dig,textnum);        set(texth(i),'String',textstr);

end

axis ij; xlabel('x (m)'), ylabel('y (m)','Rotation',0), title(['Perfil de
','TIT])

%% plotando Tl

figure(2)

Analise_plot = Tl;  TIT = 'T_l [°C]';    dig = '1';        num_CL = 10;

dig = ['%0.',dig,'f'];

[C,h] = contour(x*X,y*Y,Analise_plot,num_CL,'ShowText','on');
texth = clabel(C,h,'FontSize',10,'Color','k','Rotation',0);

for i = 1:length(texth)

    textstr = get(texth(i),'String');        textnum = str2double(textstr);
    textstr = sprintf(dig,textnum);        set(texth(i),'String',textstr);

end

axis ij; xlabel('x (m)'), ylabel('y (m)','Rotation',0), title(['Perfil de
','TIT])

%% plotando Yg

figure(3)

Analise_plot = Yg;  TIT = 'Y_g [-]';    dig = '3';        num_CL = 10;

dig = ['%0.',dig,'f'];

[C,h] = contour(x*X,y*Y,Analise_plot,num_CL,'ShowText','on');
texth = clabel(C,h,'FontSize',10,'Color','k','Rotation',0);

for i = 1:length(texth)

    textstr = get(texth(i),'String');        textnum = str2double(textstr);
    textstr = sprintf(dig,textnum);        set(texth(i),'String',textstr);

end

axis ij; xlabel('x (m)'), ylabel('y (m)','Rotation',0), title(['Perfil de
','TIT])

%% plotando Tg

figure(4)

```

```

Analise_plot = Tg; TIT = 'T_g [°C]'; dig = '1'; num_CL = 15;

dig = ['%0.',dig,'f'];

[C,h] = contour(x*X,y*Y,Analise_plot,num_CL,'ShowText','on');
textx = clabel(C,h,'FontSize',10,'Color','k','Rotation',0);

for i = 1:length(textx)

    textstr = get(textx(i),'String'); textnum = str2double(textstr);
    textstr = sprintf(dig,textnum); set(textx(i),'String',textstr);

end

axis ij; xlabel('x (m)'), ylabel('y (m)','Rotation',0), title(['Perfil de
',TIT])

```

Analise3

```

% calculando os desvios dos BM&E

global var2 M N; [tempvar2,var2] = deal(var2,0);

if var3 == 1, [M,N] = deal(N,M); end

[x,y] = deal(x*X,y*Y); [xx,yy] = meshgrid(x,y);

[NlM,HlTM,YgM,HgM] = deal(zeros(M+1,N+1));

Hg = EntalpiaG(Yg,Tg); HlT = Nl.*Cpl.*Tl;

[Nl_i,HlT_i,Yg_i,Hg_i] = deal(Nl(1),HlT(1),Yg(1),Hg(1));

for i = 2:(M+1)

    Nl_pp = spline(x,Nl(i,:)); % PP de ajuste do Nl na saida
    Nl_pp = fnint(Nl_pp);
    NlM(i,:) = ppval(Nl_pp,x);

    HlT_pp = spline(x,HlT(i,:)); % PP de ajuste do HlT na saida
    HlT_pp = fnint(HlT_pp);
    HlTM(i,:) = ppval(HlT_pp,x);

end

for j = 2:(N+1)

    Yg_pp = spline(y,Yg(:,j)); % PP de ajuste do Yg na saida
    Yg_pp = fnint(Yg_pp);
    YgM(:,j) = ppval(Yg_pp,y);

    Hg_pp = spline(y,Hg(:,j)); % PP de ajuste do Hg na saida
    Hg_pp = fnint(Hg_pp);
    HgM(:,j) = ppval(Hg_pp,y);

end

```

```

DBM = (NlM + Na*YgM)./(Nl_i*xx + Na*Yg_i*yy) - 1;
DBE = (HlTM + Na*HgM)./(HlT_i*xx + Na*Hg_i*yy) - 1;

[DBM(1,:),DBM(:,1),DBE(1,:),DBE(:,1)] = deal(0);

DBM_rms = RMS2(DBM);          DBE_rms = RMS2(DBE);

[x,y] = deal(x/X,y/Y);      var2 = tempvar2;

if var3 == 1,          [M,N] = deal(N,M);          end

table(DBM_rms,DBE_rms)

```

Analise4

```

% calculando os desvios dos BM&E

global var2,          [tempvar2,var2] = deal(var2,0);

if var3 == 1,          [M,N] = deal(N,M);          end

[Ygdot,Tgdot] = EDG(Yg,Tg,Nl,Tl);
[Nldot,Tldot] = EDL(Nl,Tl,Yg,Tg);

for i = 1:(M+1)

    temp = spline(x,Yg(i,:));
    temp = fnder(temp);
    temp = ppval(temp,x);

    Ygdot(i,:) = Ygdot(i,:)./temp -1;

    temp = spline(x,Tg(i,:));
    temp = fnder(temp);
    temp = ppval(temp,x);

    Tgdot(i,:) = Tgdot(i,:)./temp -1;

end

for j = 1:(N+1)

    temp = spline(y,Nl(:,j));
    temp = fnder(temp);
    temp = ppval(temp,y);

    Nldot(:,j) = Nldot(:,j)./temp' -1;

    temp = spline(y,Tl(:,j));
    temp = fnder(temp);
    temp = ppval(temp,y);

    Tldot(:,j) = Tldot(:,j)./temp' -1;

end

```

```

Ygdot_rms = RMS2(Ygdot);
Tgdot_rms = RMS2(Tgdot);
Nldot_rms = RMS2(Nldot);
Tldot_rms = RMS2(Tldot);

var2 = tempvar2;

if var3 == 1,          [M,N] = deal(N,M);          end

table(Ygdot_rms,Tgdot_rms,Nldot_rms,Tldot_rms)

```

Analise5

```

% filtrando os 10% maiores valores dos DBs
ind1 = (M+1)*(N+1);          ind2 = ceil(0.90*ind1);

Analise_rms = zeros(M+1,N+1,4);          TEMP = zeros(1,4);

Analise_rms(:, :, 1) = Ygdot;
Analise_rms(:, :, 2) = Tgdot;
Analise_rms(:, :, 3) = Nldot;
Analise_rms(:, :, 4) = Tldot;

for i = 1:4
    temp = reshape(Analise_rms(:, :, i), ind1, 1);
    temp = abs(temp);
    temp = sort(temp);
    temp = temp(1:ind2);
    TEMP(i) = RMS2(temp);
end
table(TEMP(1),TEMP(2),TEMP(3),TEMP(4))

```

Analise6

```

%% CALCULO DAS EQ AUXILIARES E DERIVADAS
Ylsat = Y_Ydot_sat(Tl);          [Ygsat,dYgsat] = Y_Ydot_sat(Tg);

% calculando as propriedades estrela

DY = Yg-Ygsat;          Hs = Hstar(DY);          temp = Hs.*DY;

Cpg = Cpa + Yg*Cpv;          Cpgs = Cpg - temp*(Cpv - Cpl);          Ygs = Yg - temp;

DH = (Cpv - Cpl)*Tg + lamb;          L1 = Hs.*DH;          alphas = L1.*dYgsat;

% calculando a quantidade de vapor transferida

if var1 == 1,          n = kYA*R*log((Ylsat + R)./(Ygs + R));
else          n = kYA*(Ylsat - Ygs);
end

% calculando a quantidade de calor transferida

if var1 == 1,

    hA = kYA*Le*R*(Cpgs + alphas)./(R+Ygs);

```

```

a = n*Cpv./hA;      F = a./(1 - exp(-a));      Q = hA.*F.*(T1-Tg);
else      hA = kYA*Le*Cpa;      Q = hA*(T1-Tg);
end

% calculando os Lambdas
L2 = Na*(Cpgs + alphas);

% calculando os Thetas
T1 = Cpv*Tg + lamb - Cpl*T1;      T2 = -N1*Cpl;

% calculando as derivadas
Nldot = -n*Y;      Tldot = Y*(Q + n.*T1)./T2;
Ygdot = n*X/Na;      Tgdot = X*(Q + n.*L1)./L2;
Sat_percent = 100*sum(sum(DY>0))/((M+1)*(N+1))

% DELIMITANDO AS REGIÕES DE SATURAÇÃO
if any(DY>0)
    if var2 == 0

        [C,h] = contour(x*X,y*Y,Hs,2);

    else

        [C,h] = contour(x*X,y*Y,Hs,15,'ShowText','on');
        texth = clabel(C,h,'FontSize',10,'Color','k','Rotation',0);

        for i = 1:length(texth)

            textstr = get(texth(i),'String');      textnum =
str2double(textstr);
            textstr = sprintf('%0.2f',textnum);
set(texth(i),'String',textstr);

            end

        end

        axis ij; xlabel('x'), ylabel('y','Rotation',0), title('Perfil de Hs')
end

```

Analise7

```

% Análise do gás frio/úmido
Tg_pp = spline(y,Tg(:,end));      % PP de Tg na saída
y_id = fzero(@(y) ppval(Tg_pp,y)-Tg_i,1);      % altura da saída
fria

Yg_pp = spline(y,Yg(:,end));      % PP de Yg na saída

```

```

Yg_pp = fnint(Yg_pp); % PP de YgM na saida
YgM1 = ppval(Yg_pp,1); % YgM na saida
YgM2 = ppval(Yg_pp,y_id); % YgM na saida quente
YgM = (YgM1-YgM2)/(1-y_id); % YgM na saida fria

Hg = EntalpiaG(Yg(:,end),Tg(:,end)); % Hg na saida
Hg_pp = spline(y,Hg); % PP de Hg na saida
Hg_pp = fnint(Hg_pp); % PP de HgM na saida
HgM1 = ppval(Hg_pp,1); % HgM na saida
HgM2 = ppval(Hg_pp,y_id); % HgM na saida quente
HgM = (HgM1-HgM2)/(1-y_id); % HgM na saida fria
TgM = fzero(@(TgM) EntalpiaG(YgM,TgM) - HgM,Tg_i); % TgM na saida

Mg = Na*Y*Z*(1-y_id);
y_sep = y_id*Y;

YgR = 100*YgM/Y_Ydot_sat(TgM);

table(y_sep,Mg,TgM,YgM,YgR)

```

Análise8

```

% Análise do erro rms - método de BS
clc; lMax = 15; [em,er] = deal(zeros(lMax,1));

[r1,r2,u1m,u2m,dm,dr] = deal(zeros(M+1,lMax));

[u1,u2] = deal(zeros(M+1,1)); nSteps = 2

[u1(:),u2(:)] = deal(u0(1),u0(2)); [v1,v2] = AvancaV(u1,u2);

[r1(:,1),r2(:,1)] = midpoint(u1,u2,v1,v2,nSteps);

[u1m(:,1),u2m(:,1)] = deal(r1(:,1),r2(:,1));

[u1r,u2r] = deal(u1m,u2m);

for l = 2:lMax
    % Increase the number of steps by 2 & refine results by
    % Richardson extrapolation.

    nSteps = 2*l

    [r1(:,1),r2(:,1)] = midpoint(u1,u2,v1,v2,nSteps);

    [u1m(:,1),u2m(:,1)] = deal(r1(:,1),r2(:,1));

    [r1,r2] = richardson(r1,r2,l);

    [u1r(:,1),u2r(:,1)] = deal(r1(:,1),r2(:,1));

    % Check for convergence.

    dm(:,1) = u2m(:,1) - u2m(:,l-1); em(1) = rms(dm(:,1));
    dr(:,1) = u2r(:,1) - u2r(:,l-1); er(1) = rms(dr(:,1));

    % if er(k) < tol; return; end

```

```

end

[em,er] = deal(em(2:end),er(2:end));

format long;    [em,er],    format short;

%%

lmax = lMax-1;    Sum = [em,er];    Sum = Sum(1:lmax,:);    n = 1:lmax;

for i = lmax:-1:2,    Sum(i,:) = sum(Sum(1:i,:));    end;

plot(n,Sum(:,1), '* ',n,Sum(:,2), '* ')
xlim([1 lmax]);
xlabel('numero de extrapolações');
ylabel({'erro rms';'acumulado'},'Rotation',0,'Position',[0,.0106]);

```

AvancaU

```

function [u1,u2] = AvancaU(u1,u2,v1,v2)

global var4 EDU Hn

if    var4 == 2,    [u1,u2] = EMP(u1,u2,v1,v2);

elseif var4 == 1,    [u1,u2] = midpoint(u1,u2,v1,v2,2);

elseif var4 == 0,    [v1,v2] = EDU(u1,u2,v1,v2);
                    [u1,u2] = deal(u1 + Hn*v1,u2 + Hn*v2);

end

end

```

AvancaV

```

function [v1,v2] = AvancaV(u1,u2)

global var5 x2

if var5 == 1,    % usar RK4

    ppu1 = spline(x2,u1);    ppu2 = spline(x2,u2);

    [v1,v2] = RK4(ppu1,ppu2);

else    % usar euler

    [v1,v2] = euler(u1,u2);

end

end

```

EDG

```
function [Ygdot,Tgdot] = EDG(Yg,Tg,Nl,Tl)
% Calcula as derivadas das propriedades do gas

global R var1 Cpa Cpv Cpl lamb X kYA Le Na

Ylsat = Y_Ydot_sat(Tl); [Ygsat,dYgsat] = Y_Ydot_sat(Tg);

% calculando as propriedades estrela

DY = Yg-Ygsat; Hs = Hstar(DY); temp = Hs.*DY;

Cpg = Cpa + Yg*Cpv; Cpgs = Cpg - temp*(Cpv - Cpl); Ygs = Yg - temp;

DH = (Cpv - Cpl)*Tg + lamb; L1 = Hs.*DH; alphas = L1.*dYgsat;

% calculando a quantidade de vapor transferida

if var1 == 1, n = kYA*R*log((Ylsat + R)./(Ygs + R));
else n = kYA*(Ylsat - Ygs);
end

% calculando a quantidade de calor transferida

if var1 == 1,

    hA = kYA*Le*R*(Cpgs + alphas)./(R+Ygs);

    a = n*Cpv./hA; F = a./(1 - exp(-a)); Q = hA.*F.*(Tl-Tg);

else hA = kYA*Le*Cpa; Q = hA*(Tl-Tg);
end

% calculando os Lambdas

L2 = Na*(Cpgs + alphas);

Ygdot = n*X/Na; Tgdot = X*(Q + n.*L1)./L2;

end
```

EDL

```
function [Nldot,Tldot] = EDL(Nl,Tl,Yg,Tg)
% Calcula as derivadas das propriedades do liquido

global R var1 Cpa Cpv Cpl lamb Y kYA Le

Ylsat = Y_Ydot_sat(Tl); Ygsat = Y_Ydot_sat(Tg);

DY = Yg-Ygsat; Hs = Hstar(DY); temp = Hs.*DY; Ygs = Yg - temp;

% calculando a quantidade de vapor transferida

if var1 == 1, n = kYA*R*log((Ylsat + R)./(Ygs + R));
else n = kYA*(Ylsat - Ygs);
```

```

end

% calculando a quantidade de calor transferida

if var1 == 1,

    Cpg = Cpa + Yg*Cpv;                Cpgs = Cpg - temp*(Cpv - Cpl);

    DH = (Cpv - Cpl)*Tg + lamb;        [~,dYgsat] = Y_Ydot_sat(Tg,Ygsat);

    alphas = Hs.*DH.*dYgsat;          hA = kYA*Le*R*(Cpgs + alphas)./(R+Ygs);

    a = n*Cpv./hA;                    F = a./(1 - exp(-a));                Q = hA.*F.*(Tl-Tg);

else    hA = kYA*Le*Cpa;                Q = hA*(Tl-Tg);
end

% calculando os Thetas

T1 = Cpv*Tg + lamb - Cpl*Tl;          T2 = -Nl*Cpl;

Nldot = -n*Y;                        Tldot = Y*(Q + n.*Tl)./T2;

end

```

EMP

```

function [u1,u2] = EMP(u1,u2,v1,v2)

% função Extrapolated Midpoint: avança a solução das propriedades do
% componente principal em uma 'coluna', isto é, a distancia Hn = 1/N.

global M tol nSteps

lMax = 25;

[r1,r2] = deal(zeros(M+1,lMax));      % Storage for Richardson extrapolation.

nSteps = 2;                          % Start with two integration steps.

[r1(:,1),r2(:,1)] = midpoint(u1,u2,v1,v2,nSteps);    rOld = r2(:,1);

for l = 2:lMax
    % Increase the number of steps by 2 & refine results by Richardson
    % extrapolation.
    nSteps = 2*l;

    [r1(:,1),r2(:,1)] = midpoint(u1,u2,v1,v2,nSteps);

    [r1,r2] = richardson(r1,r2,l);

    dr = r2(:,1) - rOld;                e = rms(dr);        % Check for convergence.

    if e < tol,    [u1,u2] = deal(r1(:,1),r2(:,1));    return; end

    rOld = r2(:,1);

```

```

end

error('EMP method did not converge')

end

```

EntalpiaG

```

function Hg = EntalpiaG(Yg,Tg)

global Cpa Cpv Cpl lamb

Ygsat = Y_Ydot_sat(Tg);      DY = Yg - Ygsat;      Hs = Hstar(DY);

temp = Hs.*DY;      Ygs = Yg - temp;

Cpg = Cpa + Yg*Cpv;      Cpgs = Cpg - temp*(Cpv - Cpl);

Hg = Cpgs.*Tg + Ygs*lamb;

end

```

euler

```

function [v1,v2] = euler(u1,u2)

global v0 M EDV Hm

[v1,v2] = deal(v0(:,1),v0(:,2));
[t1,t2] = deal(v1(1),v2(1));

for i = 2:(M+1)

    [t1,t2] = EDV(t1,t2,u1(i-1),u2(i-1));

    t1 = v1(i-1) + Hm*t1;
    t2 = v2(i-1) + Hm*t2;

    [v1(i),v2(i)] = deal(t1,t2);

end

end

```

Hstar

```

function Hs = Hstar(DY)

global b K var2

if var2 == 0, Hs = DY>0;
else Hs = 1./(1 + exp(K - b*DY));
end

```

end

midpoint

```
function [u1,u2] = midpoint(u1,u2,v1,v2,nSteps)

global Hn EDU

h = Hn/nSteps;          U0 = [u1,u2];          [u1,u2] = EDU(u1,u2,v1,v2);

U1 = U0 + h*[u1,u2];    [u1,u2] = deal(U1(:,1),U1(:,2));

[v1,v2] = AvancaV(u1,u2);

for k = 2:nSteps

    [u1,u2] = EDU(u1,u2,v1,v2);          U2 = U0 + 2*h*[u1,u2];

    [u1,u2] = deal(U2(:,1),U2(:,2));    [v1,v2] = AvancaV(u1,u2);

    [U0,U1] = deal(U1,U2);

end

[u1,u2] = EDU(u1,u2,v1,v2);          U2 = 0.5*(U2 + U0 + h*[u1,u2]);

[u1,u2] = deal(U2(:,1),U2(:,2));

end
```

props

```
function [Cpa,Cpv,Cpl,lam] = props(Tl_avg,Tg_avg)

K0 = 273.15;          Tl = Tl_avg + K0;          Tg = Tg_avg + K0;

K_Cpa = [1.0453560,    -3.1617830,    7.0838140,    -2.70520900];
K_Cpv = [1.3605000,    2.3133400,    -2.4678400,    5.91332000];
K_Cpl = [8.1559900,    -2.8062700,    5.1128300,    -2.17582000];
K_lam = [3.4831814,    -5.8627703,    1.2139568,    -1.40290431];

K_Cpa = K_Cpa.*10.^[0,    -4,    -7,    -10];
K_Cpv = K_Cpv.*10.^[0,    -3,    -13,    -16];
K_Cpl = K_Cpl.*10.^[0,    -2,    -5,    -16];
K_lam = K_lam.*10.^[3,    0,    -2,    -5];

p_Cpa = [0, 1, 2, 3]';          Cpa = K_Cpa*Tg.^p_Cpa;
p_Cpv = [0, 1, 5, 6]';          Cpv = K_Cpv*Tg.^p_Cpv;
p_Cpl = [0, 1, 2, 6]';          Cpl = K_Cpl*Tl.^p_Cpl;
p_lam = [0, 1, 2, 3]';          lam = K_lam*K0.^p_lam;
```

richardson

```
function [r1,r2] = richardson(r1,r2,l)    % Richardson extrapolation.
```

```

for m = l-1:-1:1

    c = (1/(1-1))^(2*(1-m));    c = 1/(1-c);

    r1(:,m) = r1(:,m+1) - c*(r1(:,m+1) - r1(:,m));
    r2(:,m) = r2(:,m+1) - c*(r2(:,m+1) - r2(:,m));

end

end

```

RK4

```

function [v1,v2] = RK4(ppu1,ppu2)

global v0 M EDV Hm

[v1,v2] = deal(v0(:,1),v0(:,2));
[t1,t2] = deal(v1(1),v2(1));
x1 = 0;

for i = 2:(M+1)

    [u1,u2] = deal(ppval(ppu1,x1),ppval(ppu2,x1));

    [K1,L1] = EDV(t1,t2,u1,u2);    [K1,L1] = deal(Hm*K1,Hm*L1);

    x1 = x1+Hm/2;    [u1,u2] = deal(ppval(ppu1,x1),ppval(ppu2,x1));

    [K2,L2] = EDV(t1+K1/2,t2+L1/2,u1,u2);    [K2,L2] = deal(Hm*K2,Hm*L2);

    [K3,L3] = EDV(t1+K2/2,t2+L2/2,u1,u2);    [K3,L3] = deal(Hm*K3,Hm*L3);

    x1 = x1+Hm/2;    [u1,u2] = deal(ppval(ppu1,x1),ppval(ppu2,x1));

    [K4,L4] = EDV(t1+K3,t2+L3,u1,u2);    [K4,L4] = deal(Hm*K4,Hm*L4);

    t1 = t1 + (K1 + 2*K2 + 2*K3 + K4)/6;
    t2 = t2 + (L1 + 2*L2 + 2*L3 + L4)/6;

    [v1(i),v2(i)] = deal(t1,t2);

end

end

```

RMS2

```

function ret = RMS2(DBME)

[m,n] = size(DBME);    ret = DBME.*DBME;

ret = sum(sum(ret));    ret = sqrt(ret/(m*n));

end

```

Y_Ydot_Sat

```
function [Y,Ydot] = Y_Ydot_sat(T,Ysat)

global P var1 R

[A,B,C] = deal(16.56989,3984.92,233.426);

if nargin >1, Y = Ysat;

else    Psat = exp(A - B./(T+C));

        if var1 == 1,    Y = Psat*R./(P-Psat);
        else            Y = Psat*R/P;
        end

end

if nargin > 1,          Ydot = B*Y./(T+C).^2;
    if var1 == 1,      Ydot = Ydot.*(1+Y/R);
end

end
```