

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**ACELERAÇÃO DE CÁLCULOS E VISUALIZAÇÃO DE PROPRIEDADES
TERMODINÂMICAS**

**DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA**

AUTOR:	ROGÉRIO SOARES DA SILVA
ORIENTADOR(A):	PROF.^a ANA ROSA MENDES PRIMO, PhD
CO-ORIENTADOR:	PROF. RICARDO LESSA AZEVEDO, DR

**RECIFE – PERNAMBUCO – BRASIL
FEVEREIRO – 2004**

S586c

Silva, Rogério Soares da.

Aceleração de cálculos e visualização de propriedades termodinâmicas / Rogério Soares da Silva . _ Recife : O Autor , 2004.

xii, 55 folhas : il. ; fig. e tabelas.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco . CTG. Engenharia Mecânica, 2004.

Inclui bibliografia e apêndices.

1. Propriedades termodinâmicas – Software . 2. Diagramas termodinâmicos. 3. Processos e sistemas térmicos. I. Título.

621

CDD (21.ed.)

UFPE
BCTG/2004-12

"ACELERAÇÃO DE CÁLCULOS E VISUALIZAÇÃO DE PROPRIEDADES
TERMODINÂMICAS".

ROGÉRIO SOARES DA SILVA

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO
TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

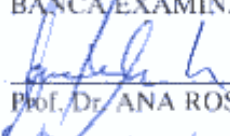
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: PROCESSOS E SISTEMAS TÉRMICOS
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA/CTG/EEP/UFPE


Prof. Dra. ANA ROSA MENDES PRIMO
ORIENTADORA/PRESIDENTE


Prof. Dr. RICARDO LESSA AZEVEDO
CO-ORIENTADOR

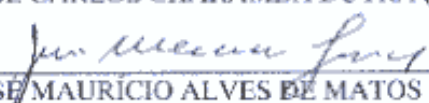

Prof. Dr. SEVERINO LEOPOLDINO URTIGA FILHO
VICE-COORDENADOR DO CURSO

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. ANA ROSA MENDES PRIMO (UFPE)


Prof. Dr. RICARDO LESSA AZEVEDO (UFPE)


Prof. Dr. JOSÉ CARLOS CHARAMBA DUTRA (UFPE)


Prof. Dr. JOSÉ MAURÍCIO ALVES DE MATOS GURGEL (UFPE)

**ACELERAÇÃO DE CÁLCULOS E VISUALIZAÇÃO DE PROPRIEDADES
TERMODINÂMICAS**

AGRADECIMENTOS

MEUS PAIS ARLETE E SÉRGIO

PROF.^a ANA ROSA M. PRIMO

PROF. WILHELM TEGETHOFF

ANTÔNIO CLAUDENÊ CORREIA

PETERSON CAVALCANTE

CAPES

DEMEC

ACELERAÇÃO DE CÁLCULOS E VISUALIZAÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

Autor: Rogério Soares da Silva

Orientadora: Prof^a. Ana Rosa Mendes Primo, Ph.D

Co-Orientador: Prof. Ricardo Lessa Azevedo, Dr

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um *software* para aceleração de cálculos de propriedades termodinâmicas por meio de interpolação linear de dados previamente calculados por equações de estado de múltiplos parâmetros, com pressão e entalpia como argumentos de entrada. A precisão dos valores interpolados encontra-se dentro dos parâmetros pré-estabelecidos. O programa incorpora a construção de um diagrama termodinâmico pressão-entalpia para a visualização de isotermas, isocóricas e isentrópicas, assim como fornece de forma imediata o valor da temperatura, densidade, entropia e título.

É indiscutível a importância do conhecimento das propriedades termodinâmicas em qualquer projeto de sistema térmico ou equipamento de refrigeração. Tendo como precursora a equação de estado de van der Waals, passando pelas equações cúbicas e viriais, chegou-se à fonte mais precisa de dados de propriedades termodinâmicas: as equações empíricas de estado de múltiplos parâmetros. Se bem desenvolvidas, estas são capazes de representar propriedades termodinâmicas tão precisamente quanto os mais precisos dados experimentais. Quando isso acontece, tais equações tornam-se equações de referência para várias substâncias, não havendo necessidade de recorrer a dados experimentais ou tabelas.

As equações de estado de múltiplos parâmetros só puderam evoluir graças à crescente capacidade de processamento dos computadores. Na simulação de sistemas térmicos, há a necessidade de se obter dados precisos e imediatos ao longo de um ciclo termodinâmico. Uma simulação de uma unidade térmica pode exigir centenas de dados de várias propriedades termodinâmicas aplicadas a vários componentes de um ciclo, tais como: compressor, bomba, evaporador, condensador, caldeira, etc, com um consumo de tempo considerável, implicando, assim, em um custo adicional ao trabalho/hora gasto por um profissional.

As equações de estado de múltiplos parâmetros são originalmente desenvolvidas em função da temperatura e densidade. Em aplicações de engenharia, pressão e entalpia ou temperatura e entropia são largamente empregadas como argumentos de entrada. Assim, estas equações passam a utilizar processos iterativos que consomem um tempo maior. Este trabalho propõe uma forma de reduzir este tempo a ponto de se obter propriedades termodinâmicas em um tempo bastante inferior ao consumido pelas equações de estado.

CALCULUS ACCELERATION AND VISUALIZATION OF THERMODYNAMIC PROPERTIES

Author: Rogério Soares da Silva

Supervisor: Prof^a. Ana Rosa Mendes Primo, PhD
Co-Supervisor: Prof. Ricardo Lessa Azevedo, Dr

ABSTRACT

This work presents a software to accelerate the calculus of thermodynamic properties using linear interpolation of data, which were previously calculated by multiparameter equation of state with pressure and enthalpy as input arguments. The basic accuracy criteria were achieved. Furthermore, the aim of this work is to build a thermodynamic diagram pressure-enthalpy to visualize isotherms, isochorics and isentropics, as well as to provide any thermodynamic property value immediately.

The importance of thermodynamic properties in any design of thermal system or refrigeration equipment is undoubtedly. After the equation of state of van der Waals and the cubic and virial equations, the state-of-art of equation of state are the empirical multiparameter equation of state. If properly designed they are able to describe thermodynamic properties of a certain substance within the accuracy of the most accurate experimental data. Thus, these equations become reference equations and there is no need to search data in thermodynamic tables.

The multiparameter equations of state grew as a result of the increasing capacity of computer processing. In refrigeration or thermal systems simulations there is the necessity to get fast and accurate data. A simulation can require hundreds of data of many thermodynamic properties applied to many project devices such as: compressor, pump, evaporator, condenser, boiler etc. All this spends much time, resulting in an additional cost to work/time spent for an engineer.

Theses equations have been originally developed in function of temperature and density. In engineering applications, pressure and enthalpy or temperature and entropy are widely used as input arguments. Therefore, these equations need to use iterative methods that spend more time and this work offer a way to reduce the time spent and to get any property as faster than real-time.

SUMÁRIO

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de símbolos	ix
Lista de figuras	x
Lista de tabelas	xii
1. Introdução	1
2. Revisão de literatura	4
2.1 Equações de estado	4
2.1.1 Equação dos gases perfeitos	4
2.1.2 Equação de van derWaals	4
2.1.3 Equações cúbicas	4
2.1.4 Equação de Benedict-Webbin-Rubin (BWR)	5
2.1.5 Equação virial	6
2.1.6 Equações de estado de múltiplos parâmetros	6
2.2 Métodos de aceleração de cálculos	9
3. Método da grade de pontos	12
3.1 Introdução	12
3.2 Geração da grade de pontos	12
3.3 Passos para a geração da grade de pontos	13
3.4 Método de Busca	15
3.5 Método de interpolação	17
3.6 Cálculos no ambiente MATLAB	19
3.7 Usando C++	20
4. Método da malha	21

4.1 Introdução	21
4.2 Triangulação Delaunay	21
4.3 MATLAB/C++	22
4.4 Pontos gerados em função do calor específico – Método do c_p	25
5. Método da grade de pontos modificada	28
6. Visualização	29
6.1 Visualização da interface gráfica	29
6. 2 A carta psicrométrica	31
7. Resultados e análises	32
7.1 Método da grade de pontos no MATLAB	32
7.1.1 Testes realizados	32
7.1.2 Vantagens do método	34
7.1.3 Desvantagens do método	35
7.1.4 Comentários	35
7.2 Método da malha	35
7.2.1 Vantagens	37
7.2.2 Desvantagem	37
7.3 Método da grade de pontos modificada	37
8. Conclusões e propostas para futuros trabalhos	40
9. Referências bibliográficas	42
APÊNDICE A:	45
APÊNDICE B:	49
APÊNDICE C:	51
APÊNDICE D:	53
APÊNDICE E:	55

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Energia livre de Helmholtz
c_p	Calor específico a pressão constante
c_v	Calor específico a volume constante
d	Expoente de densidade
EOS	Equação de estado
$F(p,T)$	Função termodinâmica genérica (em função de p e T)
h	Entalpia
p	Pressão Expoente de densidade na função exponencial
R	Constante do gás perfeito
s	Entropia
T	Temperatura
t	Expoente temperatura
v	Volume específico

LETRAS GREGAS

α	Energia de Helmholtz reduzida
δ	Densidade reduzida inversa
ρ	Densidade
τ	Temperatura reduzida inversa
ϑ	Parâmetro de temperatura reduzida

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 Ciclo de refrigeração combinado em cascata (Van Wylen, p.291).	1
Figura 1.2 Diagrama p-h para o R22 (CoolPack).	2
Figura 3.1 Malha 2D.	13
Figura 3.2 Malha 3D.	13
Figura 3.3 Definição do domínio p-h.	14
Figura 3.4 Divisão do domínio em subdomínios.	15
Figura 3.5 Quadrilátero onde estará contido o ponto p-h.	16
Figura 3.6 Divisão do quadrilátero.	16
Figura 3.7 Ponto contido no triângulo: P está à direita de todos os vetores.	17
Figura 3.8 Teste dos vetores para detectar a posição do ponto considerado: ponto fora do triângulo.	17
Figura 3.9 Os pontos AOB definem um plano no espaço.	18
Figura 3.10 Grade de pontos.	19
Figura 3.11 Ponto de vista de uma malha.	19
Figura 3.12 Apresentação de todo o domínio construído.	20
Figura 3.13 Resultado do critério de cálculos utilizando a convergência: todas colunas convergem para um único ponto: o ponto crítico.	20
Figura 4.1 Malha gerada para o diagrama pressão-entalpia do refrigerante CO ₂ usando um Δh fixo.	22
Figura 4.2 Malha gerada para o diagrama pressão-entalpia do refrigerante CO ₂ usando o método do c_p .	23
Figura 4.3 Esquematização do algoritmo usado para calcular uma propriedade termodinâmica ao longo da malha.	24
Figura 4.4 Fluxograma para a geração de pontos da malha através do método do c_p	26
Figura 5.1 Esquema de organização dos dados de uma região qualquer.	28
Figura 6.1 Interface gráfica voltada para o usuário avançado.	29
Figura 6.2 Erro relativo para densidade.	30
Figura 6.3 Área com refinamento	30

Figura 6.4 Interface gráfica voltada para o usuário final exibindo linhas de temperatura, densidade, entropia e título constante.	30
Figura 6.5 Tabela para cálculo de propriedades termodinâmicas.	31
Figura 7.1 Gráfico do erro percentual para a densidade no método da grade de pontos.	33
Figura 7.2 Gráfico do erro percentual para a temperatura no método da grade de pontos.	33
Figura 7.3 Variação da densidade com a entalpia ao longo de isobáricas.	34
Figura 7.4 Variação da temperatura com a entalpia.	34
Figura 7.5 Erro percentual para a densidade pelo método da malha.	36
Figura 7.6 Erro percentual para a temperatura pelo método da malha.	36
Figura 7.7 Trecho qualquer da malha indicando na linha tracejada o caminho percorrido pelo cursor.	37
Figura 7.8 Erro percentual para a temperatura pelo método da grade modificada.	38
Figura 7.9 Erro percentual para a densidade pelo método da grade modificada.	38
Figura B.1 (a) é uma triangulação Delaunay e (b), não o é.	49
Figura B.2 Fronteira da malha em destaque.	49
Figura B.3 Lista circular duplamente encadeada.	50
Figura D1 $\Delta p = 250kPa$ $\Delta h = 20kJ / kg$	53
Figura D2 $\Delta p = 150kPa$ $\Delta h = 20kJ / kg$	53
Figura D3 $\Delta p = 50kPa$ $\Delta h = 20kJ / kg$	53
Figura D4 $\Delta p = 250kPa$ $\Delta h = 15kJ / kg$	53
Figura D5 $\Delta p = 250kPa$ $\Delta h = 10kJ / kg$	54
Figura D6 $\Delta p = 250kPa$ $\Delta h = 5kJ / kg$	54
Figura D7 $\Delta p = 250kPa$ $\Delta h = 10kJ / kg$, $\Delta p = 250kPa$ $\Delta h = 5kJ / kg$ (refino).	54
Figura E.1 Interface criada para construir carta psicrométrica.	55

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 Parâmetros para equações de estado cúbicas	5
Tabela 3.1 Limite dos subdomínios utilizados	13
Tabela 4.1 Propriedades calculadas ao longo da linha de saturação	23
Tabela 7.1 Relação de tempo entre interpolação e equações de estado	32
Tabela 7.2 Comparação dos tempos consumidos pelas EOS e o método da malha	37
Tabela 7.3 Comparação dos tempos consumidos pelas EOS e o método da grade de pontos modificada	39
Tabela A.1 Definição de propriedades e suas relações com α	45
Tabela A.2 Derivadas da Equação 2.28	47
Tabela A.3 Derivadas da Equação 2.30	48
Tabela D1 Definição dos passos de pressão e entalpia para o CO ₂	54

1. INTRODUÇÃO

O conhecimento das propriedades termodinâmicas é fundamental nos projetos de sistemas térmicos e de refrigeração, seja no correto dimensionamento de componentes ou na otimização do sistema como um todo. A figura 1.1 mostra um ciclo de refrigeração combinado em cascata. Este sistema é utilizado quando há uma grande diferença de temperatura entre o espaço refrigerado e o meio. Em tal sistema, como em qualquer outro dispositivo térmico, as propriedades do fluido de trabalho ou refrigerante são indispensáveis ao dimensionamento do equipamento.

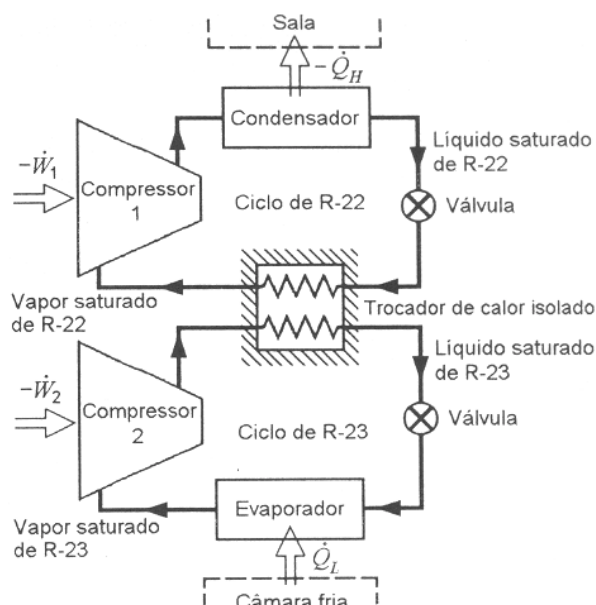


Figura 1.1 – Ciclo de refrigeração combinado em cascata (Van Wylen, p.291).

Propriedades termodinâmicas de substâncias são requeridas em simulações numéricas de processos industriais. Essas simulações podem ser usadas no projeto de processo e controle e análise de segurança. Propriedades como temperatura, densidade, entalpia e pressão são constantemente requeridas em diferentes condições de processo.

Os algoritmos convencionais para cálculo de propriedades termodinâmicas geralmente consistem em muitos processos iterativos, incluindo chamadas de funções complexas e interpolação em tabelas baseadas em dados teóricos e experimentais. Os algoritmos iterativos são lentos e inviáveis, por exemplo, em simulação de processos dinâmicos, que devem ser executados em tempo real. Métodos baseados em tabelas e interpolação linear são rápidos, mas na prática limitados a duas ou três variáveis de entrada.

O presente trabalho propõe uma forma rápida e eficiente de obtenção de propriedades termodinâmicas (temperatura, densidade, entropia e título) ágil o bastante para sua utilização em simulações que exijam dados em tempo real.

A aceleração dos cálculos é feita por interpolação linear de dados fornecidos por tabelas pré-calculadas. Para construir tais tabelas foi usado um programa de computador, onde foi desenvolvida uma plataforma de simulação escrita em C++ no qual estão implementadas as equações de estado. As equações usadas nesta plataforma são conhecidas como equações de estado de múltiplos parâmetros e são baseadas na energia livre de Helmholtz e desenvolvidas por R. Span (2000). Estas são consideradas uma das equações de estado mais precisas que existem atualmente e são capazes de representar com bastante precisão as regiões de líquido, vapor e a região de equilíbrio líquido-vapor e serão discutidas no capítulo 2.

O objetivo inicial neste trabalho é utilizar como dados de entrada dois pares de propriedades independentes: pressão-entalpia e temperatura-entropia. Essas propriedades são

de extremo interesse em aplicações de engenharia. As equações de estado de múltiplos parâmetros foram desenvolvidas de forma a utilizar temperatura e densidade como parâmetros de entrada para fornecer de forma direta as demais propriedades. Dessa forma, pressão-entalpia e temperatura-entropia são argumentos que necessitam de métodos iterativos para fornecer os dados de saída e estes métodos consomem um tempo além do máximo desejado para certas aplicações de engenharia.

A construção do banco de dados usado nas interpolações foi feita visando gerar arquivos de tamanho reduzido e mantendo a precisão dos resultados dentro de uma faixa de erro aceitável ao longo de todo o domínio. Tal faixa de erro é fornecida pelo usuário final.

Esse trabalho também trata da visualização de propriedades termodinâmicas. Essa visualização se refere à construção de diagramas termodinâmicos com isolinhas de temperatura, densidade, entropia e título assim como a visualização de ciclos.

A figura 1.2 mostra um diagrama pressão-entalpia com isolinhas de temperatura (linhas vermelhas), volume específico (linhas verdes) e entropia (linhas azuis) que são largamente usados nos cálculos de projeto. É referente ao ciclo mostrado na figura 1.1. O diagrama da figura 1.2 refere-se ao uso do R22. A figura foi obtida do programa Cool Pack (www.et.du.dk/CoolPack).

O uso dos diagramas é importante na construção de ciclos termodinâmicos, pois pode se visualizar o caminho que o fluido percorre, possibilitando, assim, uma rápida aproximação das propriedades termodinâmicas em pontos de relevância do mesmo, tais como: entrada e saída de um compressor, de um trocador de calor, de uma bomba, de uma válvula ou de uma turbina. Entretanto, dependendo das exigências de precisão, os diagramas não permitem uma avaliação muito precisa das propriedades termodinâmicas.

As tabelas termodinâmicas são uma alternativa ao uso de diagramas e são mais precisas. Podem ser construídas através de dados experimentais ou de equações de estado que procuram representar com exatidão o comportamento $p-v-T$ da substância em questão para vários estados. Propriedades termodinâmicas não mensuráveis como entalpia, entropia e calor específico, por exemplo, são obtidas aplicando-se definições matemáticas ou relações termodinâmicas a tais equações. Isso obriga estas equações a apresentarem um formato que facilite as diferenciações exigidas na determinação destas propriedades. Porém, os resultados são sempre grandes equações que obrigam o uso de computadores para viabilizar seu uso.

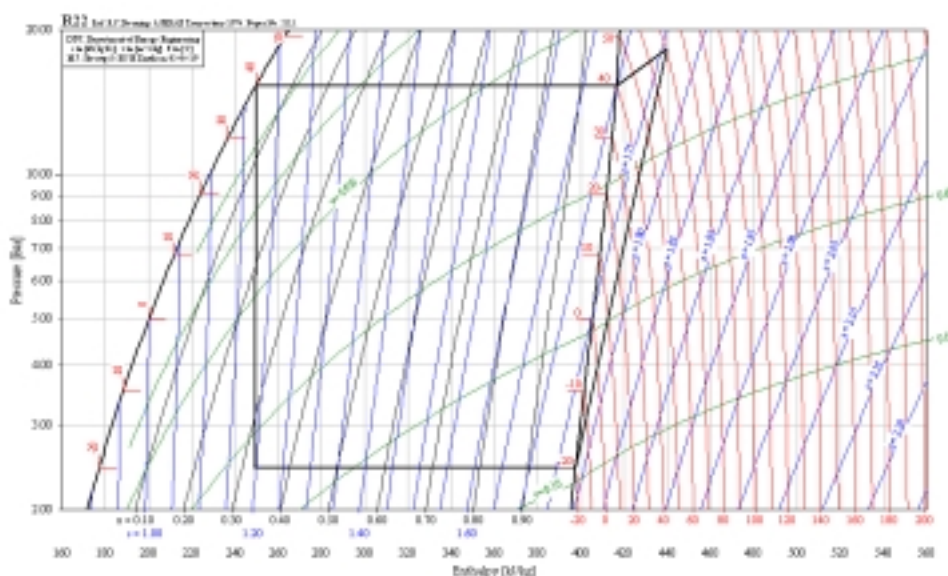


Figura 1.2 – Diagrama p-h para o R22 (CoolPack).

A motivação inicial desse trabalho foi prover uma plataforma de simulação de circuitos termodinâmicos de uma ferramenta de cálculo de propriedades termodinâmicas precisa e rápida. Essa plataforma está sendo desenvolvida no Instituto de Termodinâmica (IFT) da Universidade de Braunschweig, Alemanha, em cooperação com o departamento de engenharia mecânica da UFPE. Os resultados de visualização e aceleração de cálculo de propriedades termodinâmicas serão utilizados no desenvolvimento da referida plataforma de simulação.

2. REVISÃO DE LITERATURA

Neste capítulo serão comentadas as principais maneiras utilizadas para o cálculo de propriedades termodinâmicas.

2.1 Equações de estado

As equações de estado são de extrema importância nos cálculos de projetos em diversos campos da engenharia e nas ciências exatas. No presente trabalho, as equações desempenharam um papel importante na construção de um banco de dados para os cálculos de interpolação, que será discutido mais adiante. A seguir, são apresentadas, de forma sucinta, algumas das mais importantes equações de estado já publicadas e com especial interesse as equações de estado de múltiplos parâmetros.

2.1.1 Equação dos gases perfeitos

De origem empírica, a primeira equação de estado obtida para relacionar pressão, densidade e temperatura é representada por:

$$pv = RT \quad 2.1$$

onde R é a constante do gás. Os gases só se aproximam dessa relação para regiões de baixa pressão.

2.1.2 Equação de van der Waals

No final do século XIX, surge a primeira formulação que descreve de forma qualitativamente correta os estados de vapor, líquido, supercrítico e bifásico líquido-vapor: a equação de van der Waals (1873).

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2} \quad 2.2$$

A equação de van der Waals é uma equação de estado do tipo generalizada e é uma alteração semiteórica da equação dos gases perfeitos. Os parâmetros a e b têm por objetivo corrigir os efeitos das forças intermoleculares e o volume ocupado pelas moléculas, respectivamente. Ambas são funções das constantes críticas da substância em questão.

2.1.3 Equações cúbicas

As equações cúbicas compõem uma classe que inclui muitas equações bastante usadas na indústria. São aproximações que descrevem de forma razoável o comportamento pvT de algumas substâncias. A primeira equação desta classe foi proposta originalmente por van der Waals. As equações cúbicas de estado podem ser expressas na forma geral:

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{(V - \eta)\theta}{(v - b)(v^2 + \delta v + \varepsilon)} \quad 2.3$$

onde b, θ , η e ε são parâmetros que dependem da temperatura e podem ser obtidos a partir de ajustes de dados experimentais ou através de uma relação com ponto crítico. A tabela 2.1 lista os parâmetros desenvolvidos para algumas equações.

Devido à sua simplicidade, essa equação não é suficientemente precisa para descrever as propriedades termodinâmicas para uma larga faixa de temperatura e pressão. Em particular, propriedades derivadas, tais como o calor específico e a velocidade do som no estado de líquido comprimido, apresentam um erro considerável (McLinden et al, 1997). Entretanto, as equações cúbicas de estado podem ser usadas com boa precisão nos cálculos de propriedades de misturas e em relação ao equilíbrio de fases.

Tabela 2.1 – Parâmetros para equações de estado cúbicas

Autor	Ano	θ	η	δ	ϵ
van der Waals	1873	a	b	0	0
Clausius	1880	a/T	b	$2c$	c^2
Berthelot	1899	a/T	b	0	0
Redlich-Kwong	1949	$a/\sqrt{T}$	b	b	0
Soave	1972	$\theta_s(T)$	b	b	0
Lee-Erbar-Edmister	1973	$\theta_L(T)$	$\eta(T)$	b	0
Peng-Robinson	1976	$\theta_{PR}(T)$	b	$2b$	$-b^2$
Patel-Teja	1981	$\theta_{PT}(T)$	b	$b+c$	$-cb$

Rearranjando a equação 2.2 em função do fator de compressibilidade, surge uma função polinomial de grau 3 (daí o nome equação cúbica de estado) fica:

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad 2.4$$

onde

$$A = \frac{ap}{R^2 T^2} \quad 2.5$$

e

$$B = \frac{bp}{RT} \quad 2.6$$

2.1.4 Equação de Benedict-Webbin-Rubin (BWR)

Originada como uma modificação da equação de Beattie-Bridgeman, a primeira equação de estado capaz de descrever uma larga faixa de estado qualitativamente correta foi proposta em 1940 por Benedict, Webb e Rubin, e é representada pela seguinte expressão:

$$p = \rho RT + \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} \right) \rho^2 + (bRT - a) \rho^3 + a \alpha \rho^6 + \frac{c \rho^3 (1 + \gamma \rho^2)}{T^2} \exp(-\gamma \rho^2) \quad 2.7$$

Esta equação é formada por 8 constantes empíricas A_0 , B_0 , C_0 , a , b , c , α e γ . Para regiões de baixa densidade, a substância se aproxima do comportamento de um gás perfeito e é representada pelo primeiro termo da equação, enquanto que os demais termos tendem a zero. Os dois termos seguintes são análogos ao segundo e terceiro coeficientes viriais. Os dois últimos termos são empíricos e a função exponencial é usada para ajustar as isotermas no estado de líquido comprimido.

Desde sua publicação, a equação de Benedict-Webb-Rubin, também conhecida como equação BWR, é usada na sua forma original ou modificada. Das formas modificadas, podem ser destacadas algumas, como as de: Martin-Hou (1955), Strohbridge (1962), Jabobsen e Stewart (1973), Lee-Kesler (1975) e Younglove e McLinden (1994). A mais notável equação

é a de Jacobsen e Stewart e é conhecida como “a equação modificada BWR”, a qual pode ser considerada como o primeiro exemplo bem sucedido de uma equação de referência de estado. A equação MBWR expressa a pressão como uma função explícita da temperatura e da densidade molar, apresentando-se na forma:

$$p = \sum_{i=1}^9 a_i \rho^i + \exp\left(-\frac{\rho^2}{\rho_c^2}\right) \sum_{i=10}^{15} a_i \rho^{2i-17} \quad 2.8$$

onde os coeficientes a_i são funções da temperatura resultante de um total de 32 parâmetros ajustáveis. A equação de estado MBWR tem sido aplicada a uma larga variedade de fluidos, incluindo hidrocarbonos, líquidos criogênicos e refrigerantes. Esta é a base para a atual padronização internacional das propriedades do R123 e reproduz dados experimentais com um desvio médio absoluto de 0,04% para a densidade, 0,05% para pressões de vapor e de 0,75% para o calor específico.

2.1.5 Equação virial

Em 1901, Kamerlich Onnes introduziu a equação de estado virial. Trata-se de uma equação teórica deduzida a partir da teoria cinética e da termodinâmica estatística e é representada por uma série de potências:

$$\frac{p(T, \rho)}{\rho RT} = 1 + B(T)\rho + C(T)\rho^2 + D(T)\rho^3 + \dots \quad 2.9$$

onde $B(T)$, $C(T)$ e $D(T)$ são o segundo, terceiro e quarto coeficientes viriais, respectivamente. Todos os coeficientes são funções apenas da temperatura e estão relacionados às interações intermoleculares. Por exemplo, $B(T)$ é uma função de interação entre duas moléculas, $C(T)$ entre três moléculas e assim por diante. Teoricamente, a equação virial pode ser usada para descrever com precisão moderada as propriedades termodinâmicas de um fluido para todos os estados. Entretanto, descrever o comportamento de fluidos densos requer termos de ordens mais altas e estes podem não ser obtidos de forma satisfatória pela teoria ou por medidas experimentais. Dessa forma, a equação é geralmente truncada no quarto termo e é aplicada apenas às propriedades na fase de vapor de gases não polares até uma vez e meia a sua densidade crítica. Para fluidos polares, tais como os refrigerantes HFC, a região de aplicabilidade é reduzida.

2.1.6 Equações de estado de múltiplos parâmetros

Considerada a fonte mais precisa para dados de propriedades termodinâmicas, a equação de estado de múltiplos parâmetros é capaz de representar valores de propriedades termodinâmicas de certas substâncias com a mesma precisão dos mais precisos dados experimentais. Isso a torna uma equação de referência, podendo-se desprezar dados experimentais. Por essa razão, o presente trabalho utiliza as equações de estado de múltiplos parâmetros como referência para todos os dados termodinâmicos aqui utilizados. Essas equações foram desenvolvidas e implementadas por terceiros e fazem parte de uma plataforma de simulação para otimização de ciclos de refrigeração. Esta plataforma foi largamente usada tanto para criar o banco de dados como avaliar a precisão dos dados finais. A seguir, será dada uma maior ênfase a este tipo de equação, do que às demais, por motivos já comentados.

Atualmente, estas equações são geralmente formuladas em função da energia livre de Helmholtz, com temperatura e densidade como variáveis independentes. Esta escolha faz com

que os algoritmos para o cálculo das propriedades e o desenvolvimento das equações sejam mais sistemáticos. A formulação das equações de estado segue o seguinte raciocínio:

- define-se uma formulação para a energia de helmholtz em função de T , p e $a(T, p)$;
- utiliza-se relações termodinâmicas para se obter as propriedades desejadas, como mostram as equações 2.10 a 2.13, entre outras;

pressão:
$$p = -\left(\frac{\partial a}{\partial v}\right)_T \quad 2.10$$

energia interna/entropia
$$u = a + Ts \therefore s = -\left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_v \quad 2.11$$

entalpia:
$$h = u + pv \quad 2.12$$

calor específico:
$$c_p = -\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p \quad 2.13$$

As equações de Helmholtz são geralmente formuladas na forma reduzida

$$\alpha(\tau, \delta) = \frac{a(T, \rho)}{RT} \quad 2.14$$

com:

$$\tau = \frac{T_r}{T} \quad 2.15$$

e

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_r} \quad 2.16$$

Esta, por sua vez, é dividida em uma parte que descreve o comportamento de um gás perfeito α^0 e em outra parte que descreve o comportamento residual α^r de um fluido real, a uma dada temperatura e densidade. Sua forma geral é:

$$\alpha(\tau, \delta) = \alpha^0(\tau, \delta) + \alpha^r(\tau, \delta) \quad 2.17$$

A grande vantagem da equação 2.17 é que qualquer propriedade termodinâmica pode ser obtida derivando-a. O apêndice A contém listas com algumas propriedades termodinâmicas e como estas podem ser calculadas por meio das derivadas da equação 2.17.

A parte ideal, $\alpha^0(\tau, \delta)$, pode ser determinada relacionando-a com o calor específico do gás perfeito a volume constante, $c_v^0(T)$. Pela definição da energia de Helmholtz, temos:

$$a = u - Ts \quad 2.18$$

e das relações de Maxwell

$$\left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_p = -s \quad 2.19$$

de 2.18 e 2.19, tem-se:

$$u = a - T \left(\frac{\partial a}{\partial T} \right)_v \quad 2.20$$

Substituindo a por α , tem-se:

$$u = a - T \left(\frac{\partial a}{\partial T} \right)_v = RT\alpha - T \left(\frac{\partial(RT\alpha)}{\partial T} \right)_v = -RT^2 \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_v \quad 2.21$$

Pela definição de c_v , tem-se:

$$c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v \quad 2.22$$

Derivando 2.21 em relação a T e igualando a 2.22, tem-se:

$$c_v = -2RT \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_v - RT^2 \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2} \right)_v \quad 2.23$$

Substituindo T por τ e v por δ nas derivadas, tem-se:

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_v = -\frac{\tau^2}{T_r} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} \right)_\delta \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2} \right)_v = 2 \frac{\tau^3}{T_r^2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} \right)_\delta + \frac{\tau^4}{T_r^2} \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial \tau^2} \right)_\delta \quad 2.24$$

Assim, o calor específico a volume constante, apresenta-se como:

$$c_v = -R\tau^2 \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial \tau^2} \right)_\delta = -R\tau^2 \left(\left(\frac{\partial^2 \alpha^0}{\partial \tau^2} \right)_\delta + \left(\frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \tau^2} \right)_\delta \right) \quad 2.25$$

e o c_v^0 , tem a forma:

$$c_v^0 = -R\tau^2 \left(\frac{\partial^2 \alpha^0}{\partial \tau^2} \right)_\delta \quad 2.26$$

O calor específico do gás perfeito a volume constante, c_v^0 , pode ser definido na sua forma reduzida como um somatório de termos polinomiais e um somatório de termos exponenciais:

$$\frac{c_v^0(\tau)}{R} = n_0 + \sum_{i=1}^{I_{POL}} n_i \tau^{t_i} + \sum_{k=1}^{K_{PE}} m_k (\vartheta_k \tau)^2 \frac{e^{\vartheta_k \tau}}{(e^{\vartheta_k \tau} - 1)^2} \quad 2.27$$

O segundo termo da equação 2.27 é conhecido como função de Planck-Einstein e representa a vibração interna das moléculas. Finalizando a primeira parte, $\alpha^0(\tau, \delta)$ é obtido pela integração dupla da equação 2.26.

$$\alpha^0(\tau, \delta) = \int \left(\int -\frac{c_v^0}{R\tau^2} d\tau \right) d\tau + \ln\left(\frac{\delta}{\delta_0}\right) \quad 2.28$$

A maior dificuldade em desenvolver as equações de estado de múltiplos parâmetros é encontrar uma formulação para a parte residual $\alpha^r(\tau, \delta)$. Geralmente tal formulação é escrita como uma soma de termos polinomiais e exponenciais, como:

$$\alpha^r(\tau, \delta) = \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i \tau^{t_i} \delta^{d_i} + \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i \tau^{t_i} \delta^{d_i} \exp(-\delta^{p_i}) \quad 2.29$$

Atualmente, não há nenhuma teoria que descreva α^r com precisão suficiente para toda faixa de estados de um fluido. Assim, o desenvolvimento de formulações para α^r é determinado por uma representação empírica de dados experimentais. Span (2000) descreve como as formulações para a energia residual de Helmholtz podem ser desenvolvidas baseadas em dados para diferentes propriedades termodinâmicas. No apêndice A, encontram-se definições para várias propriedades termodinâmicas em termos da energia livre de Helmholtz (tabela A.1) assim como as derivadas necessárias (tabela A.2 e tabela A.3).

2.2 Métodos de aceleração de cálculos

Em várias aplicações de engenharia existe um grande interesse em se obter de forma rápida e precisa dados de propriedades termodinâmicas. Alguns programas usados em simulações de ciclos ou processos precisam ser rápidos o bastante para fornecer, em tempo real ou de forma *on line*, as propriedades termodinâmicas exigidas com a precisão desejada. Uma grande número de combinações de propriedades independentes como: p, T ; p, ρ ; T, ρ ; p, h e T, s são utilizadas, mas a maioria dos algoritmos que descrevem as equações de estado necessitam de complexos e demorados processos iterativos. Müller (1994) cita como exemplo programas que fazem análise termohidráulica na área de segurança de reatores nucleares. Estas análises são feitas em computadores velozes e consomem horas de cálculos. A maior parte deste tempo é consumida calculando-se as propriedades termodinâmicas da água e do vapor, e em alguns casos chega a consumir até 50% do tempo total.

Para contornar esse problema, existem dois caminhos que podem ser seguidos:

- Desenvolvimento de equações simplificadas ou funções de aproximação com precisão adequada e que representem determinadas faixas da região de um problema particular.
- Geração de tabelas para posterior interpolação de dados.

A primeira estratégia consiste em desenvolver formulações simples, que descrevem as propriedades para várias e pequenas faixas de pressão, temperatura ou volume específico. Alguns trabalhos abordando esta metodologia são mostrados a seguir.

Em Pátek (1994) foi desenvolvido um conjunto de onze equações com precisão suficiente para aplicações industriais e que descreve as propriedades termodinâmicas da água na região de vapor superaquecido desde a temperatura de saturação até 600°C, para uma faixa de pressão variando de 0,001 até 30MPa. Ele desenvolveu as seguintes funções termodinâmicas: $v(p, T)$, $h(p, T)$, $s(p, T)$, $T(p, h)$, $v(p, h)$, $h(p, s)$, $T(p, s)$, $v(p, s)$, $p(h, s)$ e $T(h, s)$. Todas essas funções foram desenvolvidas na seguinte forma polinomial:

$$\zeta = \sum_{k=1}^N a_k \xi^{n_k} v^{m_k} \quad 2.30$$

onde $\zeta = f(z, x, y)$, $\xi = g(x)$ e $v = h(y)$.

Pátek (1995) desenvolveu cinco equações usando a mesma estrutura da equação 2.1 para descrever propriedades de equilíbrio líquido-vapor para um sistema amônia-água. Todos os parâmetros usados nas equações foram obtidos por ajuste de dados experimentais ou de dados provenientes de equações de estado confiáveis.

Garland e Hand (1989) desenvolveram funções de aproximação para representar as regiões de líquido comprimido e vapor superaquecido para a água em função da pressão e da temperatura. Suas funções foram obtidas através do truncamento no segundo termo da série de Taylor. Considerando uma propriedade termodinâmica arbitrária $F = F(p, T)$ suas representações para a região de líquido comprimido e vapor superaquecido são respectivamente

$$F(p, T) = F_f(T) + \left. \frac{\partial F}{\partial p} \right|_T [p - p_s(T)] \quad 2.31$$

e

$$F(p, T) = F_g(p) + \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_p [T - T_s] \quad 2.32$$

Os autores usaram técnicas de regressão linear e não-linear para desenvolver suas formulações, os resultados são mostrados no apêndice C. Garland e Hand (1989) consideram o uso de tabelas para interpolação uma desvantagem, pois consome uma grande quantidade de memória. Entretanto, este problema não se aplica aos computadores atuais, onde memória passou a ser um recurso abundante e barato.

A segunda estratégia consiste em desenvolver tabelas de dados de propriedades termodinâmicas para posterior interpolação.

No trabalho de Kretschmar (1995) é proposto um algoritmo para a geração de uma tabela de dados de interpolação com densidade de dados otimizada através do uso de transformação de coordenadas. Segundo Kretschmar, a transformação de coordenadas aumenta a precisão da interpolação e reduz o número de dados necessários. Como exemplo, calcula a pressão de saturação por meio de interpolação linear com e sem transformação de coordenadas. Sem transformação, obtém um erro de 0,3% e com a transformação $\ln(p_s)$ e $1/T$, o erro cai para 0,008%. As vantagens da interpolação por ele citadas são:

- Operações matemáticas simples.
- Fácil aplicação de cálculos a outros fluidos, outras funções ou outras faixas de estado simplesmente substituindo a tabela de dados de interpolação.
- Interpolação de funções termodinâmicas diretas e inversas tais como $T=f(h, p)$ e $h=f(T, p)$, com alta consistência numérica requerida na modelagem de processos.

Swesty (1996) apresentou um método para construir tabelas termodinamicamente consistentes por meio de interpolação em uma malha retangular no plano $T - \rho$. Cada ponto T_i, ρ_j corresponde a um valor da energia livre de Helmholtz (F_{ij}), assim como a primeira e segunda derivadas. Com estas derivadas é possível calcular a pressão e a entropia de acordo com as relações de Maxwell. A sua grande preocupação foi garantir que F interpolado tenda a F_{ij} quando (T, ρ) se aproxima de um ponto da malha, ou

$$F \rightarrow F(T_i, \rho_j) \quad 2.33$$

quando $(T, \rho) \rightarrow (T_i, \rho_j)$. O mesmo acontece com a primeira e segunda derivadas em relação à temperatura e densidade.

$$F \rightarrow F(T_i, \rho_j) \quad 2.34$$

$$\frac{\partial F}{\partial T} \rightarrow \frac{\partial F}{\partial T} \Big|_{ij} \text{ e } \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \rightarrow \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \Big|_{ij} \quad 2.35$$

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} \rightarrow \frac{\partial F}{\partial \rho} \Big|_{ij} \text{ e } \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \rightarrow \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \Big|_{ij} \quad 2.36$$

Swesty não trata do espaçamento entre os pontos da malha necessário à precisão dos dados interpolados, pois alega que esta decisão depende da equação de estado a ser usada e de quem utilizará tal método. O resultado é uma função de interpolação *bi-quintic* com 36 termos e 8 coeficientes, que são mostrados no apêndice C.

3. MÉTODO DA GRADE DE PONTOS

3.1 Introdução

As equações de estado usadas pela plataforma de simulação são equações de múltiplos parâmetros baseadas na energia livre de Helmholtz e descritas na obra de R. Span (2000). Tais equações utilizam as propriedades independentes temperatura e densidade como argumentos para calcular de forma direta qualquer outra propriedade. Caso contrário, um ou mais métodos iterativos são aplicados, consumindo muito tempo. Portanto, conseguir uma forma rápida e precisa de calcular propriedades termodinâmicas que não tenham temperatura e densidade como argumentos surgiu dessa necessidade. A grade de pontos foi a primeira idéia nesse sentido. Este trabalho dividiu-se em duas etapas:

- geração da grade de pontos e armazenamento dos mesmos em arquivo.
- leitura de arquivo, leitura de dados de entrada, busca e interpolação.

3.2 Geração da grade de pontos

Diagramas termodinâmicos são bastante usados nos projetos de simulação de sistemas térmicos. Dois tipos são aqui destacados: os diagramas p-h e T-s. O diagrama pressão-entalpia foi o primeiro a ser utilizado nos testes. O princípio de acelerar os cálculos está em ter uma certa quantidade de pontos distribuídos obedecendo a uma certa ordem, em um domínio pré-estabelecido, e associados a estes algumas propriedades pré-calculadas. A obtenção de novos valores é feita por meio de uma interpolação linear em três dimensões (x, y, z) que é uma função extremamente simples, se comparada a uma equação de estado de múltiplos parâmetros. No caso das propriedades, por exemplo, x e y seriam pressão e entalpia e a terceira propriedade a ser calculada seria a temperatura ou densidade. As figuras 3.1 e 3.2 ilustram grade de pontos bi e tri dimensionais.

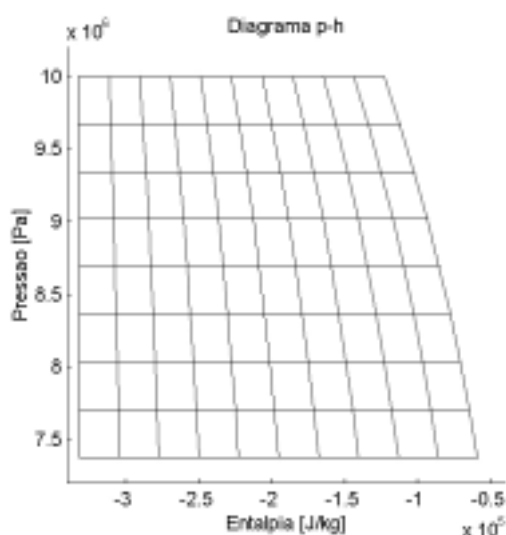


Figura 3.1 – Malha 2D.

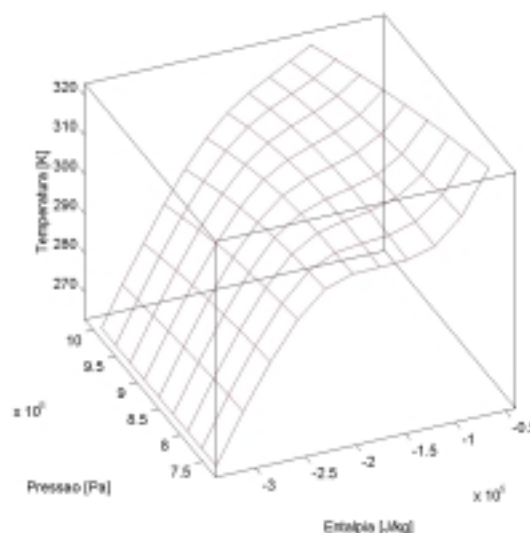


Figura 3.2 – Malha 3D.

O domínio é dividido em m linhas e n colunas. Os limites laterais do mesmo são definidos por isotermas e os limites superior e inferior por isobáricas. O domínio é dividido em linhas paralelas horizontais, cada uma com o mesmo número de divisões (isobáricas). Uma matriz armazena os pontos p-h (M_1) e duas outras temperatura e densidade (M_2 e M_3) respectivamente. Como esta é sempre dividida em linhas horizontais, para economizar

memória, a primeira coluna da matriz M_1 armazena apenas os valores de pressão e as outras, os valores de entalpia. A matriz M_1 tem dimensões $m \times n + 1$ e as demais, $m \times n$.

$$M_1 = \begin{pmatrix} p_m & h_{m2} & \cdots & h_{mn} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ p_2 & h_{21} & \cdots & h_{2m} \\ p_1 & h_{11} & \cdots & h_{1m} \end{pmatrix} \quad M_2 = \begin{pmatrix} T_{m1} & T_{m2} & \cdots & T_{mn} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \end{pmatrix} \quad M_3 = \begin{pmatrix} \rho_{m1} & \rho_{m2} & \cdots & \rho_{mn} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2n} \\ \rho_{11} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1n} \end{pmatrix}$$

A maneira mais apropriada de armazenar e de manipular os dados foi usando uma matriz, por ser uma estrutura de dados de acesso rápido aos seus elementos. Os passos utilizados na geração da grade de pontos serão mostrados a seguir. Semelhante metodologia foi aplicada para construção do diagrama p - h .

3.3 Passos para a geração da grade de pontos

- Definir um domínio.

A definição do domínio no diagrama p - h é feita através dos limites máximo e mínimo de pressão e temperatura, assim como mostra a figura 3.3.

- Dividir o domínio em subdomínios.

Quatro subdomínios foram definidos: líquido sub-resfriado, vapor superaquecido, bifásico e crítico, como mostra a figura 3.4. Estas divisões foram feitas com o intuito de facilitar o armazenamento dos dados após a geração e no momento da interpolação, assim como para respeitar os limites entre regiões de fases diferentes.

- Geração de pontos e cálculo das propriedades termodinâmicas.

A tabela 3.1 mostra os limites de cada subdomínio.

Tabela 3.1 – Limite dos subdomínios utilizados.

Subdomínio	Limite inferior	Limite superior	Limite esquerdo	Limite direito
Líquido comprimido	$p_{\min}$	p_{crit}	Isoterma, $T_{\min}$	Linha de líquido Saturado
Vapor superaquecido	$p_{\min}$	p_{crit}	Linha de vapor saturado	Isoterma, $T_{\max}$
Acima da p_{crit}	p_{crit}	$p_{\max}$	Isoterma, $T_{\min}$	Isoterma, $T_{\max}$
Líq. + Vap.	Pontos abaixo da linha de saturação.			

O roteiro a seguir, exemplifica os cálculos para a região de vapor superaquecido, definida na figura 3.4.

Dados de entrada

p_{step}	passo da pressão
h_{step}	passo da entalpia
p_{Max}	limite superior
p_{Min}	limite inferior
T_{Max}	limite direito

da entalpia é usado apenas uma vez para definir o passo máximo e o número de divisões das isobáricas. Cada isobárica possui um passo diferente para a entalpia, pois os limites laterais não são paralelos.

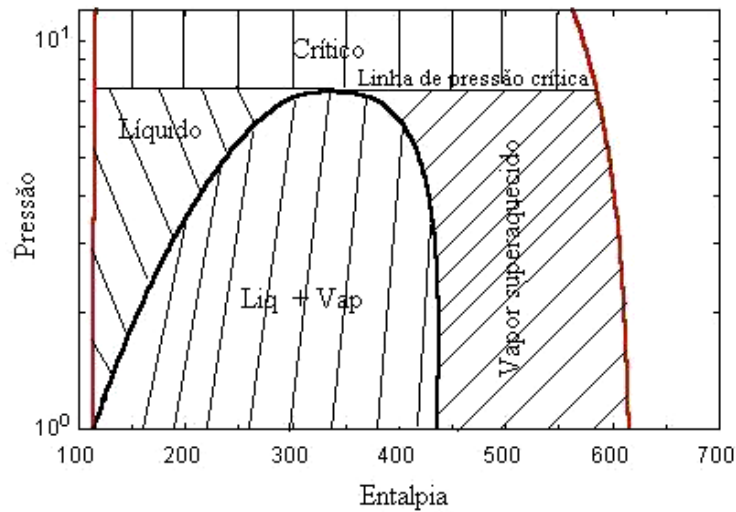


Figura 3.4 – Divisão do domínio em subdomínios.

- Armazenamento dos dados

O armazenamento dos pontos da grade e de suas respectivas propriedades é o último passo desta primeira etapa. Ao longo dos testes realizados, tais dados foram gravados em arquivos com extensão .txt e .bin.

3.4 Método da Busca

Após concluída a construção da grade, o próximo passo é acessar os dados e calcular novos valores de T e ρ para um dado ponto p - h . O acesso aos dados é feito criando-se uma matriz vazia para cada subdomínio (líquido, vapor, bifásico ou crítico) e carregado-a com informações gravadas em arquivo. Em seguida, faz-se uma busca para identificar o subdomínio ao qual pertence o ponto p - h . Tal escolha é muito simples. Se p for maior do que a pressão crítica então o subdomínio crítico é o correto. Se não, um dos três restantes é o correto. Para saber qual destes, compara-se o valor de h com os valores de entalpia de líquido e vapor saturado para a linha de pressão p . Se h for menor que a entalpia de líquido saturado p - h está na região de líquido comprimido. Se h for maior que a entalpia de vapor saturado, p - h está na região de vapor superaquecido. Caso contrário, está na região bifásica.

Identificado o subdomínio, o passo seguinte é fazer uma busca pelos três pontos mais próximos de p - h . Para isso, deve-se encontrar a menor linha de pressão i mais próxima de p e em seguida a coluna j da linha i com a menor entalpia mais próxima de h . Os valores de pressão correspondem à primeira coluna da matriz M_1 , $p_i = M_{i,1}$, e os valores de entalpia ao restante da matriz deslocada de uma coluna, $h_{i,j} = M_{i,j+1}$.

- passo da pressão é fornecido por: $\Delta p = |p_1 - p_2|$

$$i = \frac{p - p_1}{\Delta p} - 1 \quad 3.1$$

onde i corresponde à menor isobárica mais próxima de p .

- passo da entalpia é fornecido por: $\Delta h = |h_{i,1} - h_{i,2}|$. Esta é constante para cada isobárica.

$$j = \frac{h - h_{i,1}}{\Delta h} - 1 \quad 3.2$$

Onde j corresponde à entalpia mais de próxima h . Encontrados i e j , o ponto p-h estará contido no quadrilátero formado pelos nós:

- nó1: i,j
 - nó2: $i,j+1$
 - nó3: $i+1,j$
 - nó4: $i+1,j+1$
- como indica a figura 3.5.

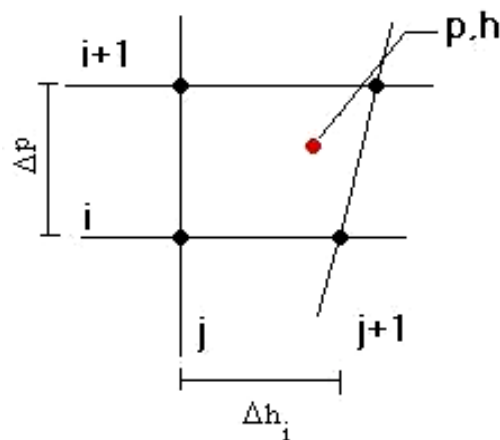


Figura 3.5 – Quadrilátero onde estará contido o ponto p-h.

O quadrilátero é dividido ao meio em dois triângulos como mostra a figura 3.6. Em um destes estará contido o ponto p-h. Entretanto, como a malha não é uniforme, a entalpia $j+1$ da linha $i+1$ não necessariamente coincide com a entalpia j da linha i .

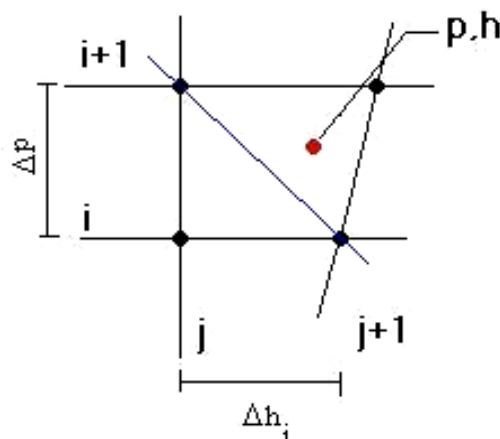


Figura 3.6 – Divisão do quadrilátero.

Logo, o mesmo procedimento deve ser feito para encontrar a posição J da coluna na linha $i+1$. Para:

$$\Delta h = |h_{i+1,1} - h_{i+1,2}|$$

$$J = \frac{h - h_{1,i+1}}{\Delta h} - 1 \quad 3.3$$

Para averiguar a localização do ponto considerado foram utilizados vetores. Se o ponto estiver à direita de todos os vetores (vetores no sentido horário) ou estiver à esquerda de todos (sentido anti-horário), o mesmo estará contido no triângulo, conforme mostra as figuras 3.7 e 3.8. Tal teste era feito calculando-se o produto vetorial entre um vetor formado por dois pontos do triângulo e o vetor formado por um ponto deste vetor e o ponto P.

Condição:

se $\vec{a} \times \vec{b} > 0 \Rightarrow$ ponto está a esquerda

se $\vec{a} \times \vec{b} < 0 \Rightarrow$ ponto está à direita

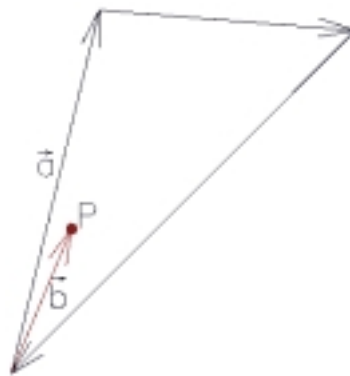


Figura 3.7 – Ponto contido no triângulo: P está à direita de todos os vetores.

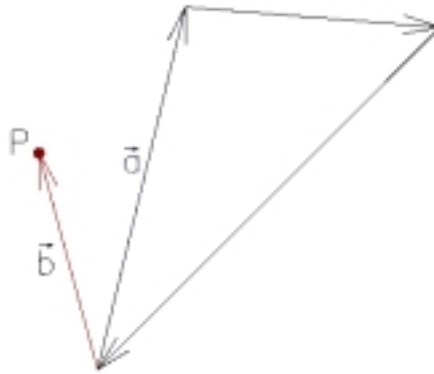


Figura 3.8 – Teste dos vetores para detectar a posição do ponto considerado: ponto fora do triângulo.

3.5 Método de interpolação

A função de interpolação, como já foi comentada anteriormente, deve ser uma função bastante simples, pois o objetivo é otimizar o tempo gasto. A mesma é uma equação do plano onde três pontos são suficientes para defini-lo. Na figura 3.9, os pontos OAB definem um plano.

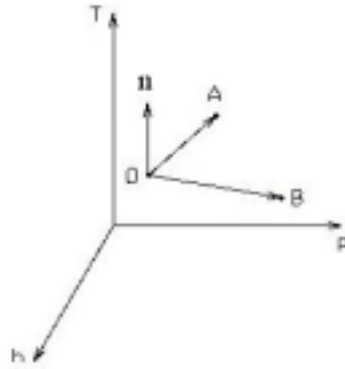


Figura 3.9 – Os pontos AOB definem um plano no espaço.

Da geometria analítica extrai-se a seguinte definição: se n é um vetor perpendicular ao plano OAB, então o produto interno de n por um vetor contido no plano será zero. Os pontos A, O e B têm as seguintes coordenadas:

$$\begin{aligned} A &= (p_A, h_A, T_A) \\ B &= (p_B, h_B, T_B) \\ O &= (p_O, h_O, T_O) \end{aligned} \quad 3.4$$

definindo os vetores $\vec{OA}$, $\vec{OB}$

$$\begin{aligned} \vec{OA} &= (p_A - p_O, h_A - h_O, T_A - T_O) \\ \vec{OB} &= (p_B - p_O, h_B - h_O, T_B - T_O) \end{aligned} \quad 3.5$$

e em seguida o vetor perpendicular ao plano

$$\vec{n} = \vec{OA} \times \vec{OB} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ p_A - p_O & h_A - h_O & T_A - T_O \\ p_B - p_O & h_B - h_O & T_B - T_O \end{vmatrix} \quad 3.6$$

$$\begin{aligned} n_p &= (h_A - h_O)(T_B - T_O) - (h_B - h_O)(T_A - T_O) \\ n_h &= (T_A - T_O)(p_B - p_O) - (T_B - T_O)(p_A - p_O) \\ n_T &= (p_A - p_O)(h_B - h_O) - (p_B - p_O)(h_A - h_O) \end{aligned} \quad 3.7$$

onde n_p , n_h e n_T são as coordenadas do vetor $\vec{n}$ nas direções p , h e T , respectivamente. Se P é um ponto contido no plano OAB e

$$\vec{OP} = (p_p - p_O, h_p - h_O, T_p - T_O)$$

então,

$$\vec{n} \cdot \vec{OP} = 0 \quad 3.8$$

onde $P = (p, h, T)$. As propriedades independentes são dadas por p e h e T é a propriedade a ser encontrada, resultando na equação seguinte:

$$(p_p - p_o)n_p + (h_p - h_o)n_h + (T_p - T_o)n_T = 0 \quad 3.9$$

Finalmente,

$$T_p = \frac{((p_o - p_p)n_p + (h_o - h_p)n_h)}{n_T} + T_o \quad 3.10$$

Dessa forma, apenas equações simples são necessárias para o cálculo de uma propriedade termodinâmica. Como foi indicado anteriormente, cada ponto possui quatro propriedades (p,h,T,p). Para o cálculo da densidade segue-se o mesmo raciocínio, mudando apenas a variável T para ρ .

3.6 Cálculos no ambiente MATLAB

O MATLAB (versão 6.0) foi a primeira ferramenta de programação utilizada para os cálculos de interpolação. Por ter sido o primeiro passo na construção de um algoritmo de aceleração de cálculos de propriedades termodinâmicas, alguns problemas só foram descobertos e resolvidos na passagem para a linguagem C++, como será discutido mais adiante. Equações de estado de múltiplos parâmetros desenvolvidas para o CO₂ nos limites de interesse: $T_{\min} = -40^\circ\text{C}$, $T_{\max} = 250^\circ\text{C}$, $p_{\min} = 1\text{Mpa}$ e $p_{\max} = 30\text{Mpa}$. Aqui, apenas pressão, entalpia, temperatura e densidade eram necessárias. Foram exigidas as seguintes funções: $T = f(p,h)$, $\rho = f(p,h)$ e $T = f(p,\rho)$. Seguindo os passos de construção da grade de pontos já mencionados, as figuras 3.10 e 3.11 ilustram o aspecto da mesma construída.

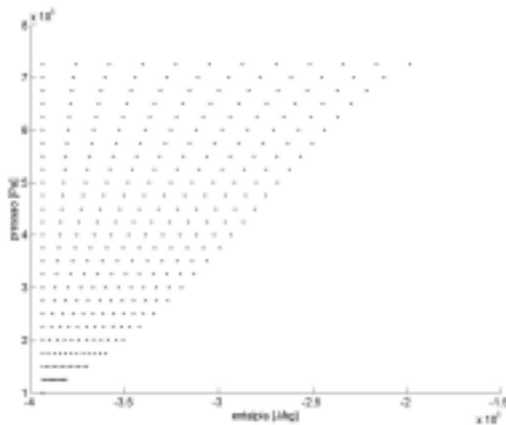


Figura 3.10 – Grade de pontos segundo o item 3.3

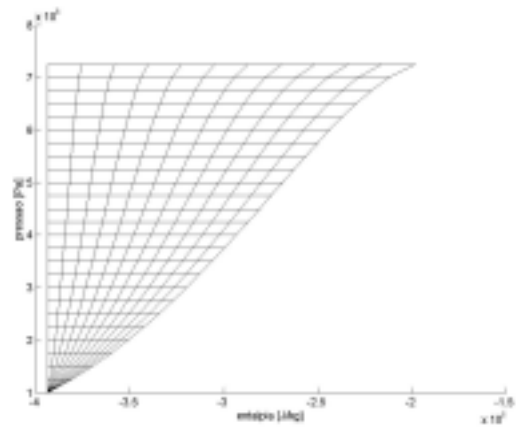


Figura 3.11 – Malha segundo o item 3.3.

A figura 3.10 representa a região de líquido comprimido e possui uma pequena restrição no limite inferior onde todas as colunas convergem para um único ponto. Isto acontece porque a pressão de saturação para $T_{\min}$ é ligeiramente superior à pressão mínima estabelecida, logo a primeira foi escolhida como mínima. A figura 3.12 indica todo o domínio construído. O mesmo inclui as regiões de líquido sub-resfriado, bifásica, vapor superaquecido e gás.

Outra restrição, semelhante àquela da região de líquido subresfriado, foi aplicada à região bifásica na linha de pressão crítica onde, a fim de respeitar o número de colunas da matriz que armazena os dados desta região, a mesma converge para um ponto: o ponto crítico. A figura 3.13 detalha graficamente o resultado do critério adotado.

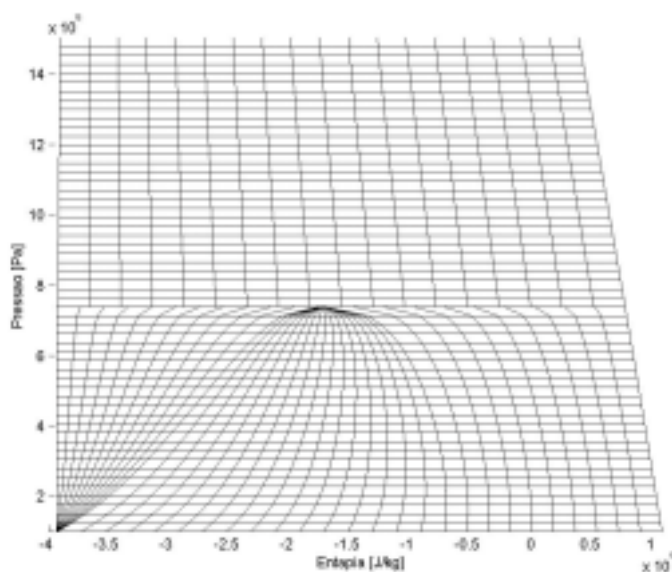


Figura 3.12 – Apresentação de todo o domínio construído.

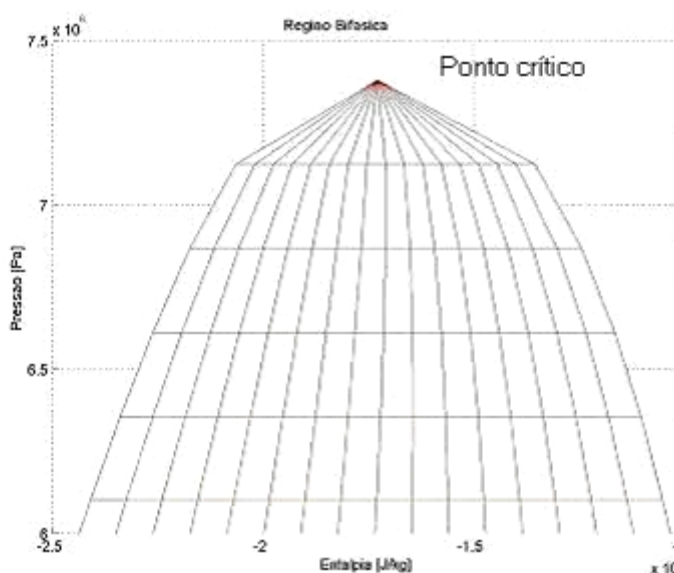


Figura 3.13 – Resultado do critério de cálculos utilizando a convergência: todas colunas convergem para um único ponto: o ponto crítico.

3.7 Usando C++

O real interesse em criar uma ferramenta computacional que acelerasse o cálculo de propriedades termodinâmicas foi o de conectá-la a uma plataforma de simulação já escrita em C++. Nesta mudança de linguagem, o código foi escrito de forma mais elaborada e didática, facilitando a leitura para futuros usuários. A restrição imposta à região de líquido comprimido (Fig. 3.11) no MATLAB, onde havia uma convergência de pontos para a linha de pressão mínima, foi retirada tornando-a mais abrangente. Porém, a restrição ao ponto crítico na região bifásica permaneceu. Permaneceu ainda o uso de um arquivo para cada região. O método de busca e interpolação continuou o mesmo. No restante, nenhuma outra mudança significativa foi feita.

4. MÉTODO DA MALHA

4.1 Introdução

Este capítulo aborda outro método para definir o domínio pressão-entalpia. O método da malha se assemelha ao método da grade de pontos apenas em um aspecto: todos os pontos foram calculados ao longo de isobáricas. Entretanto, neste método, cada isobárica recebeu dois tratamentos na determinação da quantidade de pontos:

- Primeiro foi usado um passo fixo Δh para cada região e este definia o número de pontos de acordo com a extensão da isobárica. Por exemplo, para o CO_2 , na região de líquido comprimido, a uma pressão de 5MPa e uma variação de temperatura de -40°C até a temperatura de saturação, a diferença de entalpia seria em torno de 100kJ/kg. Considerando um Δh arbitrário de 10kJ/kg o número de pontos é determinado pela equação 4.1:

$$n = \left(\frac{h_{\text{dir}} - h_{\text{esq}}}{\Delta h} \right) + 1 \quad 4.1$$

onde:

h_{dir} = entalpia do extremo direito

h_{esq} = entalpia do extremo esquerdo

O resultado indicaria 11 pontos. Quando o resultado é fracionário utiliza-se o maior inteiro mais próximo.

- O segundo tratamento dado foi utilizando a definição do calor específico, aqui chamado de método do c_p , o qual será discutido no item 4.4.

A liberdade de poder definir a densidade de pontos em cada isobárica foi a principal motivação em aperfeiçoar o trabalho, o que levou ao uso de um gerador de malhas. Entretanto, isso só foi possível após abandonar o uso das matrizes e adotar uma estrutura de dados mais sofisticada e complexa: a lista encadeada (apêndice B).

O cálculo de interpolação continuou sendo o mesmo usado no método da grade de pontos: três pontos definindo um triângulo no espaço. Os pontos que compõem o domínio são usados em uma técnica de geração de malha conhecida como triangulação Delaunay (apêndice B). Com essa técnica, o domínio é dividido em triângulos cujos vértices, ou nós, são pontos previamente calculados. O algoritmo de busca foi completamente remodelado para atender à nova forma de manipulação dos dados. Testes com a triangulação Delaunay foram realizados no ambiente MATLAB e C++. O MATLAB foi utilizado inicialmente porque já possui funções preparadas de geração e visualização de malha, tornando o trabalho mais rápido. A linguagem C++, que é a linguagem de interesse desse trabalho, foi utilizada em seguida, pois era necessário criar uma interface gráfica e implementar todo o código de geração de malha e busca.

4.2 Triangulação Delaunay

A forma encontrada de fazer uso dos benefícios da lista encadeada e de facilitar os cálculos de interpolação foi o uso de um método de triangulação conhecido como triangulação Delaunay. Após os nós serem calculados e armazenados na lista, estes são manipulados pelo

algoritmo de triangulação e uma matriz de elementos $n \times 3$ é criada, onde n representa o número total de elementos criados e 3 o número de colunas com os índices dos vértices de cada triângulo. Este método foi escolhido porque o tipo de interpolação usada trabalha com três pontos não colineares. Assim, a triangulação Delaunay definia os triângulos baseados nos pontos calculados e facilitava a busca e interpolação dos dados de entrada. Uma abordagem mais detalhada sobre este método de triangulação é discutida no apêndice B.

4.3 MATLAB/C++

A construção dos pontos que formam a malha segue em parte o mesmo raciocínio usado pelo método da grade de pontos. O domínio é dividido em linhas horizontais igualmente espaçadas (isobáricas), cada uma possuindo uma certa quantidade de pontos.

No MATLAB foi criada e visualizada a malha. A figura 4.1 representa a malha gerada no MATLAB para o CO₂ usando um Δh fixo para cada região. A figura 4.2 mostra a malha usando o método do c_p .

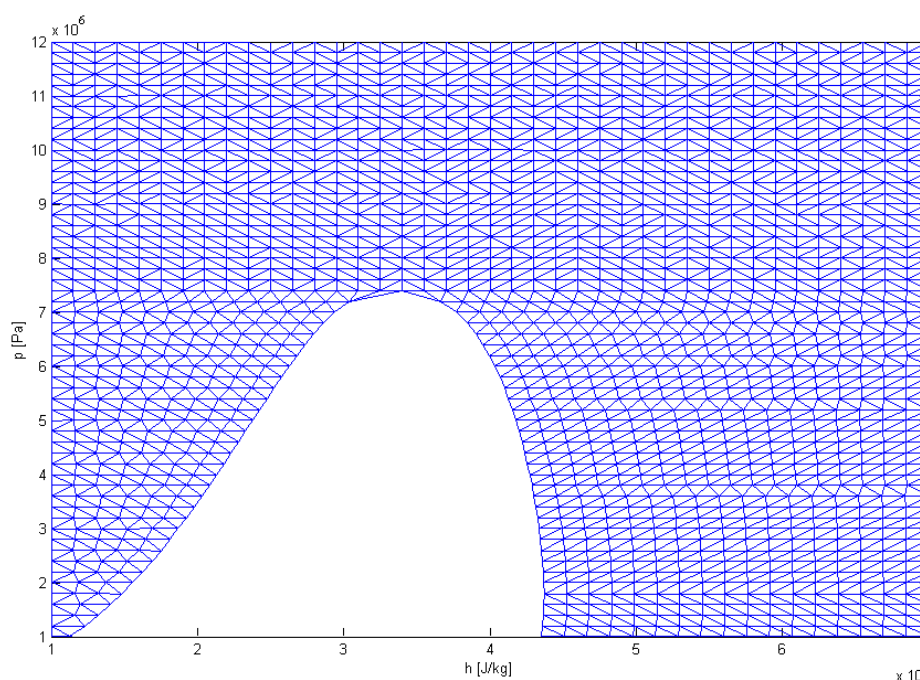


Figura 4.1 – Malha gerada para o diagrama pressão-entalpia do refrigerante CO₂ usando um Δh fixo.

As equações de estado de múltiplos parâmetros do C++ geraram os nós da malha. O único teste realizado com o MATLAB foi para avaliar a precisão dos dados interpolados.

Para averiguar se a malha podia fornecer dados interpolados satisfazendo às exigências de precisão, um ponto arbitrário no interior de cada elemento triangular foi introduzido para simular um dado de entrada. Este ponto foi o baricentro do mesmo. Em seguida, os dados interpolados foram comparados com os valores obtidos através das equações de estado de múltiplos parâmetros e calculado o erro percentual.

Em relação à velocidade dos cálculos interpolados, não foi possível proceder a esta averiguação no ambiente MATLAB, pois seria necessário comparar com o tempo consumido pelas equações de estados que estão implementadas em C++. Além disso, o MATLAB usa uma linguagem interpretada, enquanto que o C++ usa uma linguagem compilada. Esta última é mais rápida que a primeira, pois todo o código implementado é traduzido uma única vez para a linguagem de máquina antes de ser executado. No MATLAB, cada linha de código é traduzida toda vez que executada. Logo, não se deve comparar tempo consumido por cálculos realizados em uma linguagem interpretada com uma compilada.

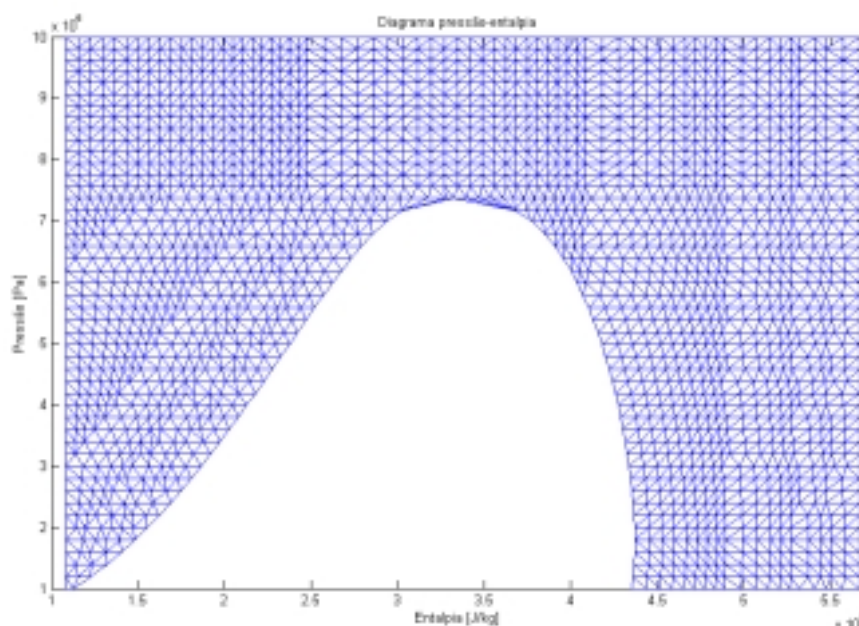


Figura 4.2 – Malha gerada para o diagrama pressão-entalpia do refrigerante CO₂ usando o método do c_p .

Uma observação importante a ser feita aqui é que tanto no método da grade de pontos quanto neste método a visualização da malha não tem nenhuma finalidade visual para o usuário final, ou seja, a este só interessa os resultados provenientes da interpolação e a visualização das isolinhas e da curva de saturação. A malha serve apenas ao usuário avançado que está criando o banco de dados para avaliar a precisão dos dados interpolados.

O cálculo de propriedades termodinâmicas na região bifásica como a densidade, temperatura e entropia podem ser calculadas de uma forma bem mais rápida e sem o auxílio de uma malha. A técnica usada foi dividir a região em isobáricas até o ponto crítico. Para cada linha foram calculadas e salvas em arquivo as seguintes propriedades: pressão e temperatura de saturação e os valores de líquido e vapor saturado para a densidade, entalpia e entropia. A tabela 4.1 mostra essa organização. Para calcular dados nessa região uma matriz foi usada, pois o acesso aos seus dados é direto. Os valores da pressão são ordenados variando de uma pressão mínima p_1 até a pressão crítica da substância. A temperatura de saturação é função apenas da pressão e as demais propriedades são funções da temperatura. Como os dados de entrada são pressão e entalpia, recorre-se à tabela para identificar o índice i que representa a menor pressão mais próxima do argumento p . Em seguida, usa-se uma interpolação linear para calcular as propriedades de saturação para aquela pressão, usando as equações 4.2 a 4.8.

Com estas equações são calculadas as propriedades de líquido e vapor saturado da temperatura, densidade, entalpia e entropia para as linhas de pressão i e $i+1$. As isobáricas p_i e p_{i+1} compreendem a pressão de entrada p . Em seguida, densidade, entropia e título podem ser calculados por meio das equações 4.9, 4.10 e 4.11.

O procedimento para iniciar os cálculos usando todo o domínio seguiu o mesmo algoritmo tanto no MATLAB quanto em C++. A figura 4.3 apresenta o algoritmo utilizado para calcular uma propriedade termodinâmica ao longo da malha.

Tabela 4.1 – Propriedades calculadas ao longo da linha de saturação.

Propriedades termodinâmicas de saturação								
i	P_{sat}	T_{sat}	h_l	h_v	ρ_l	ρ_v	s_l	s_v
1	p_1	T_1	h_{l1}	h_{v1}	ρ_{l1}	ρ_{v1}	s_{l1}	s_{v1}
2	p_2	T_2	h_{l2}	h_{v2}	ρ_{l2}	ρ_{v2}	s_{l2}	s_{v2}
...	...	...	...	...	...	...	...	...
n	p_{crit}	T_{crit}	$h_l = f(T_{\text{crit}})$	$h_v = f(T_{\text{crit}})$	ρ_{crit}	ρ_{crit}	$s_l = f(T_{\text{crit}})$	$s_v = f(T_{\text{crit}})$



Figura 4.3 – Esquematização do algoritmo usado para calcular uma propriedade termodinâmica ao longo da malha.

A temperatura de saturação é rapidamente calculada através da equação 4.2.

$$\frac{p_{i+1} - p_i}{T_{i+1} - T_i} = \frac{p - p_i}{T_{sat} - T_i} \Rightarrow T_{sat} = \frac{(T_{i+1} - T_i)(p - p_i)}{p_{i+1} - p_i} + T_i \quad 4.2$$

Usa-se o mesmo raciocínio para calcular as propriedades de líquido e vapor saturado para:

Densidade

líquido saturado:

$$\frac{p_{i+1} - p_i}{\rho_{Li+1} - \rho_{Li}} = \frac{p - p_i}{\rho_L - \rho_{Li}} \Rightarrow \rho_L = \frac{(\rho_{Li+1} - \rho_{Li})(p - p_i)}{p_{i+1} - p_i} + \rho_{Li} \quad 4.3$$

vapor saturado:

$$\frac{p_{i+1} - p_i}{\rho_{Vi+1} - \rho_{Vi}} = \frac{p - p_i}{\rho_V - \rho_{Vi}} \Rightarrow \rho_V = \frac{(\rho_{Vi+1} - \rho_{Vi})(p - p_i)}{p_{i+1} - p_i} + \rho_{Vi} \quad 4.4$$

Entalpia

líquido saturado:

$$\frac{p_{i+1} - p_i}{h_{L_{i+1}} - h_{L_i}} = \frac{p - p_i}{h_L - h_{L_i}} \Rightarrow h_L = \frac{(h_{L_{i+1}} - h_{L_i})(p - p_i)}{p_{i+1} - p_i} + h_{L_i} \quad 4.5$$

vapor saturado:

$$\frac{p_{i+1} - p_i}{h_{V_{i+1}} - h_{V_i}} = \frac{p - p_i}{h_V - h_{V_i}} \Rightarrow h_V = \frac{(h_{V_{i+1}} - h_{V_i})(p - p_i)}{p_{i+1} - p_i} + h_{V_i} \quad 4.6$$

Entropia

líquido saturado:

$$\frac{p_{i+1} - p_i}{s_{L_{i+1}} - s_{L_i}} = \frac{p - p_i}{s_L - s_{L_i}} \Rightarrow s_L = \frac{(s_{L_{i+1}} - s_{L_i})(p - p_i)}{p_{i+1} - p_i} + s_{L_i} \quad 4.7$$

vapor saturado:

$$\frac{p_{i+1} - p_i}{s_{V_{i+1}} - s_{V_i}} = \frac{p - p_i}{s_V - s_{V_i}} \Rightarrow s_V = \frac{(s_{V_{i+1}} - s_{V_i})(p - p_i)}{p_{i+1} - p_i} + s_{V_i} \quad 4.8$$

O segundo passo consiste em calcular o título em função do dado de entrada, h .

Título

$$x = \frac{h - h_L}{h_V - h_L} \quad 4.9$$

Densidade interpolada:

$$\rho = \frac{1}{\frac{1}{\rho_L} + x \left(\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_L \rho_V} \right)} \quad 4.10$$

Entropia interpolada:

$$s = s_L + x(s_V - s_L) \quad 4.11$$

4.4 Pontos gerados em função do calor específico – Método do c_p

Inicialmente, os espaçamentos dos valores de entalpia para as isobáricas eram constantes e fornecidos como dados de entrada, ou seja, um Δh era fornecido para cada região. Dois motivos levaram ao desenvolvimento de uma nova forma de distribuição de pontos:

- Tentar reduzir o máximo possível o número de pontos e, conseqüentemente, gerar um arquivo menor;
- Adotar um critério não arbitrário na determinação do espaçamento entre dois pontos consecutivos;

Como o problema envolve encontrar intervalos de entalpias ao longo de isobáricas, então a definição do calor específico se mostrou bastante apropriada, pois, como mostra a equação 4.11, o c_p é uma relação entre entalpia e temperatura à pressão constante.

O procedimento explicando como esta relação foi aplicada para determinar cada Δh será detalhado a seguir.

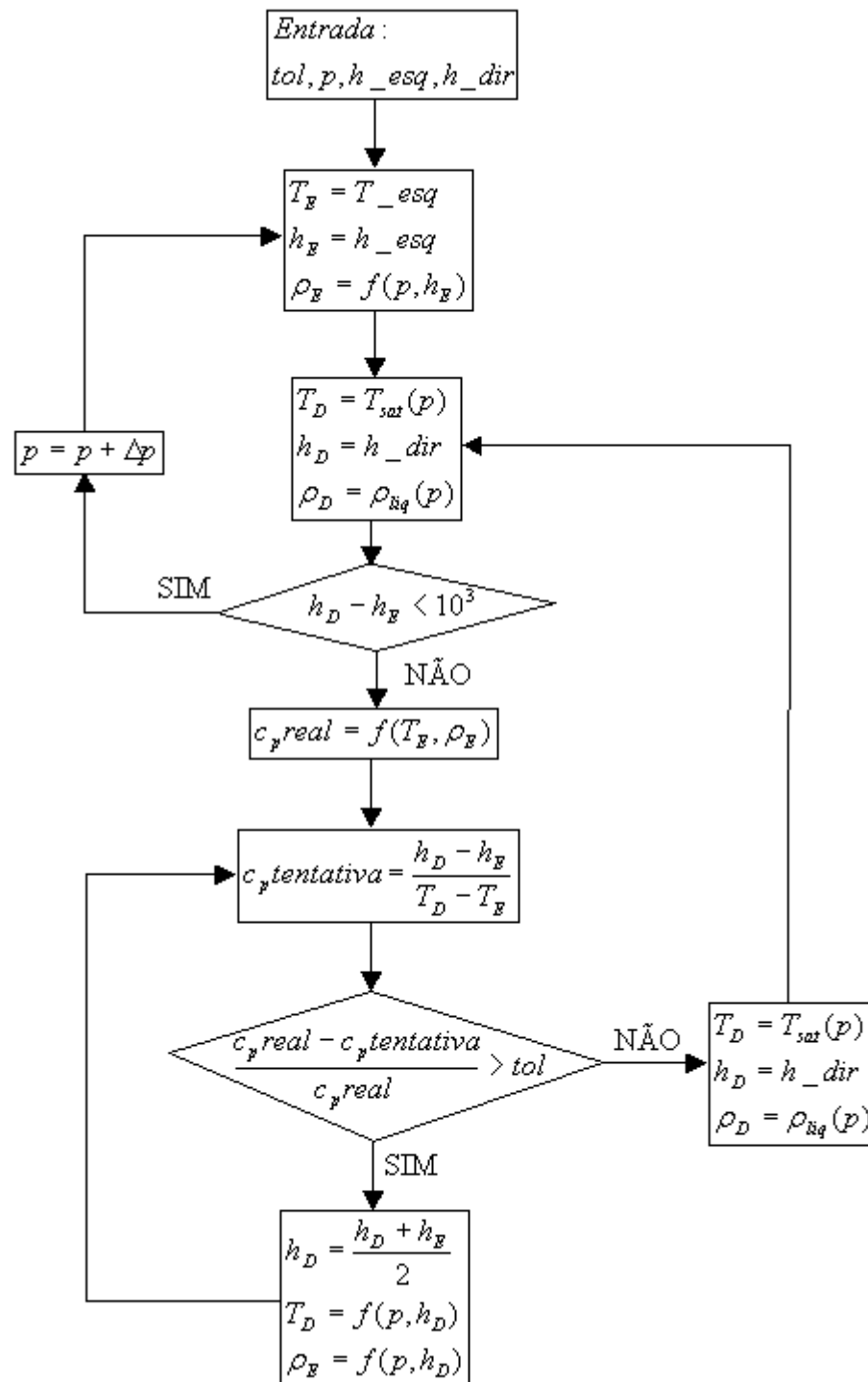


Figura 4.4 – Fluxograma para a geração de pontos da malha através do método do c_p .

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad 4.12$$

Para uma linha de pressão p qualquer:

- Calcular os valores extremos de entalpia (h_{esq} e h_{dir}) assim como as temperaturas correspondentes (T_{esq} e T_{dir}) para a isobárica em questão.
- Calcular o c_p sempre em função dos parâmetros do lado esquerdo
- Calcular $c_p' = (h_{dir} - h_{esq}) / (T_{dir} - T_{esq})$

- calcular o erro: $e = 100 \left(\frac{cp - cp'}{cp} \right)$
- se e for maior que a tolerância: $h_{dir} = \frac{h_{dir} + h_{esq}}{2}$
- se e for menor ou igual a tolerância: $h_{esq} = h_{dir}$, h_{dir} = entalpia do extremo direito

A figura 4.4, mostra um fluxograma com os passos mais relevantes para a compreensão do método usado para o cálculo de cada Δh .

Na região de líquido comprimido, as linhas de temperatura são quase verticais. Em certos momentos, ocorriam problemas de convergência. Uma pequena variação de entalpia implica uma grande variação de temperatura. Dessa forma, o erro e não ficava menor que a tolerância. Para resolver esse problema, junto ao teste do erro, adicionou-se um critério que estipulava um número máximo de iterações. O erro e e o número de iterações passaram a ser os critérios pra encerrar o Δh atual e passar para o cálculo do Δh seguinte.

Para indicar o fim dos cálculos em uma isobárica e passar para uma seguinte foi usado como critério a diferença entre a entalpia do extremo direito e a entalpia da esquerda (h_{esq}). Esta última tem a tendência de se aproximar da entalpia do extremo direito. Se esta diferença ficar abaixo de um valor estipulado, iniciam-se os cálculos em uma nova isobárica.

5. MÉTODO DA GRADE DE PONTOS MODIFICADA

Este método representa a terceira tentativa em criar um programa que pudesse realizar cálculos rápidos de interpolação de propriedades termodinâmicas com o uso de um reduzido banco de dados. A velocidade de acesso aos dados usados no método da grade de pontos foi associada com o uso de arquivos pequenos usados no método da malha. A interpolação linear continuou a mesma usada nos dois métodos anteriores. Temperatura, densidade e entropia são as propriedades calculadas de saída, além do título, quando p - h situar-se na região bifásica. A geração dos pontos que formam o banco de dados é a mesma utilizada no método da malha e baseada no método do c_p , explicado no capítulo 4.

Resultados obtidos com o método da malha levaram ao desenvolvimento deste método. Por um lado, o método da malha mostrou-se satisfatório. Por outro lado não representou nenhuma modificação significativa em relação às equações de estado de múltiplos parâmetros. O capítulo 7 trata dos resultados dos métodos apresentados neste trabalho.

A única e grande modificação no método da grade de pontos modificada está relacionada à forma como os dados são manipulados durante os cálculos de interpolação. Todo o código de gerenciamento de malha foi substituído. A idéia adotada foi dividir todo o domínio em três grandes regiões: líquido comprimido, vapor superaquecido e supercrítico. Cada uma dessas regiões possui um vetor que representa as isobáricas. Cada posição deste vetor possui o valor da pressão correspondente e “aponta” para quatro outros vetores que representam as propriedades h , T , ρ e s . A figura 5.1 ilustra essa organização de dados. Em relação à região bifásica, foi adotado o mesmo critério de cálculo apresentado no capítulo 4.

Dessa forma, houve um ganho de tempo muito significativo em relação à busca dos dados que são usados na interpolação. O algoritmo de busca segue o mesmo princípio mostrado na figura 4.4. Quando o ponto ph cai fora da região bifásica, por exemplo, na região de líquido comprimido, primeiro são encontradas de forma direta as isobáricas i e $i+1$ que contêm p . Isso é possível porque as linhas de pressão são igualmente espaçadas. A seguir, por não possuir espaçamentos constantes, uma busca binária é utilizada para encontrar as entalpias j e $j+1$ que contêm h .

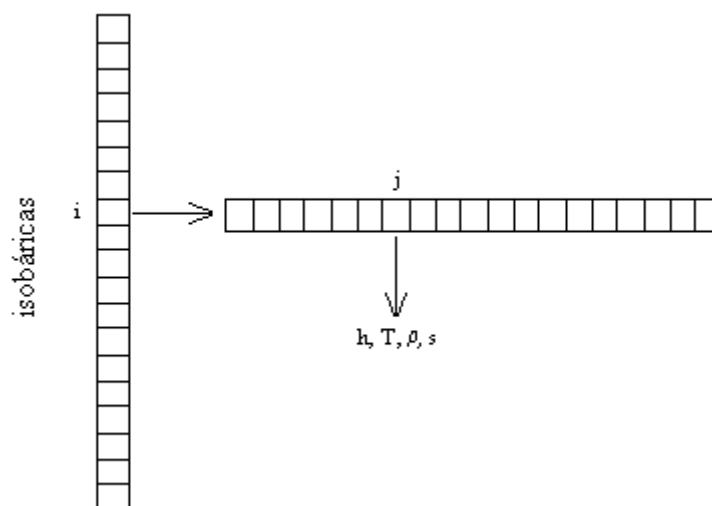


Figura 5.1 – Esquema de organização dos dados de uma região qualquer.

6. VISUALIZAÇÃO

A visualização de propriedades termodinâmicas é um dos objetivos desse trabalho e visa a construção de um diagrama termodinâmico p-h com isolinhas de temperatura, densidade, entropia e título. Além disso, a visualização permite analisar graficamente os erros dos dados interpolados.

6.1 Visualização da interface gráfica

Outro ponto abordado neste trabalho trata da visualização de propriedades termodinâmicas. Uma interface gráfica foi desenvolvida em ambiente Windows para visualizar o diagrama pressão entalpia e isolinhas de temperatura, densidade, entropia e título, como mostra a figura 6.1.

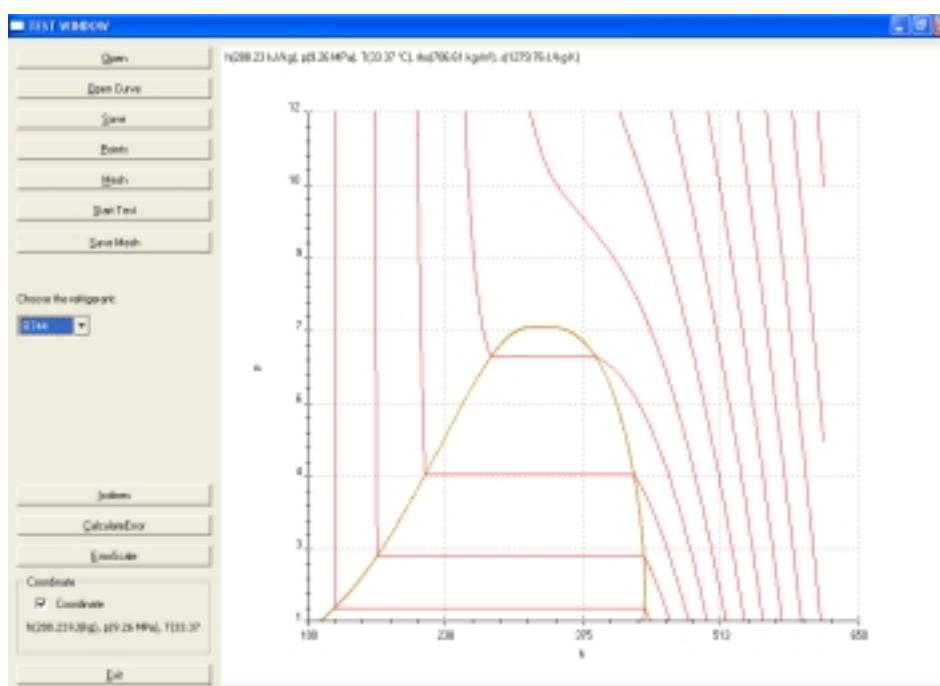


Figura 6.1 – Interface gráfica voltada para o usuário avançado.

Na primeira parte deste trabalho, a visualização está incorporada a uma plataforma que fornece as propriedades termodinâmicas de várias substâncias por meio de uma equação de estado de múltiplos parâmetros. A geração da tabela de dados, os procedimentos de interpolação e a exibição do diagrama estão presentes em um único programa. Este programa visa o usuário avançado e tem como objetivo construir a base de dados com a precisão e as dimensões de domínio exigidas pelo usuário final. Com esta parte do programa é possível determinar visualmente a precisão obtida pela interpolação. Por exemplo, caso seja exigida uma precisão de 0,1% na interpolação para temperatura e densidade no domínio pressão-entalpia para uma faixa de pressão variando de 1MPa até 12MPa e uma faixa de temperatura variando de -40°C até 150°C , para o CO_2 , são geradas várias tabelas e para cada uma é analisado o erro em relação à densidade, como mostram as figuras 6.2 e 6.3.

Assim que os pontos da tabela são calculados, uma malha triangular 2D sobre o domínio p-h é criada e o baricentro de cada triângulo de coordenadas $h \times p$ serve como argumento de entrada para o cálculo das propriedades. Em seguida, os valores das temperaturas e densidades interpoladas são comparados aos fornecidos pelas equações de estados e os erros são exibidos por meio de uma escala de cores. Essa escala pode ser ajustada de modo que o diagrama mostre as regiões onde a precisão requerida foi atingida. As regiões com erro superior ao exigido ficam em preto. À medida que os dados são refinados, as áreas

em preto vão diminuindo como mostram as figuras 6.2 e 6.3. A região abaixo da linha de saturação sempre fica em negro porque não há pontos suficientes para descrevê-la. Nesse caso a densidade e a entropia são calculadas por meio do título e das propriedades da linha de saturação. A temperatura é obtida interpolando os dados da mesma. Mais figuras demonstrativas dos erros podem ser vistas no apêndice D.

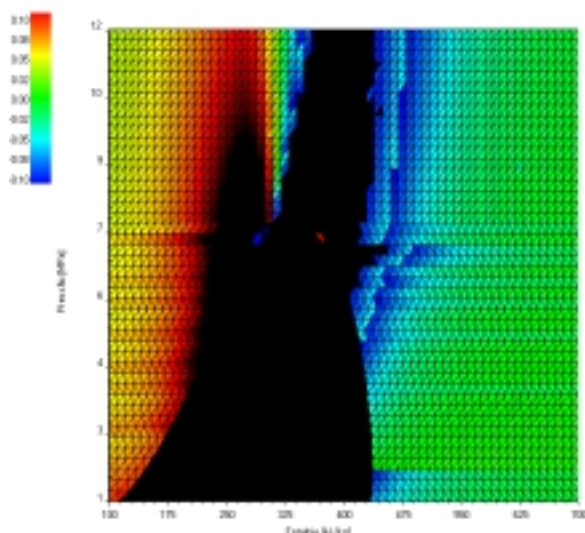


Figura 6.2 – Erro relativo para densidade

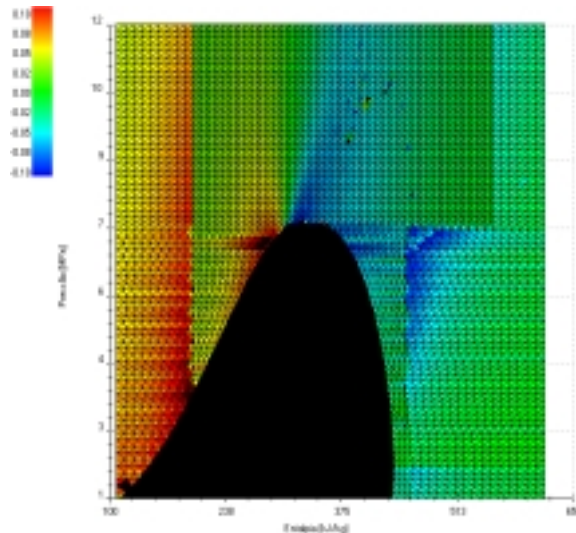


Figura 6.3 – Área com refinamento

Há duas formas de gerar a base de dados: fornecer um passo fixo de pressão e entalpia para cada região (líquido comprimido, vapor superaquecido e crítico) ou através do método do c_p visto no capítulo 4. Essa escolha atualmente é feita fazendo uma pequena alteração no código do programa.

A segunda parte consiste de uma interface construída visando o usuário final, aquele que deseja apenas as propriedades calculadas em tempo hábil e a visualização das isolinhas.

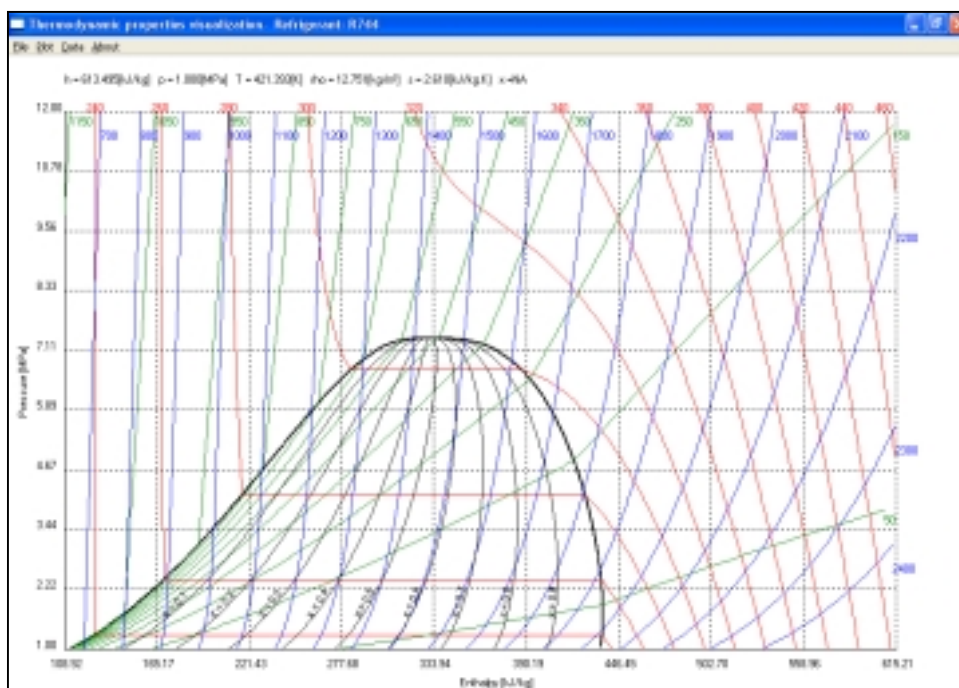


Figura 6.4 – Interface gráfica voltada para o usuário final, exibindo linhas de temperatura, densidade, entropia e título constante para o CO2.

Os valores das propriedades termodinâmicas são calculados e exibidos acompanhando o movimento do cursor sobre o diagrama p-h. A posição do cursor sobre o diagrama tem coordenadas h,p e estas são utilizadas como propriedades independentes para o cálculo das demais. Temperatura, densidade, entropia e título são as propriedades calculadas, assim com suas isolinhas. As propriedades calculadas são exibidas na parte superior esquerda. A figura 6.6 mostra a interface voltada ao usuário final.

	Entalpy [kJ/kg]	Pressure [MPa]	Temperature [K]	Density [kg/m³]	Entropy [kJ/kg K]	Quality
1	230	3	267.608	303.580	1114.518	0.1752
2	490	3	278.645	73.625	1338.467	NA
3	690	8	296.702	125.743	2083.478	NA
4	290	8	294.176	876.486	1158.051	NA
5	230	3	267.608	303.580	1114.518	0.1752
6						
7						
8						
9						
10						
11						
12						
13						
14						
15						
16						
17						
18						
19						
20						

Figura 6.5 – Tabela para cálculo de propriedades termodinâmicas.

Internamente, o programa trabalha com números inteiros para representar *pixels* ou a própria posição do cursor. Este fato faz com que não se obtenha na tela todos os valores *ph* desejados por motivo de erro de arredondamento, já que estes são números reais. Por outro lado, o diagrama mostra-se muito útil do ponto de vista prático. O programa dispõe de uma tabela (Figura 6.5) onde é possível entrar com valores de pressão e entalpia impossíveis de serem visualizados sobre o diagrama. Caso o usuário entre com pontos específicos de um ciclo de refrigeração, ainda se pode visualizar o mesmo sobre o diagrama.

6.2 A carta psicrométrica

Em paralelo ao presente trabalho foi desenvolvido um outro programa para cálculo e visualização de propriedades de uma mistura ar e água. Este programa constrói uma carta psicrométrica e age de forma similar ao anterior. Dados podem ser obtidos com o movimento do mouse sobre o diagrama. A grande diferença está na forma como os cálculos são realizados. O cálculo do volume específico, da temperatura de bulbo seco e bulbo úmido, da umidade relativa e da entalpia utiliza equações simples e estas são usadas de forma direta sem tornar o programa lento. Em condições ambientes, o ar seco e o vapor de água estão a uma baixa pressão e isso permite que se use a equação dos gases perfeitos sem comprometer os resultados.

Além disso, não houve necessidade de criar uma tabela para posterior interpolação dos dados. Outras equações foram obtidas (ASHRAE 1997) por meio de ajuste de dados experimentais tais como a temperatura de ponto de orvalho e a pressão de saturação.

O programa permite construir cartas psicrométricas em função da pressão atmosféricas ou da altitude. Todos os procedimentos necessários à construção da mesma foram baseados na obra de J. R. Simões Moreira, 1999. O apêndice E mostra os resultados assim como as equações usadas.

7. RESULTADOS E ANÁLISES

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos com os métodos da grade de pontos, da malha e da grade de pontos modificada. São indicadas as vantagens e as desvantagens de cada método, assim como gráficos do cálculo dos erros percentuais para a densidade e a temperatura. São também apresentadas tabelas comparativas do tempo de cálculo entre os métodos.

7.1 Método da grade de pontos no MATLAB

7.1.1 Testes Realizados

A avaliação da velocidade dos cálculos interpolados apresentou resultados bastante satisfatórios. Exigia-se que os cálculos de interpolação consumissem um tempo menor que 1/10 do tempo consumido pela equação de estado (EOS). A tabela 7.1 mostra o que foi obtido em um computador equipado com um processador Athlon 1.1GHz, 198MB RAM, Windows 98. Nesta tabela foram realizados cálculos ao longo de três isobáricas em uma faixa de temperatura variando de -30°C a 200°C . Na segunda coluna está a relação entre o tempo consumido pelos cálculos de interpolação pelas equações de estado.

Tabela 7.1 – Relação de tempo entre interpolação e equações de estado.

$(-30^{\circ}\text{C} < T < 200^{\circ}\text{C})$	interpolação/EOS
$p = 2,5\text{MPa}$	0,016
$p = 5\text{MPa}$	0,016
$p = 10\text{MPa}$	0,062

Como atesta a tabela 7.1, a relação ficou em torno de 10 vezes menor que o máximo desejado. A relação de tempo para a linha de pressão de 10MPa ficou um pouco maior em relação às outras duas porque a função de interpolação trabalha com uma quantidade muito grande de dados nesta região. Estes são copiados de uma função para outra, resultando em um consumo extra de tempo.

No quesito precisão, foi exigido um erro percentual de $\pm 0,5\%$ para pressões abaixo de 2,5MPa e acima de 20MPa e de $\pm 0,1\%$ para uma faixa de pressão entre 2,5MPa e 20MPa. As figuras 7.1 e 7.2 mostram o erro percentual para a densidade e temperatura, respectivamente. Foram calculados pontos ao longo de 10 linhas de pressão com 20 pontos cada, com uma variação de temperatura de -30°C até 250°C . Para cada linha de pressão foi calculado $h_{\min} = f(T = -30^{\circ}\text{C}, p)$ e $h_{\max} = f(T = 250^{\circ}\text{C}, p)$. Este intervalo foi dividido de forma a conter 20 pontos.

Nas figuras 7.1 e 7.2 o erro para a densidade ficou entre $\pm 0,4\%$ enquanto que o erro para temperatura ficou entre $\pm 0,1\%$. Os resultados para a densidade não foram tão precisos quanto os da temperatura porque, para uma linha de pressão p qualquer, a derivada da densidade em relação à entalpia é mais acentuada do que a derivada da temperatura em relação à entalpia. A densidade é mais sensível à variação de entalpia do que a temperatura. Como uma mesma linha de pressão cruza as regiões de líquido e vapor, a densidade apresenta valores altos na fase de líquido comprimido e valores menores na fase de vapor superaquecido, enquanto que com a temperatura essa variação é bem menor, como mostra os gráficos das figuras 7.3 e 7.4.

Para a mesma faixa de entalpia (de 100 à 500kJ/kg) a temperatura varia de -40 até 100°C e a densidade de 200 até 1100kg/m³. A variação de densidade é em torno de 7 vezes maior que a de temperatura.

Logo, embora uma certa distribuição de pontos forneça uma boa aproximação para a temperatura interpolada, não implica em resultados satisfatórios para a densidade como mostra a explicação dada para as figuras 7.3 e 7.4. Uma forma de superar esse problema é o refino localizado. Ou seja, áreas que apresentam erros além do permitido receberiam uma concentração maior de pontos a fim de melhor representar os dados interpolados. Tal tarefa se torna muito trabalhosa usando a forma atual de armazenamento de dados.

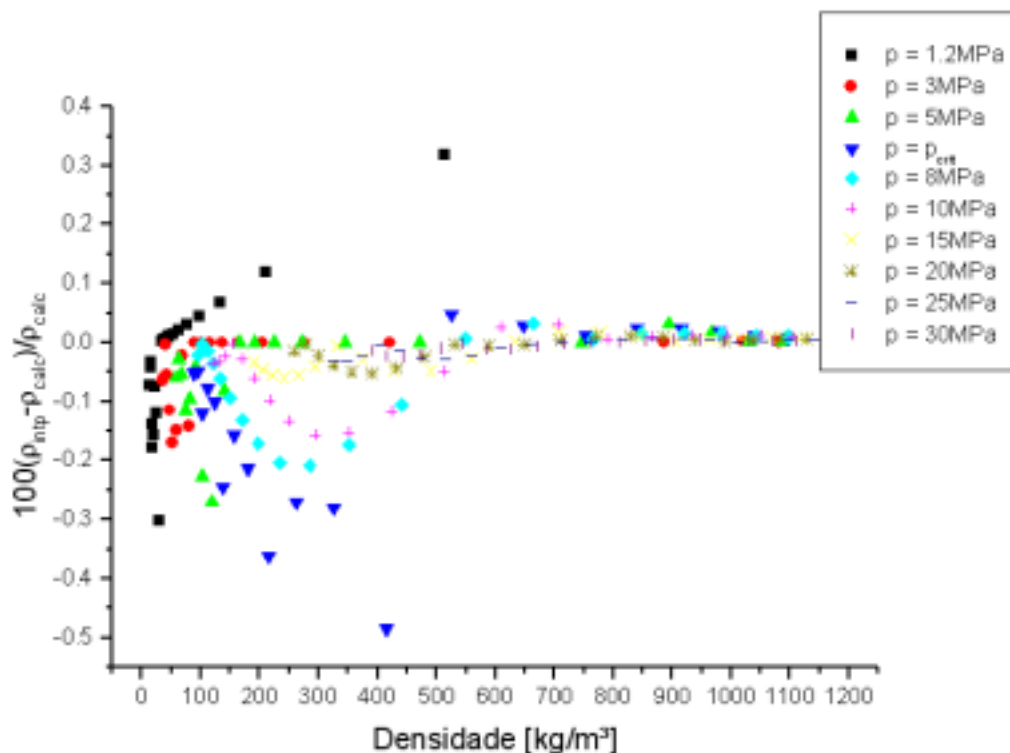


Figura 7.1 – Gráfico do erro percentual para a densidade no método da grade de pontos.

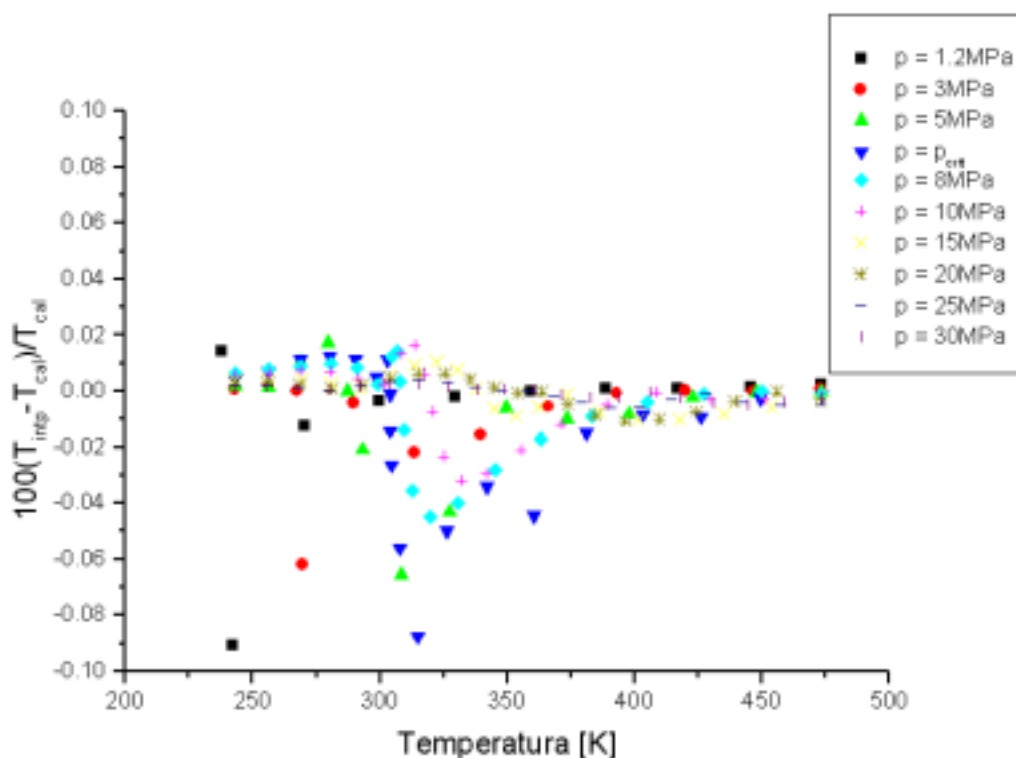


Figura 7.2 – Gráfico do erro percentual para a temperatura no método da grade de pontos.

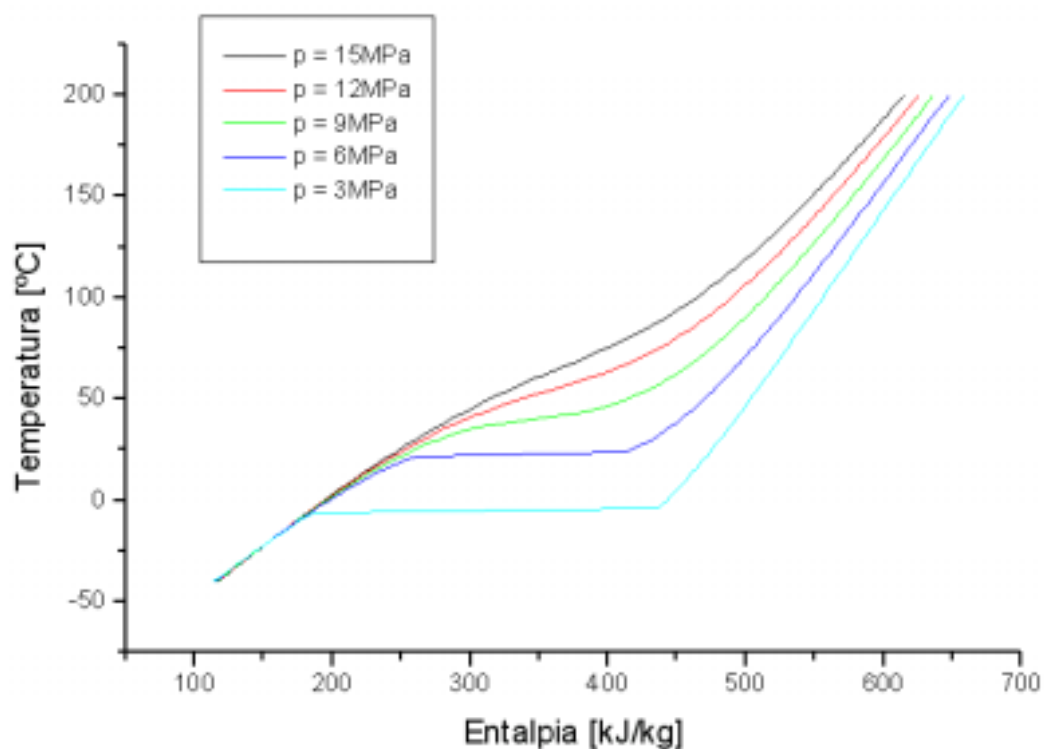


Figura 7.3 – Variação da temperatura com a entalpia ao longo de isobáricas.

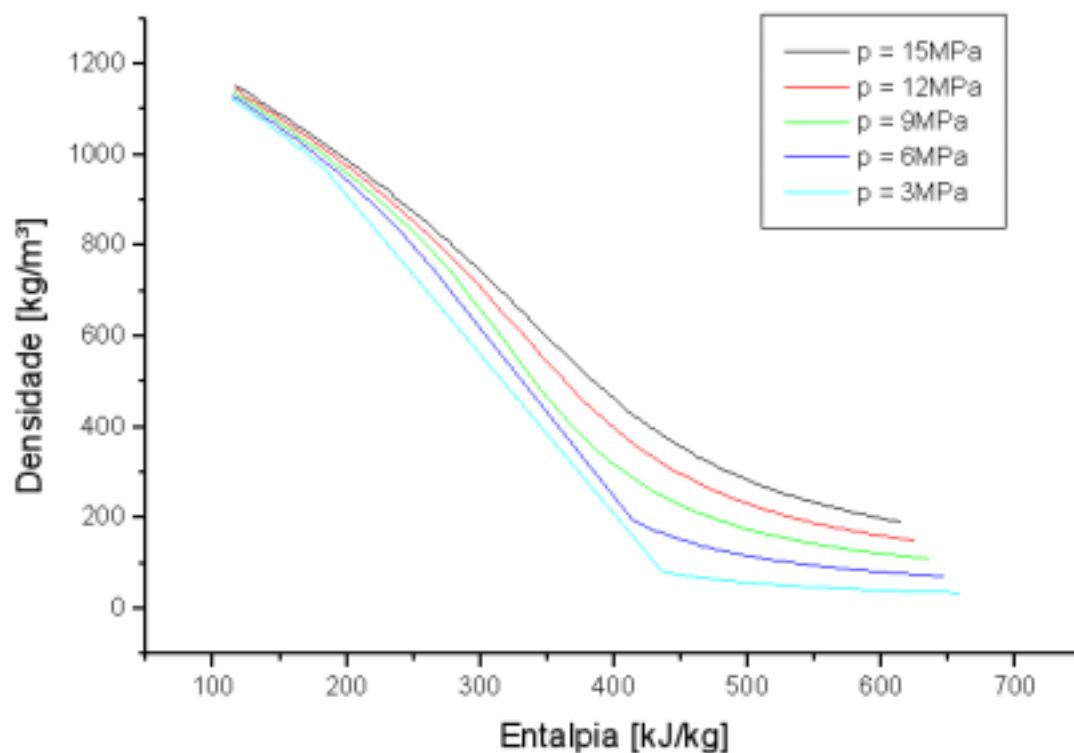


Figura 7.4 – Variação da densidade com a entalpia ao longo de isobáricas.

7.1.2 Vantagens do método

- Rápido acesso aos pontos de interpolação.
- Fácil implementação do algoritmo.

7.1.3 Desvantagens do método

- Uso de mais de um arquivo para o mesmo refrigerante, onde o ideal seria apenas um.
- Concentração desnecessária de pontos em certas partes do domínio.
- Dificuldade de refino local.
- Grade distorcida na região próxima ao ponto crítico ocasionando erros consideráveis de interpolação.

7.1.4 Comentários

Conseguir uma quantidade mínima de pontos para satisfazer às exigências de precisão da função de interpolação foi uma tarefa demorada com o MATLAB, pois o refino era aplicado a toda região, de uma forma arbitrária, o que implicou em uma grade de pontos muito grande, com grandes arquivos (todos com mais de 1MB), que consumiram muito tempo para serem carregados posteriormente. Isto se deve a uma construção não eficiente do algoritmo e ao fato do MATLAB usar uma linguagem interpretada e não compilada.

Diante dessas dificuldades, antes de concluir o diagrama p-h, pensou-se em fazer o contrário: construir uma grade de pontos temperatura versus densidade e calcular as propriedades entalpia e pressão, o que seria uma tarefa bem mais rápida.

Como era de se esperar, a construção da grade inteira foi muito rápida e levou menos tempo que a construção da menor parte do diagrama p-h. Mas antes de fazer a interpolação é necessário fazer uma busca pelo argumento p-h através da grade e escolher os pontos certos para interpolar. Justamente nesse ponto a tentativa de usar um diagrama T-p fracassou. O tempo consumido para fazer tal busca era praticamente o mesmo usado pela equação de estado para calcular uma propriedade e o principal objetivo deste trabalho é exatamente acelerar os cálculos das propriedades termodinâmicas e dispensar o uso de tais equações. Assim, esta tática foi abandonada e a anterior foi levada adiante.

Mesmo sendo a melhor forma encontrada até então, os resultados obtidos não eram muito confiáveis, devido ao modo como o algoritmo trabalhava. Além disso, o tamanho dos arquivos inviabilizou esse tipo de estratégia.

Assim, o uso do MATLAB na construção de uma grade de pontos e posterior interpolação de propriedades termodinâmicas, serviu como experiência, conferindo mais importância ao uso do C++.

Trabalhando com C++, muitos erros cometidos no MATLAB foram corrigidos e o programa final apresentou resultados bem melhores. O resultado final foi um código otimizado e amigável ao usuário, com rapidez na geração e refino da grade. Graças a esses fatores, apenas o trabalho feito na linguagem C++ foi escolhido para se fazer os testes de velocidade de cálculo em relação às equações de estado e de precisão dos dados interpolados. Outro fator importante foi descobrir que os dados interpolados eram mais precisos quando o refino da grade era feito com a entalpia. Isto implicou em arquivos menores se comparados com os do MATLAB e, conseqüentemente, mais rápidos de serem lidos.

7.2 Método da Malha

Este método, a princípio, pareceu ser a proposta final para resolver os cálculos de interpolação das propriedades termodinâmicas, pois vários problemas haviam sido superados como a melhor distribuição de pontos e a possibilidade de refino local. Os resultados dos dados interpolados foram satisfatórios como mostra as figuras 7.5 e 7.6.

A avaliação do tempo consumido pelo método da malha apresentou um bom resultado quando os valores das propriedades são visualizados pela interface gráfica, apresentada na

figura 6.1. Nesta interface, as propriedades termodinâmicas são interpoladas e exibidas na parte superior quando o cursor passa sobre a região. O mesmo é representado por uma cruz.

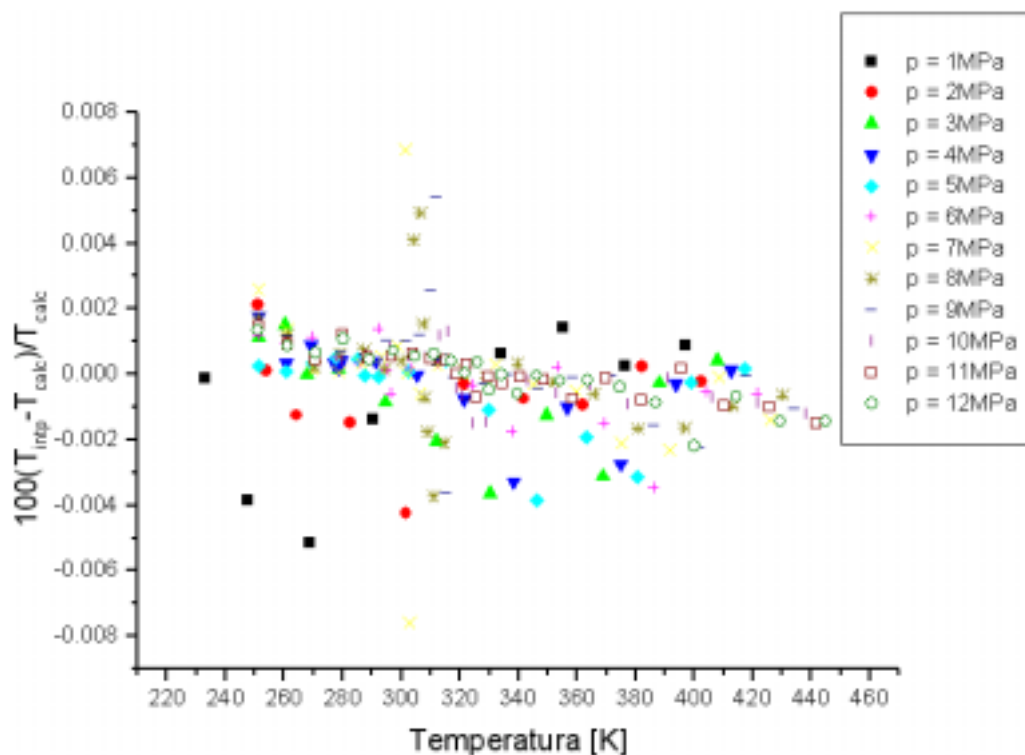


Fig 7.5 – Erro percentual para a temperatura pelo método da malha.

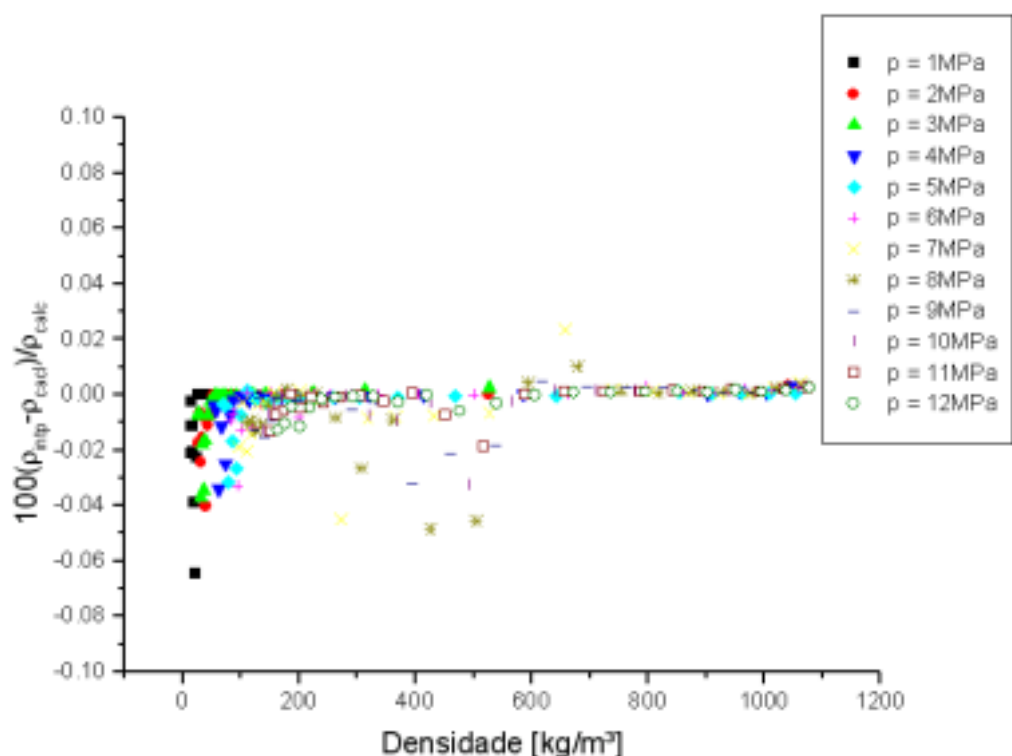


Fig 7.6 – Erro percentual para a densidade pelo método da malha.

Os cálculos são rápidos o suficiente para acompanhar o movimento deste. Isto se deve ao fato de que a posição do cursor é identificada no algoritmo de busca como sendo sempre um elemento vizinho da posição anterior. A figura 7.7 mostra um trecho qualquer da malha com a trajetória percorrida pelo cursor. Apenas os elementos em vermelho participam dos

cálculos. A localização dos elementos é muito rápida e isso facilita os cálculos de interpolação. Entretanto, se valores aleatórios de pressão e entalpia são fornecidos a este algoritmo, o tempo de busca torna-se alto o bastante a ponto de se igualar ou até mesmo ultrapassar o tempo gasto pelas equações de estado. Em um teste de comparação de tempo foram usados 10166 pontos p-h. Seus resultados são mostrados na tabela 7.2.

Em média, as EOS levaram 10.36s e o método da malha 35.92s. O que torna as EOS quase três vezes e meia mais rápidas que o método da malha. Por esse motivo, este método não satisfaz por completo os objetivos desejados.

7.2.1 Vantagens

- Utilização de um único arquivo por refrigerante.
- Melhor distribuição de pontos.
- Facilidade para refinamento localizado.
- Resultados mais precisos.
- Arquivo de menor tamanho quando comparado aos do primeiro método (cerca de seis vezes menor).

7.2.3 Desvantagem

- Praticamente o mesmo tempo consumido pelas equações de estado.

Tabela 7.2 – Comparação entre tempo consumido pelas EOS e pelo método da malha.

Número de testes	Tempo em segundos	
	EOS	Método da malha
1º	10.40	34.8
2º	10.24	36.12
3º	10.41	36.20
4º	10.40	36.22
5º	10.43	36.27

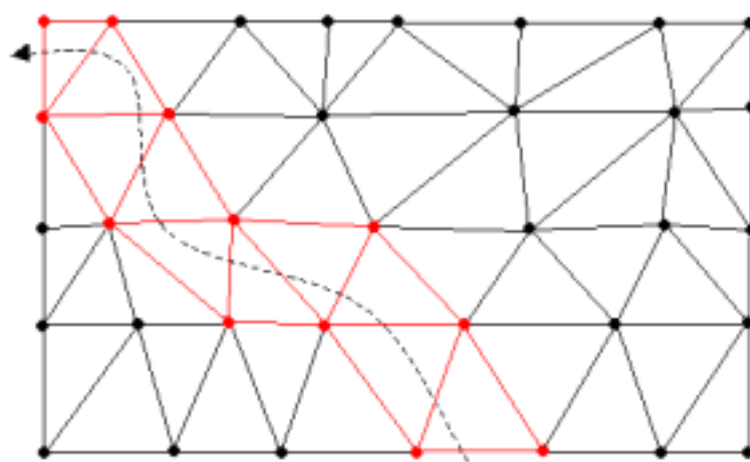


Figura 7.7 – Trecho qualquer da malha indicando o caminho percorrido pelo cursor.

7.3 Método da grade de pontos modificada

Associando a facilidade e rapidez no acesso de dados do primeiro método e a distribuição mais equilibrada dos mesmos por toda região do segundo método, o método da grade de pontos modificada apresentou os melhores resultados. Os resultados de precisão

ficaram tão bons quanto os do método da malha (vide Fig. 7.9 e 7.10). Em relação ao tempo consumido nos cálculos, os dois últimos métodos se igualam durante a visualização das propriedades por meio da interface gráfica. Quando comparados com as equações de estado o método da grade de pontos modificada leva uma grande vantagem. Na tabela 7.3 pode ser verificado o tempo consumido para calcular 10166 pontos pelas equações de estado e pelo método da grade modificada. Em média, o novo método é 115 vezes mais rápido do que as equações de estado de múltiplos parâmetros.

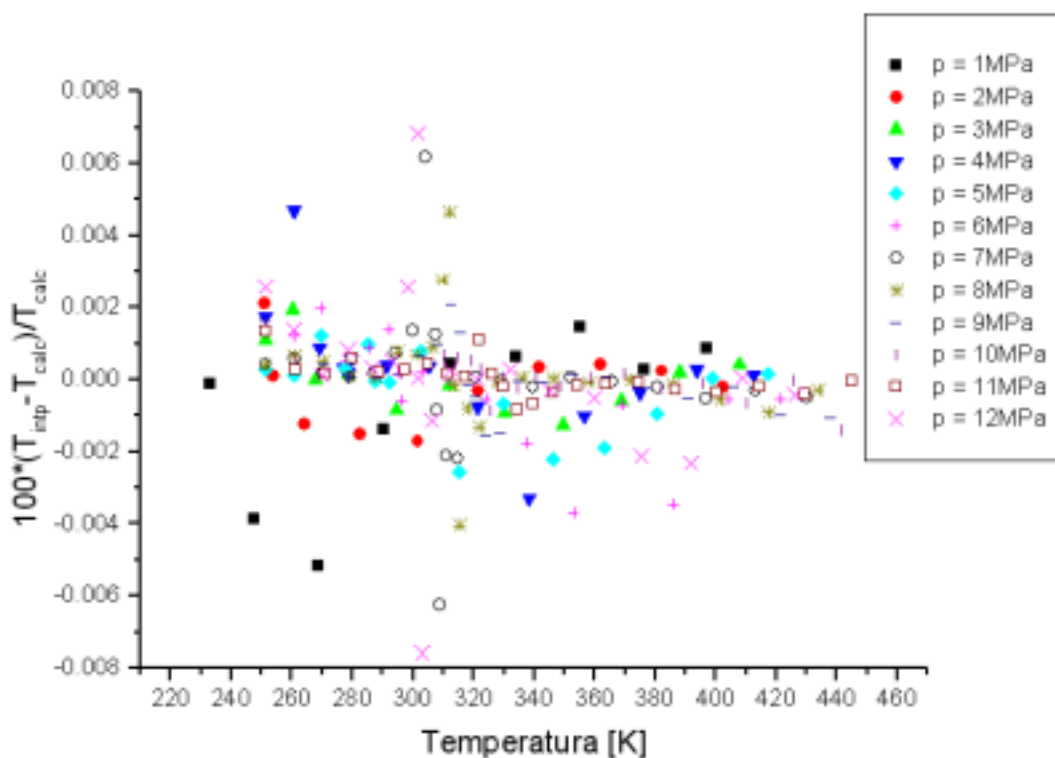


Fig 7.8 – Erro percentual para a temperatura pelo método da grade modificada.

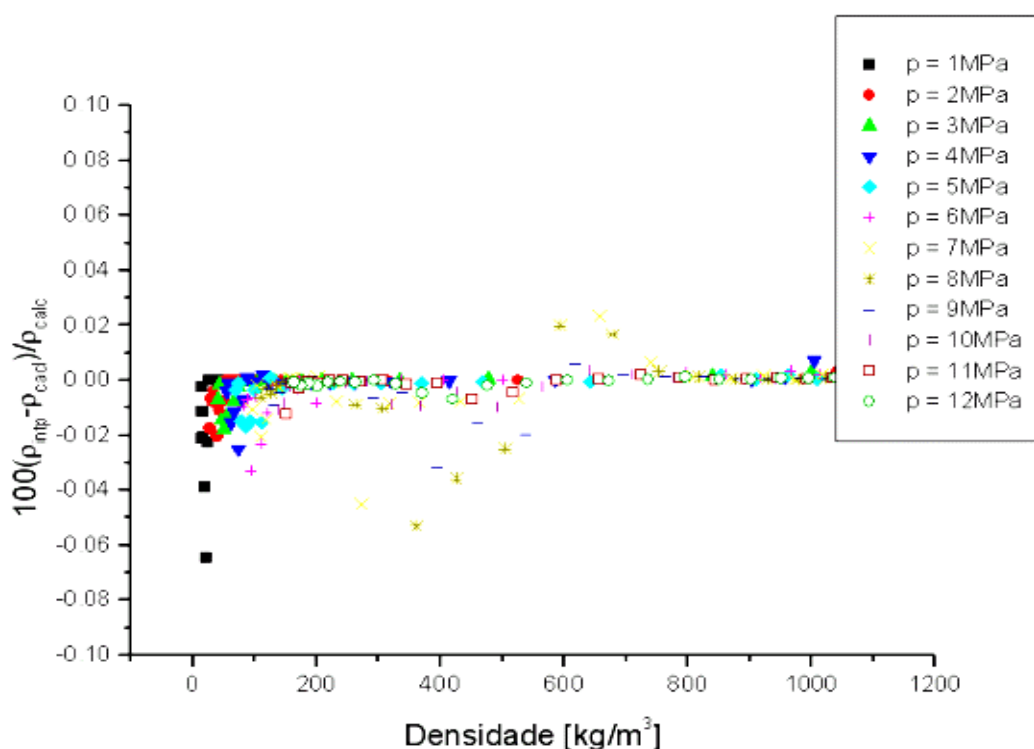


Fig 7.9 – Erro percentual para a densidade pelo método da grade modificada.

Tabela 7.3 – Comparação do tempo consumido pelas EOS e pelo método da grade de pontos modificada.

Número de testes	Tempo em segundos	
	EOS	Método da malha modificada
1º	10.315	0.09
2º	10.355	0.091
3º	10.525	0.091
4º	10.315	0.09
5º	10.225	0.09

8. CONCLUSÕES E PROPOSTAS PARA FUTUROS TRABALHOS

Neste capítulo são relatadas algumas conclusões retiradas das experiências na elaboração do presente trabalho (principais conclusões) bem como as conclusões finais do deste trabalho referentes ao método da grade de pontos modificada. Ao final são apresentadas propostas para continuação do presente trabalho.

8.1 Principais conclusões:

- O método da grade de pontos serviu apenas como uma experiência introdutória na tentativa de criar uma forma rápida de calcular dados por meio de interpolação linear de dados pré-calculados. A geração de arquivos muito grandes tornou inviável a utilização deste método apesar da rapidez dos cálculos.
- A uso da lista circular como estrutura de dados permitiu gerar pontos sobre o domínio $p-h$ de forma muito mais equilibrada eliminando o problema da concentração desnecessária de pontos. Foi reduzido drasticamente o tamanho da memória necessária. Todas as informações foram condensadas em um único arquivo. Uma lista simplesmente encadeada também possibilitaria tal resultado.
- O uso da triangulação Delaunay facilitou a interpolação por já definir os elementos triangulares usados na interpolação linear. Os cálculos são bastante rápidos apenas quando é usada a interface gráfica, ou seja, quando as coordenadas do cursor são convertidas em pressão e entalpia, pois estas fazem parte da trajetória percorrida pelo mesmo. Para calcular pontos aleatórios o tempo de resposta recai drasticamente, igualando-se ao tempo consumido pelas equações de estado.
- O método da grade de pontos modificada foi o melhor método testado. Associou os arquivos pequenos obtidos com a lista circular e ao primeiro método. Graças à estrutura isobárica dos dados, foi possível indexar tais isolinhas e tornar o acesso aos dados muito mais rápido. Apesar dos pontos de entalpia não serem separados por um passo constante, o uso de uma busca binária não se mostrou, como se esperava um entrave tão sério, em relação ao tempo gasto.
- A construção de uma grade de pontos usando o método de c_p não apresentou nenhuma vantagem em relação ao anterior onde o passo da entalpia era informado diretamente. Os arquivos tinham quase os mesmos tamanhos e o método do c_p consumia mais tempo para gera-los.
- A possibilidade de refinar localmente apenas certas áreas ajudou a poupar memória.
- A curvatura da linha de saturação próxima ao ponto crítico produz elementos distorcidos diminuindo a proximidade dos pontos interpolados e levando, dessa forma, a erros significativos. Porém, tal situação não compromete o programa pois, em geral, nas simulações nenhum componente é projetado para trabalhar próximo ao ponto crítico.
- A visualização atendeu às expectativas. É possível visualizar as isolinhas de todas as propriedades calculadas assim como o percurso de um ciclo termodinâmico qualquer. Para esse último, bastando apenas fornecer os pontos relevantes do mesmo.

8.2 Conclusões finais

- O método da grade de pontos modificada é o melhor para realizar cálculos rápidos de propriedades termodinâmicas, devido à estrutura de dados usada e ao rápido acesso a qualquer informação contida no arquivo.
- O tamanho dos arquivos (um por substância é menor que 600kB) é outro ponto positivo do método da grade de pontos modificada.

8.3 Proposta para futuros trabalhos:

- Realizar trabalho semelhante para a construção de um diagrama T - s . Não foi possível concluir tal tarefa no presente trabalho.
- Utilizar outras técnicas de interpolação a fim de se obter resultados mais precisos, porém sem tornar os cálculos demasiadamente lentos.
- Acrescentar outras propriedades termodinâmicas como c_p , c_v , ou qualquer uma de interesse em simulações.
- Realizar cálculos em função de outras variáveis de entrada como: p - T , p - v , T - v e h - s .
- Desenvolver uma interface de comunicação a fim de receber dados de um dispositivo eletrônico de medição e obter de forma rápida outras propriedades termodinâmicas.

9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ASHARE HandBook, PSYCHROMETRICS. Chapter 6, 1997.

BEJAN, A. Advanced Engineering Thermodynamics. p171-187, 1998.

CHURAKOV, S.; GOTTSCHANK, M. Thermodynamic properties of natural fluids at high temperatures and pressures, Journal of Conference Abstracts, Vol. 5, p310, 2000.

DIN, F. Thermodynamic functions of gases Vol. 1 Ammonia, Carbon dioxide and Carbon Monoxide. p1-31, 1956.

EDISON, T.A; SENGERS, J.V. Thermodynamic properties of ammonia in the critical region. International Journal of Refrigeration 22, p365-378, 1999.

GARLAND, W. J. Simple functions for the fast approximation of light water thermodynamic properties. Nuclear Engineering and Design 113, p21-34, 1989.

GARLAND, W. J.; WILSON R. J., Extension to the approximation functions for fast calculation of saturated water properties. Nuclear Engineering and Design 136, p515-520, 1992.

GREGOROWICZ, J.; O'CONNELL J. P.; PETERS C.J. Some characteristics of pure fluid properties that challenge equation-of-state models. Fluid Phase Equilibria 116, p94-101, 1996.

INTERNATIONAL JOURNAL OF HEATING, VENTILATING, AIR-CONDITIONING AND REFRIGERATING RESEARCH. Vol 8, No 3, p311-333, 2002

INTERNATIONAL THERMODYNAMIC TABLES OF THE FLUID STATE CARBON DIOXIDE. IUAPAC, Vol 3, p37-67, 1973

KRETZSCHMAR, H. J.; STÖCKER, I.; NABEL, M.; DITTMANN, A. A Method for Generating Interpolation Tables With Optimized Data Density For Fast Interpolations of Thermodynamic Properties in Process Modeling. Presented at the 1995 ASME International Mechanical Engineering Congress & Exposition, San Francisco, California.

LASZLO, M. J. Computational Geometry and Computer Graphics in C++. p163-164, 1996.

McFEE, D.G.; MUELLER, K.H.; LIELMEZS, J. Comparison of benedict-webb-rubin, starling and lee-kesler equations of state for use in P-V-T calculations. Thermochemica Acta 54, p9-25, 1982.

McLINDEN, M.; LEMMON, E., JACOBSEN, R. Thermodynamic properties for the alternative refrigerants. International Journal of Refrigeration, Vol. 21, No. 4, p322-338, 1997.

MONTE, F. DE Calculation of thermodynamic properties of R407C and R410A by the Martin-Hou equation of state - part I: theoretical development. International Journal of Refrigeration 25, p306-313, 2002.

MOREIRA, J. R. S. Fundamentos e aplicações da psicrometria. p21-86, 1999.

MÜLLER, C. W. Fast and accurate water and steam properties programs for two-phase flow calculation. Nuclear Engineering and Design 149, p 449-458, 1994.

OLIVA, W. M. Vetores e Geometria.p80, 1973.

PÁTEK, J.; KLOMFAR, J. Simple functions for fast calculation of selected thermodynamic properties of ammonia-water system. International Journal of Refrigeration, Vol. 18, p228-234, 1995.

PÁTEK, J.; SIFNER, O. Fast calculation of the properties of superheated steam from saturation curve up to 600°C and 30MPa, Nuclear Engineering and Design 148, p515-520, 1994.

REIS, G. L., SILVA, V. V. Geometria Analítica, p107-109, 1996.

SANDLER, S. I. Chemical and engineering thermodynamics, p147-149,181-183, 1989.

SPAN, R. Multiparameter Equations of State. p2-58, 2000.

SPAN, R.; WAGNER, W.; LEMMON, E. W.; JACOBSEN, R. T. Multiparameter equations of state – recent trends and future challenges. Fluid Phase Equilibria, p183-184, 2001.

SWESTY, D. F. Thermodynamically Consistent Interpolation for Equation of State Tables. Journal of Computational Physics 127, p118-127, 1996.

THE INTERNATIONAL ASSOCIATION FOR THE PROPERTIES OF WATER AND STEAM. Supplementary Release on Backward Equations for Pressure as a Function of Enthalpy and Entropy $p(h,s)$ to the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam, Gaithersburg, Maryland, USA, 2001.

VAN DER WAALS, J. D. The equation of state for gases and liquids. Nobel Lecture, December 12, 1910.

VASSERMAN, A. A.; SLYNKO, A. G., BODYUL, S. V. Thermophysical Databank for technically important gases and liquids, Artigo apresentado no Fourteen Symposium on Thermophysical Properties, Boulder, Colorado, USA, Junho 25-30, 2000.

WANG, S.; XIANG, H The modification and generalization of BWR equation, Fluid Phase Equilibria 181, p71-82, 2001.

WEATHERILL, N. P. A method for generating irregular computational grids in multiply connected planar domains, Int.. Journal. for Numerical Methods in Fluids. Vol. 8, p182-186, 1988.

WYLEN, V. G. Fundamentos da Termodinâmica. p306-344, 4ªedição, 1997.

ZHANG, H.; SATO, H.; WATANABE, K. A new three-parameter cubic equation of state for refrigeration engineering calculations. International Journal of Refrigeration, Vol. 20, No. 6, p421-440, 1997.

APÊNDICES

APÊNDICE A

Tabela A.1

Propriedade e definição	Relação com α e suas derivadas
Pressão $p(T, \rho) = - \left(\frac{\partial a}{\partial v} \right)_T$	$\frac{p}{\rho RT} = 1 + \delta \alpha_\delta^r$
Entalpia $h(T, p) = u + pv$	$\frac{h}{RT} = 1 + \tau(\alpha_\tau^0 + \alpha_\tau^r) + \delta \alpha_\delta^r$
Entropia $s(T, \rho) = - \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_v$	$\frac{s}{R} = \tau(\alpha_\tau^0 + \alpha_\tau^r) - \alpha^0 - \alpha^r$
Energia Interna $u(T, \rho) = a + Ts$	$\frac{u}{RT} = \tau(\alpha_\tau^0 + \alpha_\tau^r)$
Calor específico à pressão constante $c_p(T, p) = - \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p$	$\frac{c_p}{R} = -\tau^2(\alpha_{\tau\tau}^0 + \alpha_{\tau\tau}^r) + \frac{(1 + \delta \alpha_\delta^r - \delta \tau \alpha_{\delta\tau}^r)^2}{1 + 2\delta \alpha_\delta^r + \delta^2 \alpha_{\delta\delta}^r}$
Calor específico à volume constante $c_v(T, \rho) = - \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v$	$\frac{c_v}{R} = -\tau^2(\alpha_{\tau\tau}^0 + \alpha_{\tau\tau}^r)$
Coeficiente de Joule-Thomson $\mu(T, p) = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_h$	$\mu R \rho = \frac{-(\delta \alpha_\delta^r + \delta^2 \alpha_{\delta\delta}^r + \delta \tau \alpha_{\delta\tau}^r)}{(1 + \delta \alpha_\delta^r - \delta \tau \alpha_{\delta\tau}^r)^2 - \tau^2(\alpha_{\tau\tau}^0 - \alpha_{\tau\tau}^r)(1 + 2\delta \alpha_\delta^r - \delta^2 \alpha_{\delta\delta}^r)}$
Velocidade do som $w(T, p) = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s}$	$\frac{w^2}{RT} = 1 + 2\delta \alpha_\delta^r + \delta^2 \alpha_{\delta\delta}^r - \frac{(1 + \delta \alpha_\delta^r - \delta \tau \alpha_{\delta\tau}^r)^2}{\tau^2(\alpha_{\tau\tau}^0 + \alpha_{\tau\tau}^r)}$
Energia de Gibbs $g(T, p) = h - Ts$	$\frac{g}{RT} = 1 + \alpha^0 + \alpha^r + \delta \alpha_\delta^r$
Derivadas da pressão $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T$ $\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho$	$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T = RT(1 + 2\delta \alpha_\delta^r + \delta^2 \alpha_{\delta\delta}^r)$ $\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho = R\rho(1 + \delta \alpha_\delta^r - \delta \tau \alpha_{\delta\tau}^r)$

Tabela A.1 (continuação)

Coeficiente e definições	Regras de cálculo
Coeficiente de estrangulamento isotérmico	
$\delta_T(T, p) = \left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_T$	$\delta_T \rho = 1 - \frac{1 + \delta \alpha_\delta^r - \delta \tau \alpha_{\delta\tau}^r}{1 + 2\delta \alpha_\delta^r - \delta^2 \alpha_{\delta\delta}^r}$
Coeficiente de expansão isotérmica	
$k_T(T, p) = -\frac{v}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T$	$k_T = -\frac{\rho}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T$
Coeficiente de expansão isentrópica	
$k_s(T, p) = -\frac{v}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_s$	$k_s = \frac{\rho w^2}{p}$
Coeficiente de Expansão volumétrica	
$\alpha_v(T, p) = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p$	$\alpha_v = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho$
Coeficiente de compressibilidade isotérmica	
$\kappa_T(T, p) = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial p} \right)_T$	$\kappa_T = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T^{-1} = \frac{k_T}{p}$
Coeficiente de compressibilidade isentrópica	
$\kappa_s(T, p) = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial p} \right)_s$	$\kappa_s = \frac{1}{\rho w^2} = \frac{k_s}{p}$

Derivadas da Equação 2.28

Tabela A.2

Derivadas	Dependência da densidade	Constantes e dependência da temperatura
α^0	$\alpha^0 = \ln(\delta)$	$+c^H + c^I \tau + c_0 \ln(\tau) + \sum_{i=1}^{I_{pol}} c_i \tau^{t_i} + \sum_{k=1}^{K_{PE}} m_k \ln(1 - e^{-v_k \tau})$
$\left(\frac{\partial \alpha^0}{\partial \delta}\right)_\tau$	$\alpha_\delta^0 = \frac{1}{\delta}$	$+0$
$\left(\frac{\partial \alpha^0}{\partial \delta}\right)_\tau$	$\alpha_{\delta\delta}^0 = -\frac{1}{\delta^2}$	$+0$
$\left(\frac{\partial \alpha^0}{\partial \delta}\right)_\tau$	$\alpha_{\delta\tau}^0 = 0$	$+0$
$\left(\frac{\partial \alpha^0}{\partial \delta}\right)_\tau$	$\alpha_\tau^0 = 0$	$+c^I \tau + \frac{c_0}{\tau} + \sum_{i=1}^{I_{pol}} c_i t_i \tau^{t_i-1} + \sum_{k=1}^{K_{PE}} m_k v_k \left(\frac{1}{1 - e^{-v_k \tau}} - 1 \right)$
$\left(\frac{\partial \alpha^0}{\partial \delta}\right)_\tau$	$\alpha_{\tau\tau}^0 = 0$	$-\frac{c_0}{\tau^2} + \sum_{i=1}^{I_{pol}} c_i t_i (t_i - 1) \tau^{t_i-2} - \sum_{k=1}^{K_{PE}} m_k v_k \left(\frac{e^{-v_k \tau}}{1 - e^{-v_k \tau}} \right)^2$

Derivadas da Equação 2.30

Tabela A.3

Derivadas, abreviações e formulações em termos de τ e δ

$$\begin{aligned}
 \alpha^r &= \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} + \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} \exp(-\gamma_i \delta^{p_i}) \\
 \left(\frac{\partial \alpha^r}{\partial \delta} \right)_{\tau} &= \alpha_{\delta}^r = \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i d_i \delta^{d_i-1} \tau^{t_i} + \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i \delta^{d_i-1} (d_i - \gamma_i p_i \delta^{p_i}) \tau^{t_i} \exp(-\gamma_i \delta^{p_i}) \\
 \left(\frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \delta^2} \right)_{\tau} &= \alpha_{\delta\delta}^r = \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i d_i (d_i - 1) \delta^{d_i-2} \tau^{t_i} + \\
 &\quad \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i \delta^{d_i-2} ((d_i - \gamma_i p_i \delta^{p_i})(d_i - 1 - \gamma_i p_i \delta^{p_i}) - \gamma_i^2 p_i^2 \delta^{p_i}) \tau^{t_i} \exp(-\gamma_i \delta^{p_i}) \\
 \left(\frac{\partial \alpha^r}{\partial \tau} \right)_{\delta} &= \alpha_{\tau}^r = \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i t_i \delta^{d_i} \tau^{t_i-1} + \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i t_i \delta^{d_i} \tau^{t_i-1} \exp(-\gamma_i \delta^{p_i}) \\
 \left(\frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \tau^2} \right)_{\delta} &= \alpha_{\tau\tau}^r = \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i t_i (t_i - 1) \delta^{d_i} \tau^{t_i-2} + \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i t_i (t_i - 1) \delta^{d_i} \tau^{t_i-2} \exp(-\gamma_i \delta^{p_i}) \\
 \left(\frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \delta \partial \tau} \right)_{\delta} &= \alpha_{\delta\tau}^r = \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i d_i t_i \delta^{d_i-1} \tau^{t_i-1} + \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i t_i \delta^{d_i} (d_i - \gamma_i p_i \delta^{p_i}) \tau^{t_i-1} \exp(-\gamma_i \delta^{p_i}) \\
 \left(\frac{\partial^3 \alpha^r}{\partial \delta \partial \tau^2} \right) &= \alpha_{\delta\tau\tau}^r = \sum_{i=1}^{I_{pol}} n_i d_i t_i (t_i - 1) \delta^{d_i-1} \tau^{t_i-2} + \\
 &\quad \sum_{i=I_{pol}+1}^{I_{pol}+I_{exp}} n_i t_i (t_i - 1) \delta^{d_i-1} (d_i - \gamma_i p_i \delta^{p_i}) \tau^{t_i-2} \exp(-\gamma_i \delta^{p_i})
 \end{aligned}$$

APÊNDICE B

Triangulação Delaunay

Definição: Seja $P = \{p_1, p_2, p_3, \dots, p_n\}$ um conjunto finito de pontos. É considerada uma triangulação Delaunay se as seguintes condições forem satisfeitas:

- Caso haja apenas três pontos estes não podem ser colineares;
- Se houver um mínimo de quatro pontos estes não podem ser cocirculares;
- A circunferência que circunscreve um triângulo só pode conter os vértices do mesmo.
- Não é permitido nenhum ponto no interior da circunferência;
- Arestas de triângulos não podem se cruzar;

A figura B.1 mostra um pequeno exemplo de uma triangulação Delaunay. Os nós são interligados uns aos outros formando triângulos mas obedecendo às definições acima.

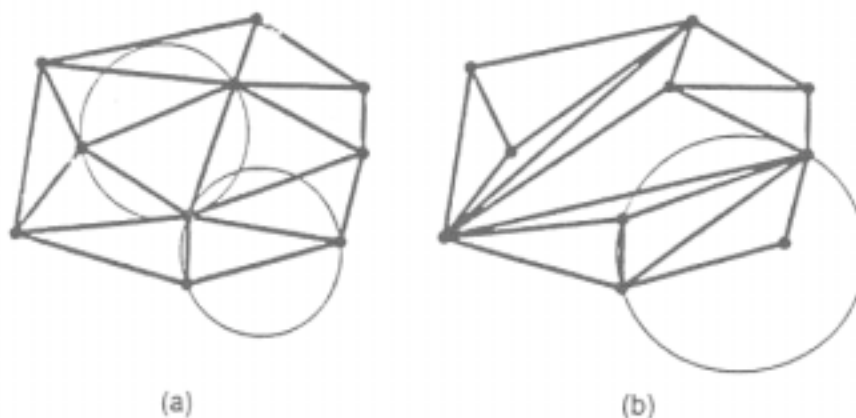


Figura B.1 – (a) é uma triangulação Delaunay e (b), não o é.

Teorema: Supondo o mesmo conjunto P de n pontos acima e que i seja o número de pontos da fronteira (Figura B.2), a triangulação de P contém exatamente $n + i - 2$ triângulos.

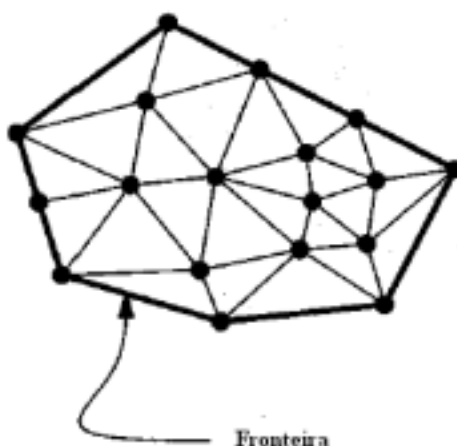


Figura B.2 – Fronteira da malha em destaque.

A triangulação Delaunay é única para o mesmo conjunto de pontos. Algoritmos diferentes devem apresentar resultados idênticos. Essa definição é importante porque permitiu que testes fossem realizados por geradores de malha diferentes usando o mesmo conjunto de pontos. Dessa forma, malhas obtidas usando as funções do MATLAB ou implementadas em

C++ são idênticas se a distribuição de pontos for a mesma. Com isso, não houve nenhuma alteração de informação na passagem de uma linguagem para outra.

Testes de geração de malha usando a triangulação Delaunay foram realizados primeiramente no ambiente MATLAB e, em seguida, usando a linguagem C++. O MATLAB foi usado inicialmente porque já possui uma função de geração de malha e a visualização da mesma pode ser feita de forma rápida.

Estrutura de Dados – Lista circular duplamente encadeada

Diferente de um vetor ou de uma matriz, que tem um tamanho fixo, a lista é uma estrutura de dados dinâmica, que cresce à medida que se precisa armazenar novos elementos e diminui à medida que se precisa retirar elementos armazenados anteriormente. Cada elemento(ou nó) da lista armazena a informação e dois apontadores: um para o antecessor e outro para o sucessor. Não é possível acessar um nó diretamente como ocorre com um vetor. Para acessar um nó é preciso percorrer todos os nós que o antecedem ou sucedem. A lista duplamente encadeada é um tipo de lista bastante versátil, pois é possível percorre-la em ambos os sentidos a partir de um ponteiro para qualquer elemento. Nos testes realizados, a informação contida de cada nó era composta por: pressão, entalpia, temperatura e densidade. A figura B.3 mostra uma lista circular duplamente encadeada.

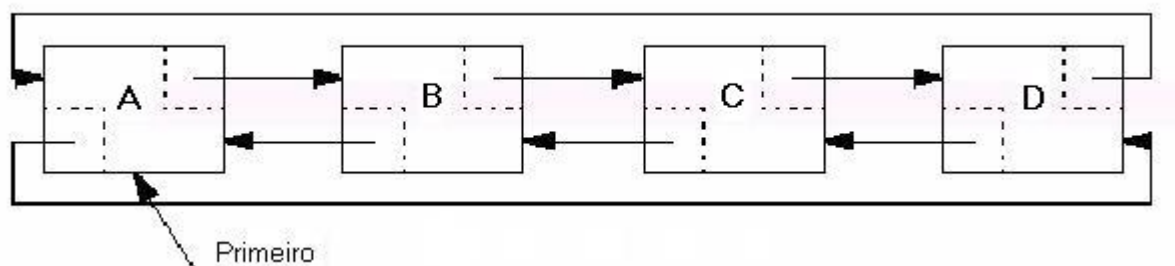


Figura B.3 – Lista circular duplamente encadeada.

APÊNDICE C

1. Funções desenvolvidas por Garlan e Hand (1988) para representar algumas propriedades termodinâmicas em função de p e T para água. Para a região de líquido comprimido foram obtidas:

$$\rho(p, T) = \rho_f(p_s(T)) + \left[\frac{170}{375 - T} - 0.2 \right] (p - p_s) \quad \text{C.1}$$

$$h(p, T) = h_f(p_s(T)) + \left[1.4 - \frac{169}{369 - T} \right] (p - p_s) \quad \text{C.2}$$

$$s(p, T) = s_f(p_s(T)) + \left[0.0004 - \frac{0.325}{370 - T} \right] (p - p_s) \quad \text{C.3}$$

Os termos ρ_f , h_f e s_f são funções da pressão de saturação e são descritos por meio da expressão C.4.

$$F_f = [Ap_s^b + c]^d \quad \text{C.4}$$

A expressão C.4 é definida para várias faixas de pressão assim como seus parâmetros A, b, c e d.

Para a região de vapor superaquecido foram obtidas

$$v(p, T) = v_g(p) + \left[\frac{0.000466}{p} - \frac{[0.12/(T + 100) - 0.00106]p^{0.1}}{\sqrt{1.96 \times 10^{-8}(T + 8)^4 - p^2}} \right] (T - T_s) \quad \text{C.5}$$

$$h(p, T) = h_g(p) + \left[\frac{4.5p}{\sqrt{7.4529 \times 10^{-0.6}T^3 - p^2}} + 0.28e^{-0.008(T-162)} - \frac{100}{T} - 2.225 \right] (T - T_s) \quad \text{C.6}$$

$$s(p, T) = s_g(p) + \left[\frac{0.004p^{1.2}}{\sqrt{3.025 \times 10^{-11}(T + 46)^5 - p^2}} + \frac{0.00006}{\sqrt{p}} - 4.125 \times 10^{-6}T + 0.0053 \right] (T - T_s) \quad \text{C.7}$$

O subscrito g indica a propriedade na linha de vapor saturado. Cada uma das funções v_g , h_g e s_g é definida para várias faixas de pressão, porém não se baseiam na expressão C.4.

2. Função de interpolação *bi-quintic* usada por Swesty (1996) para calcular a energia livre de Helmholtz em função da temperatura e densidade.

Função de interpolação *bi-quintic*.

$$\begin{aligned}
\tilde{F}(T, n) = & F^{i,j} \psi_x^0 \psi_y^0 + F^{i+1,j} \psi_{1-x}^0 \psi_y^0 + F^{i,j+1} \psi_x^0 \psi_{1-y}^0 \\
& + F^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^0 \psi_{1-y}^0 + F_T^{i,j} \psi_x^1 \psi_y^0 - F_T^{i+1,j} \psi_{1-x}^1 \psi_y^0 \\
& + F_T^{i,j+1} \psi_x^1 \psi_{1-y}^0 - F_T^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^1 \psi_{1-y}^0 + F_{TT}^{i,j} \psi_x^2 \psi_y^0 \\
& + F_{TT}^{i+1,j} \psi_{1-x}^2 \psi_y^0 + F_{TT}^{i,j+1} \psi_x^2 \psi_{1-y}^0 + F_{TT}^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^2 \psi_{1-y}^0 \\
& + F_n^{i,j} \psi_x^0 \psi_y^1 + F_n^{i+1,j} \psi_{1-x}^0 \psi_y^1 - F_n^{i,j+1} \psi_x^0 \psi_{1-y}^1 \\
& - F_n^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^0 \psi_{1-y}^1 + F_{nn}^{i,j} \psi_x^0 \psi_y^2 + F_{nn}^{i+1,j} \psi_{1-x}^0 \psi_y^2 \\
& + F_{nn}^{i,j+1} \psi_x^0 \psi_{1-y}^2 + F_{nn}^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^0 \psi_{1-y}^2 + F_{Tn}^{i,j} \psi_x^1 \psi_y^1 \\
& - F_{Tn}^{i+1,j} \psi_{1-x}^1 \psi_y^1 - F_{Tn}^{i,j+1} \psi_x^1 \psi_{1-y}^1 + F_{Tn}^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^1 \psi_{1-y}^1 \\
& + F_{TTn}^{i,j} \psi_x^2 \psi_y^1 + F_{TTn}^{i+1,j} \psi_{1-x}^2 \psi_y^1 - F_{TTn}^{i,j+1} \psi_x^2 \psi_{1-y}^1 \\
& - F_{TTn}^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^2 \psi_{1-y}^1 + F_{Tnn}^{i,j} \psi_x^1 \psi_y^2 - F_{Tnn}^{i+1,j} \psi_{1-x}^1 \psi_y^2 \\
& + F_{Tnn}^{i,j+1} \psi_x^1 \psi_{1-y}^2 - F_{Tnn}^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^1 \psi_{1-y}^2 + F_{TTnn}^{i,j} \psi_x^2 \psi_y^2 \\
& + F_{TTnn}^{i+1,j} \psi_{1-x}^2 \psi_y^2 + F_{TTnn}^{i,j+1} \psi_x^2 \psi_{1-y}^2 + F_{TTnn}^{i+1,j+1} \psi_{1-x}^2 \psi_{1-y}^2,
\end{aligned}$$

Definição dos coeficientes da função *bi-quintic*.

$$\begin{aligned}
F_n^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial F}{\partial n} \right|_{ik} (n_{j+1} - n_j), \\
F_T^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{ik} (T_{i+1} - T_i), \\
F_{nn}^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial^2 F}{\partial n^2} \right|_{ik} (n_{j+1} - n_j)^2, \\
F_{TT}^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right|_{ik} (T_{i+1} - T_i)^2, \\
F_{Tn}^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial n} \right|_{ik} (T_{i+1} - T_i)(n_{j+1} - n_j), \\
F_{TTn}^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial^3 F}{\partial T^2 \partial n} \right|_{ik} (T_{i+1} - T_i)^2(n_{j+1} - n_j), \\
F_{Tnn}^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial^3 F}{\partial T \partial n^2} \right|_{ik} (T_{i+1} - T_i)(n_{j+1} - n_j)^2, \\
F_{TTnn}^{ik} & \equiv \left. \frac{\partial^4 F}{\partial T^2 \partial n^2} \right|_{ik} (T_{i+1} - T_i)^2(n_{j+1} - n_j)^2,
\end{aligned}$$

APÊNDICE D

A base de dados usados na interpolação é determinada observando-se o comportamento do erro por todo o domínio $p-h$. Os ajustes são feitos alterando-se os passos da pressão e/ou da entalpia. As figuras de 1 a 7 e a tabela D1 ilustram tal procedimento. É possível notar que a diminuição do passo da pressão exerce pouca influência na precisão (Figuras D1,D3 e D5) enquanto que a redução no passo da entalpia se torna bastante evidente (Figuras D2,D4 e D6).

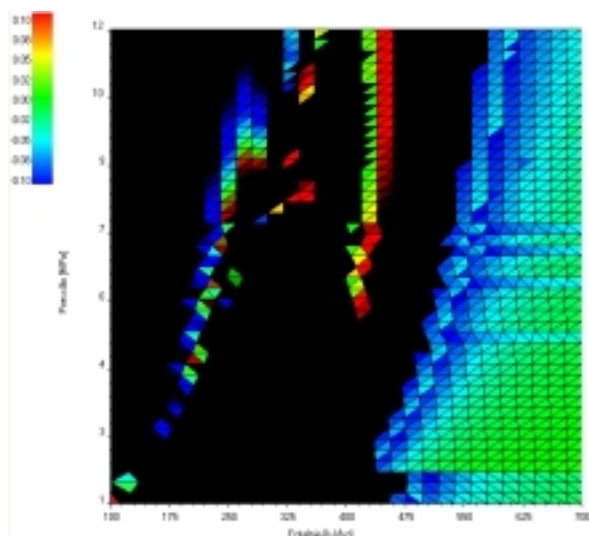


Figura D1

$$\Delta p = 250 \text{ kPa} \quad \Delta h = 20 \text{ kJ / kg}$$

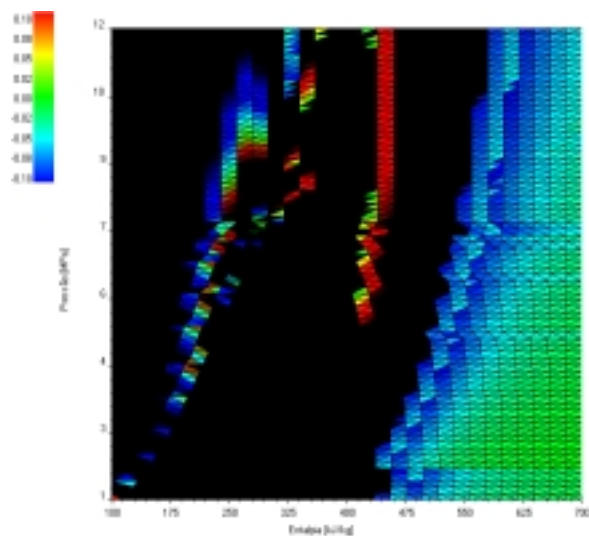


Figura D2

$$\Delta p = 150 \text{ kPa} \quad \Delta h = 20 \text{ kJ / kg}$$

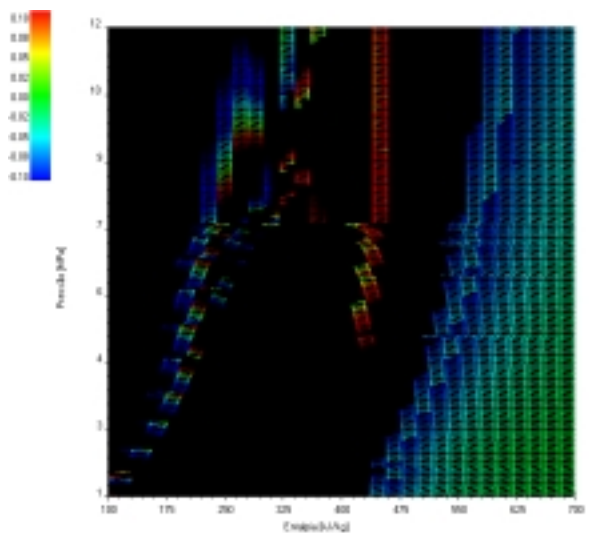


Figura D3

$$\Delta p = 50 \text{ kPa} \quad \Delta h = 20 \text{ kJ / kg}$$

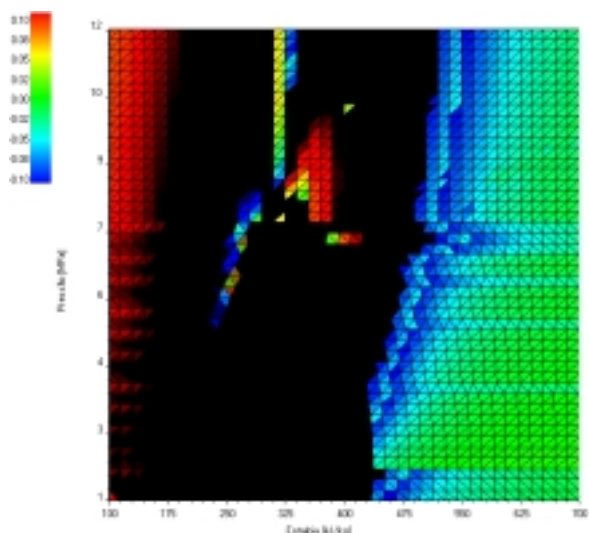


Figura D4

$$\Delta p = 250 \text{ kPa} \quad \Delta h = 15 \text{ kJ / kg}$$

Na figura D6, foi necessário reduzir o passo para 5 kJ/kg e conseguir uma redução significativa do erro. Porém, regiões que já estavam bem definidas receberam uma quantidade de informações além do necessário, aumentando assim o tamanho do arquivo. A figura D7 mostra que o refino pode poupar alguma memória. Apenas as regiões onde o erro excedia o máximo tolerado tiveram o passo reduzido para 5kJ/kg.

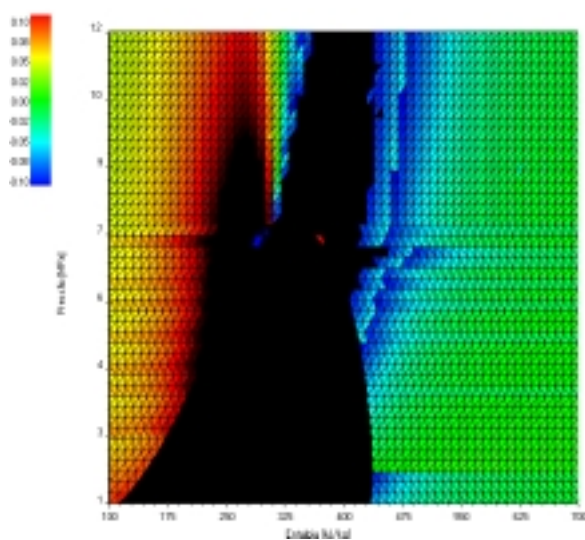


Figura D5

$$\Delta p = 250 \text{ kPa} \quad \Delta h = 10 \text{ kJ / kg}$$

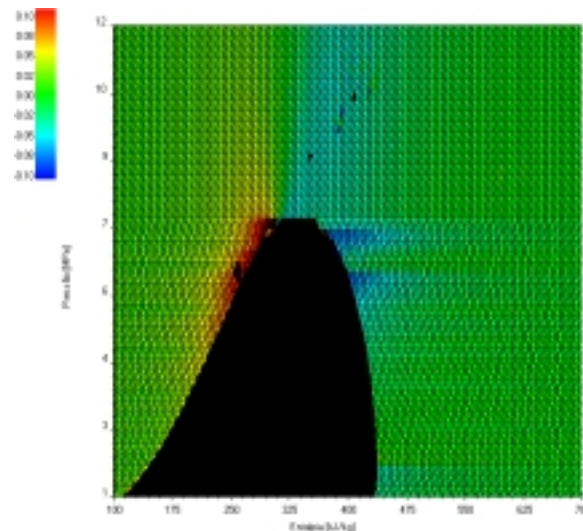


Figura D6

$$\Delta p = 250 \text{ kPa} \quad \Delta h = 5 \text{ kJ / kg}$$

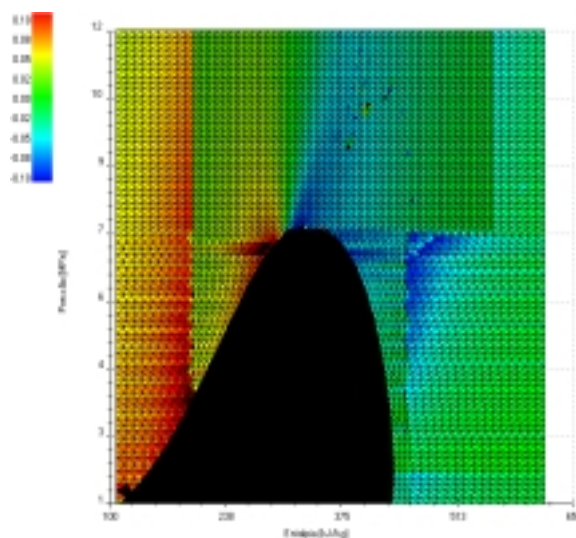


Figura D7

$$\Delta p = 250 \text{ kPa} \quad \Delta h = 10 \text{ kJ / kg}$$

$$\Delta p = 250 \text{ kPa} \quad \Delta h = 5 \text{ kJ / kg (refino)}$$

Tabela D1 – Definição dos passos de pressão e entalpia para o CO₂.

Figura	Δp (kPa)	Δh (kJ/kg)
D1	250	20
D2	150	20
D3	50	20
D4	250	15
D5	250	10
D6	250	5
D7	250	10
Refino	250	5

APÊNDICE E

A figura E.1 mostra a interface criada para construir a carta psicrométrica em função da pressão atmosférica ou altitude.

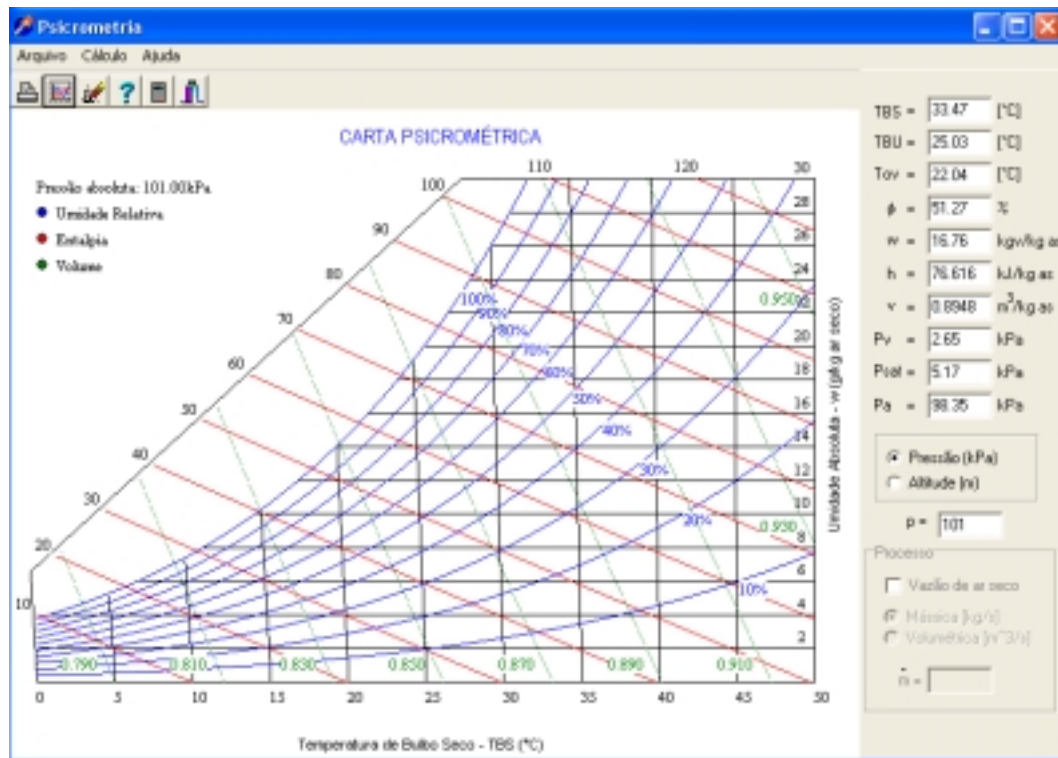


Figura E.1 – Interface criada para construir carta psicrométrica.

À direita estão as propriedades que são calculadas em função da temperatura de bulbo seco (TBS) e da umidade absoluta (ω). Sobre a carta, as linhas vermelhas são isoentalpicas, as linhas verdes isocóricas e as azuis são linhas de umidade relativa constante. A notação usada aqui é:

- TBS = temperatura de bulbo seco
- TBU = temperatura de bulbo úmido
- T_{ov} = temperatura de ponto de orvalho
- ϕ = umidade relativa
- ω = umidade absoluta
- h = entalpia específica
- v = volume específico
- p_v = pressão parcial de vapor
- p_a = pressão parcial do ar seco
- p_{sat} = pressão de saturação

As equações foram obtidas em ASHARE, 1997, capítulo 6.

pressão de saturação: $\ln(p_s) = C_8 / T + C_9 + C_{10}T + C_{11}T^2 + C_{12}T^3 + C_{13} \ln T$

pressão em função da altitude: $p = 101.325(1 - 2.25577 \times 10^{-5}Z)^{5.2559}$