



MODELAGEM COMPUTACIONAL DA CIRCULAÇÃO NATURAL DO CO₂ SUPERCRÍTICO

Gabriel Caetano Gomes Ribeiro da Silva

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientador: Su Jian

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2019

MODELAGEM COMPUTACIONAL DA CIRCULAÇÃO NATURAL DO CO₂
SUPERCRÍTICO

Gabriel Caetano Gomes Ribeiro da Silva

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Su Jian, D.Sc.

Prof. Atila Pantaleão Silva Freire, Ph.D.

Dr. José Luiz Horácio Faccini, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
FEVEREIRO DE 2019

Silva, Gabriel Caetano Gomes Ribeiro da
Modelagem Computacional da Circulação Natural do
CO₂ Supercrítico/Gabriel Caetano Gomes Ribeiro da Silva.
– Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2019.
XVIII, 85 p.: il.; 29,7cm.
Orientador: Su Jian
Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de
Engenharia Nuclear, 2019.
Referências Bibliográficas: p. 77 – 80.
1. Circulação Natural. 2. CFD. 3. CO₂
Supercrítico. 4. Transferência de Calor. I. Jian,
Su. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*À minha mãe, pelo seu amor e
esforço.*

Agradecimentos

À força superior que orienta o cosmos, a qual muitos denominam “Deus”, minha profunda gratidão.

A minha família e meus amigos, que são o meu alicerce, meu sincero agradecimento.

A meus mentores espirituais, gratidão.

Ao meu parceiro Walker, pelo carinho, paciência e motivação, muito obrigado.

Ao meu orientador, prof. Su Jian, por sua confiança e seus ensinamentos, tanto acadêmicos quanto pessoais, muito obrigado.

Ao meus colegas de laboratório, muito obrigado, pois sem a ajuda de vocês este trabalho não poderia ter sido escrito.

Ao pessoal do Programa de Engenharia Nuclear (PEN/COPPE), pela afabilidade e assistência, obrigado.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes), pelo aporte oferecido, meu sincero agradecimento.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

MODELAGEM COMPUTACIONAL DA CIRCULAÇÃO NATURAL DO CO₂ SUPERCRÍTICO

Gabriel Caetano Gomes Ribeiro da Silva

Fevereiro/2019

Orientador: Su Jian

Programa: Engenharia Nuclear

Sistemas passivos de remoção de calor residual por circulação natural são indispensáveis para o futuro da energia nuclear. Na tentativa de otimizar estes sistemas, a utilização do CO₂ supercrítico é uma alternativa considerada por muitos pesquisadores devido às altas taxas de troca térmica e baixa perda de carga. Este trabalho visa investigar uma das principais limitações intrínsecas deste tipo de sistema, o fenômeno da deterioração da transferência de calor (HTD). Foram analisadas as quatro configurações mais comuns de um circuito de circulação natural retangular, que diferem-se pela orientação do aquecedor e do resfriador. As simulações foram realizadas em estado estacionário, empregando um modelo tridimensional. O modelo de turbulência escolhido foi o RNG $k-\varepsilon$. O código utilizado foi o ANSYS Fluent v. 18.2. A vazão de circulação natural e a temperatura média foram analisadas em função da potência de aquecimento para as quatro configurações do circuito e para três diferentes pressões de operação (8,5 MPa, 9,0 MPa e 9,5MPa). Os resultados foram comparados com as correlações empíricas de SWAPNALEE *et al.* [1] e YADAV *et al.* [2] com intuito de verificar a simulação. O regime de HTD foi observado para todos os casos estudados. Observou-se que o aumento da pressão de operação retarda o surgimento do regime da HTD e também induz um sensível aumento na vazão de circulação natural após o início da HTD, para todos os casos estudados. Com o intuito de investigar a transferência de calor do sistema, o número de Nusselt foi analisado em função do número de Rayleigh e observou-se que a correlação descrita por YADAV *et al.* [2] apresentou boa concordância com os resultados obtidos da simulação. Por fim, foram propostas correlações para a transferência de calor e para o número de Reynolds, individualmente para cada configuração, e uma correlação para o fator de atrito, para todos os casos estudados.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

COMPUTATIONAL MODELING OF SUPERCRITICAL CO₂ IN NATURAL CIRCULATION LOOPS

Gabriel Caetano Gomes Ribeiro da Silva

February/2019

Advisor: Su Jian

Department: Nuclear Engineering

Passive safety systems for residual heat removal through natural circulation are indispensable for the future of nuclear energy. In an attempt to optimize such systems, the use of supercritical CO₂ is an alternative considered by many researchers due to the high rates of heat transfer and low pressure drop. This work aims to investigate one of the main intrinsic limitations of this system type, the phenomenon of heat transfer deterioration (HTD). The four most common configurations of a rectangular natural circulation loop were analyzed, differed by the orientation of the heater and the cooler. The simulations were performed in steady state, using a three-dimensional model. The turbulence model chosen was RNG k - ε . The code used was ANSYS Fluent v. 18.2. The natural circulation mass flowrate and the average temperature were analyzed as a function of the heating power for the four loop configurations and for three pressures (8.5 MPa, 9.0 MPa and 9.5 MPa). The results were compared with the empirical correlations of SWAPNALEE *et al.* [1] and YADAV *et al.* [2] in order to verify the simulation. The HTD regime was observed for all the cases studied. It was observed that the increase in pressure delays the beginning of HTD regime and also induces a significant increase in the natural circulation flowrate after the emergence of HTD for all studied cases. In order to investigate the heat transfer of the system, the Nusselt number was analyzed as a function of the Rayleigh number and it was observed that the correlation described by YADAV *et al.* [2] presented good agreement with the results obtained from the simulation. Finally, correlations were proposed for the heat transfer and the Reynolds number, individually for each configuration, and a unified correlation was proposed for the friction factor, for all the cases studied.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xiii
Lista de Símbolos	xiv
Lista de Abreviaturas	xvii
1 Introdução	1
1.1 Reatores Avançados	1
1.2 Reatores Pequenos Modulares	3
1.3 Sistemas Passivos de Remoção de Calor Residual	3
1.4 Utilização de Fluidos Supercríticos no Setor Nuclear	4
1.5 Desafios	7
1.6 Motivação	8
1.7 Objetivo	8
1.8 Organização do Texto	9
2 Revisão Bibliográfica	10
2.1 Fundamentos de Escoamentos Supercríticos	11
2.2 Números Adimensionais Utilizados em Circulação Natural de Fluidos Supercríticos	12
2.3 Considerações acerca da Modelagem de um SCNCL	14
2.4 Estudos sobre SCNCLs Retangulares	16
2.4.1 Estudos Experimentais	16
2.4.2 Estudos Numérico-computacionais	17
3 Metodologia	27
3.1 Problema Físico	27
3.2 Descrição das Equações Governantes	29
3.3 Modelo de Turbulência	30
3.4 Propriedades do CO ₂	32

3.5	ANSYS Fluent	34
3.6	Estudo das Malhas	34
3.7	Discretização das Variáveis	36
3.8	Análise dos Parâmetros de Interesse	36
3.9	Verificação	38
4	Resultados e Discussões	39
4.1	Convergência de Malhas	40
4.2	Verificação	45
4.3	Efeito da Configuração	51
4.4	Efeito da Pressão	55
4.5	Análise do Fator de Atrito	60
4.6	Análise dos Campos de Temperatura e Velocidade	61
4.7	Análise dos Perfis de Velocidade	64
4.8	Análise da Transferência de Calor	69
5	Conclusões e Sugestões	74
5.1	Conclusões	74
5.2	Sugestões para Trabalhos Futuros	76
	Referências Bibliográficas	77
A	Método dos Volumes Finitos	82
A.1	Funções de Forma	83
A.2	Termos Difusivos	84
A.3	Termo advectivo	84
A.4	Estratégia de solução	85

Lista de Figuras

1.1	Gerações dos reatores nucleares de potência.	2
1.2	Reator AP1000 e seu sistema passivo de remoção de calor residual. . .	4
1.3	Diagrama pressão versus temperatura para a água.	5
1.4	Variação das propriedades termofísicas do CO ₂ a 9,0 MPa na vizinhança do ponto pseudo-crítico.	5
1.5	Modelo de um reator a água supercrítica (SCWR).	6
2.1	Propriedades termofísicas do CO ₂ em função da temperatura à diferentes pressões.	12
2.2	Vazão mássica em função da potência de aquecimento em um SCNCL do tipo HHHC [3].	18
2.3	Variação da temperatura e da velocidade em função do tempo para $T_h = 323,15$ K [4].	19
2.4	Variação da temperatura e da velocidade em função do tempo para $T_h = 523$ K [4].	20
2.5	Configurações do circuito estudadas por CHEN <i>et al.</i> [5].	21
2.6	Vazão mássica em função do tempo para diferentes configurações do circuito [5].	22
2.7	Variação da temperatura máxima e da vazão mássica com a potência para diferentes pressões [6].	23
2.8	Variação da temperatura máxima e da vazão mássica com a potência para diferentes temperaturas de resfriamento [6].	24
2.9	Perfis de temperatura do CO ₂ e da água a 8,0 MPa [6].	24
2.10	Vazão mássica e coeficiente de transferência de calor como funções da potência [6].	25
2.11	Vazão mássica como função da potência para $D_i = 4$ mm, 6 mm e 8 mm [6].	25
3.1	Configurações do circuito de circulação natural: (a) HHHC, (b) HHVC, (c) VHHC e (d) VHVC.	28
4.1	Seções retas das malhas criadas.	41

4.2	Temperatura média como função da distância para o circuito HHHC.	42
4.3	Temperatura média como função da distância para o circuito HHVC.	43
4.4	Temperatura média como função da distância para o circuito VHHC.	43
4.5	Temperatura média como função da distância para o circuito VHVC.	44
4.6	Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito HHHC.	45
4.7	Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito HHVC.	46
4.8	Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHHC.	47
4.9	Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHVC.	48
4.10	Correlação proposta para Re em função de Gr_m para o circuito HHHC.	48
4.11	Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito HHVC.	49
4.12	Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHHC.	49
4.13	Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHVC.	50
4.14	Vazão mássica e temperatura como funções da potência a 8,5 MPa.	52
4.15	Vazão mássica e temperatura como funções da potência a 9,0 MPa.	53
4.16	Vazão mássica e temperatura como funções da potência a 9,5 MPa.	54
4.17	Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito HHHC.	56
4.18	Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito HHVC.	57
4.19	Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito VHHC.	58
4.20	Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito VHVC.	59
4.21	Fator de atrito de Darcy como função do número de Reynolds.	60
4.22	Campos de temperatura e velocidade para o circuito HHHC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.	61
4.23	Campos de temperatura e velocidade para o circuito HHVC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.	62

4.24	Campos de temperatura e velocidade para o circuito VHHC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.	63
4.25	Campos de temperatura e velocidade para o circuito VHVC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.	64
4.26	Perfil de velocidade para o circuito HHHC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.	65
4.27	Perfil de velocidade para o circuito HHVC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.	66
4.28	Perfil de velocidade para o circuito VHHC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.	67
4.29	Perfil de velocidade para o circuito VHVC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.	68
4.30	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito HHHC.	69
4.31	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito HHVC.	70
4.32	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito VHHC.	70
4.33	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito VHVC.	71
4.34	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito HHHC.	71
4.35	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito HHVC.	72
4.36	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito VHHC.	72
4.37	Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito VHVC.	73
A.1	Algoritmo de Solução Acoplada.	85

Lista de Tabelas

2.1	Resumo dos principais estudos computacionais do S-CO ₂ em NCLs retangulares	26
3.1	Relação de algumas propriedades termodinâmicas com a energia de Helmholtz ϕ	33
4.1	Parâmetros geométricos utilizados.	39
4.2	Parâmetros das malhas criadas.	40
4.3	Malhas escolhidas por configuração de circuito.	42
4.4	Correlações propostas para o número de Reynolds.	47
4.5	Correlações propostas para o número de Nusselt.	73
A.1	Valor de ϕ de acordo com variável a ser considerada.	82

Lista de Símbolos

A	Área da seção reta, p. 13, 36
C_p	Calor específico à pressão constante, p. 11
D	Diâmetro interno, p. 13
D_i	Diâmetro interno, p. 23
Gr	Número de Grashof, p. 13
Gr_m	Número de Grashof modificado, p. 13
H	Altura do circuito, p. 15
L_H	Comprimento do aquecedor, p. 37
L_{tot}	Comprimento total do circuito, p. 38
Nu	Número de Nusselt, p. 14
P	Pressão total, p. 23
P_c	Pressão crítica, p. 10
Pr	Número de Prandtl, p. 13
R^2	Coefficiente de determinação, p. 69
Ra	Número de Rayleigh, p. 14
Re	Número de Reynolds, p. 12
T	Temperatura, p. 29
T_C	Temperatura do resfriador, p. 23
T_c	Temperatura crítica, p. 10
T_m	Temperatura média, p. 36

T_w	Temperatura da parede, p. 14
T_∞	Temperatura quiescente, p. 14
W	Largura do circuito, p. 15
ΔP	Diferença de pressão, p. 37
α	Difusividade térmica, p. 14
\bar{h}	Coefficiente médio de transferência de calor, p. 14
β	Coefficiente de expansão térmica, p. 13
\dot{Q}	Potência térmica, p. 13
\dot{m}	Vazão mássica, p. 13
ϵ	Taxa de dissipação da energia turbulenta, p. 19
κ	Energia cinética turbulenta, p. 19
μ	Viscosidade dinâmica, p. 13
μ_{eff}	Viscosidade efetiva, p. 30
ν	Viscosidade cinemática, p. 14
ρ	Densidade, p. 13
τ_w	Tensão cisalhante, p. 35
τ_{ji}	tensor das tensões cisalhantes, p. 29
f	Fator de atrito de Darcy, p. 35
g	Aceleração da gravidade, p. 13
h	Coefficiente de transferência de calor, p. 37
h_{tot}	Entalpia total, p. 29
k	Condutividade térmica, p. 14
k_{eff}	Condutividade térmica efetiva, p. 29
t	tempo, p. 18
u	Velocidade, p. 13

u_j	J-ésima componente do vetor velocidade, p. 29
u_∞	Velocidade de corrente livre, p. 35
y^+	Distância adimensional, p. 35
q''_w	Fluxo de calor na parede, p. 27
q''_{tubos}	Fluxo de calor na parede dos tubos, p. 27

Lista de Abreviaturas

AP1000	<i>Advanced Passive Pressurized Water Reactor</i> , p. 3
BWR	Reator a Água Fervente, p. 1
CANDU	<i>Canada Deuterium Uranium</i> , p. 15
Gen III+	Terceira Geração de Reatores Nucleares, p. 2
Gen III	Terceira Geração de Reatores Nucleares, p. 2
Gen II	Segunda Geração de Reatores Nucleares, p. 1
Gen IV	Quarta Geração de Reatores Nucleares, p. 2
Gen I	Primeira Geração de Reatores Nucleares, p. 1
HHHC	Aquecedor horizontal e resfriador horizontal, p. 8
HHVC	Aquecedor horizontal e resfriador vertical, p. 8
HTD	Deterioração da transferência de calor, p. 7
LFR	Reator Rápido Arrefecido a Chumbo, p. 7
LWR	Reator a Água Leve, p. 3
MDF	Método das diferenças finitas, p. 34
MVF	Método dos volumes finitos, p. 34
NCL	Circuito de circulação natural, p. 7
NIST	<i>National Institute of Standards and Technology</i> , p. 32
ONU	Organização das Nações Unidas, p. 1
PISO	<i>Pressure-Implicit with Splitting of Operators</i> , p. 36
PRESTO	<i>Pressure Staggering Option</i> , p. 36

PWR	Reator a Água Pressurizada, p. 1
RANS	<i>Renormalization group</i> , p. 30
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier Stokes</i> , p. 30
S-CO ₂	Dióxido de carbono supercrítico, p. 6
S-H ₂ O	Água supercrítica, p. 6
SCNCL	Circuito de circulação natural supercrítico, p. 7
SCWR	Reator a Água Supercrítica, p. 6
SMR	<i>Small Modular Reactor</i> , p. 3
SUPERSTAR	<i>Sustainable Proliferation-resistance Enhanced Refined Secure Transportable Autonomous Reactor</i> , p. 7
URPC	Unidade de Remoção Passiva de Calor, p. 3
VHHC	Aquecedor vertical e resfriador horizontal, p. 8
VHVC	Aquecedor vertical e resfriador vertical, p. 8

Capítulo 1

Introdução

Segundo a Organização das Nações Unidas (ONU), a população do planeta deve aumentar cerca de 47% até 2100. Este elevado aumento populacional — de cerca de 3,6 bilhões de pessoas — virá acompanhado de uma grande demanda por energia elétrica para suprir as necessidades da ampliação urbana e o aumento da produção industrial.

Considerando a concomitante necessidade de explorar os recursos naturais de maneira sustentável — ou seja, sem comprometer as gerações futuras — tornou-se imprescindível a procura por alternativas à queima de combustíveis fósseis para geração de energia. A maioria das tecnologias limpas de geração de energia, com exceção da nuclear, apresenta uma baixa densidade de potência e uma forte dependência de condições climáticas favoráveis. Este é o caso das fontes solar e eólica.

Tendo em vista este panorama e o presente andamento das pesquisas em tecnologias avançadas, ainda distantes de serem economicamente viáveis, como a fusão nuclear, podemos afirmar que a fissão nuclear será uma tecnologia estratégica nas décadas que se seguem.

Embora a fissão nuclear seja limpa do ponto de vista climático e extremamente confiável do ponto de vista de planejamento, um dos maiores desafios ao seu progresso é a hesitação pública. Ainda que poucos acidentes tenham ocorrido na história, o efeito comportamental negativo gerado por estes é bastante complexo e impossível de ser completamente mensurado. A segurança nuclear é, portanto, um importante pilar do uso da energia atômica e está presente na concepção dos reatores avançados, como veremos mais detalhadamente à seguir.

1.1 Reatores Avançados

Desde a primeira geração de reatores nucleares (Gen I), caracterizados por um patamar baixo de potências, os reatores de fissão evoluíram muito, como pode ser visto na Figura 1.1. Enquanto os reatores da Gen I foram vistos como uma com-

provação da viabilidade tecnológica da fissão, a segunda geração (Gen II) provou que a energia nuclear era economicamente competitiva. Os reatores desta geração se difundiram amplamente ao redor do mundo e operam até hoje. Um enfoque especial é dado aos reatores de água pressurizada (Pressurized Water Reactor - PWR, do inglês) e reatores de água fervente (Boiling Water Reactor - BWR, do inglês), por serem os modelos mais utilizados no mundo [7].

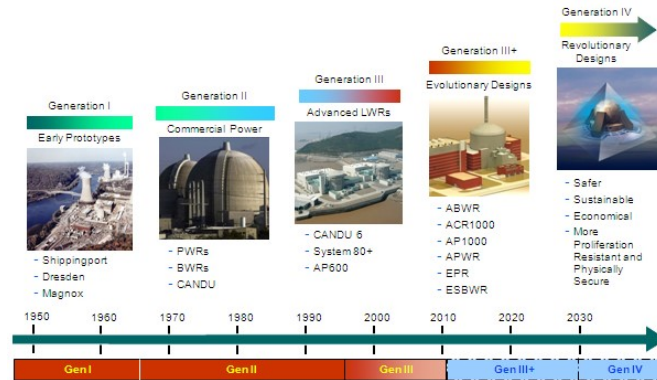


Figura 1.1: Gerações dos reatores nucleares de potência.

Os reatores das gerações que sucedem à Gen II, são denominados reatores avançados. Os reatores da terceira geração (Gen III) são essencialmente versões mais novas dos reatores da Gen II com melhorias nos aspectos: eficiência térmica, construção modular, tecnologia nova de combustíveis e sistemas de segurança mais confiáveis. Os reatores da Gen III foram concebidos para operar por 60 anos, ou seja, 20 anos a mais em comparação à geração anterior [7].

Uma extensão da terceira geração (Gen III+) foi criada trazendo melhorias em segurança aos reatores da Gen III, mais especificamente em sistemas passivos de remoção de calor. Estes sistemas serão comentados mais à frente neste capítulo.

Por fim, a quarta geração de reatores (Gen IV) compreende alternativas nucleares que necessitam de pesquisas adicionais antes de serem totalmente viabilizadas. Os reatores desta geração possuem as mesmas bases conceituais dos reatores de terceira geração, além da capacidade que alguns dos modelos possuem de sustentar a produção de hidrogênio e, possivelmente, a dessalinização da água do mar. Dos oito reatores em desenvolvimento, seis são reatores rápidos e, destes, cinco apresentam ciclo do combustível fechado, isto é, são reatores regeneradores (geram mais combustível físsil do que consomem) e são, por isto, peças-chave para as décadas que se seguem, que serão marcadas pelo esgotamento gradual das reservas de urânio [7].

1.2 Reatores Pequenos Modulares

Os reatores pequenos modulares (Small Modular Reactors - SMR, em inglês) são uma inovação recente e ainda muito discutida em tecnologia de reatores. Estes reatores consistem em módulos, geralmente portáteis, que fornecem até 300 MW de potência elétrica e são ideais para suprir a demanda energética em regiões remotas e pouco povoadas. Os reatores desta categoria possuem, em geral, uma flexibilidade maior de potência quando comparados aos reatores tradicionais de água leve (Light Water Reactors - LWR, em inglês). Os SMR's são colocados abaixo do solo ou cobertos por uma camada de concreto e apresentam ciclos longos de combustível de forma a minimizar o risco de proliferação e vazamento de radiação [8].

O design dos reatores que pertencem a esta categoria pode variar muito - desde uma versão em escala menor de reatores da Gen II, até genuínos reatores conceituais da Gen IV. Outra característica marcante presente nesta categoria de modelos é o funcionamento praticamente autônomo devido ao alto grau de segurança passiva destes reatores. Esta particularidade também contribui para otimização econômica dos SMR's já que o maior obstáculo para a implantação destes é o custo mais elevado da geração de energia em comparação com os reatores tradicionais de maior potência.

1.3 Sistemas Passivos de Remoção de Calor Residual

Como discutido anteriormente, os sistemas passivos de remoção de calor residual — ou seja, em caso de parada do núcleo — estão presentes nos projetos de reatores da Gen III e Gen IV. A maioria destes sistemas faz uso da circulação natural, que consiste no transporte de calor entre uma fonte e um sumidouro através das forças de empuxo induzidas em um fluido devido ao gradiente de temperaturas presente, não necessitando, portanto, da ação de bombas ou compressores.

Requisitos de segurança passiva são importantes por serem capazes de prevenir a ocorrência de acidentes severos, como o de Fukushima em 2011, cuja principal determinante foi a parada do sistema de bombeamento de água em decorrência de uma falha no sistema de abastecimento elétrico local. Com isso, a temperatura do núcleo aumentou fora dos limites de projeto, devido ao acúmulo de calor residual de decaimento, levando o núcleo à fusão.

Um exemplo de aplicação deste tipo de sistema é a Unidade de Remoção Passiva de Calor (URPC) presente no reator AP1000, da Westinghouse. Este reator consiste no design avançado de um PWR com dois loops e potência elétrica de 1.117 MW. A URPC, representada na cor vermelha na Figura 1.2, baseia-se em um circuito de circulação natural que transporta calor desde o núcleo do reator até um tanque de

armazenamento de água. Este sistema possui autonomia de 72 horas de operação após o desligamento do reator [9].

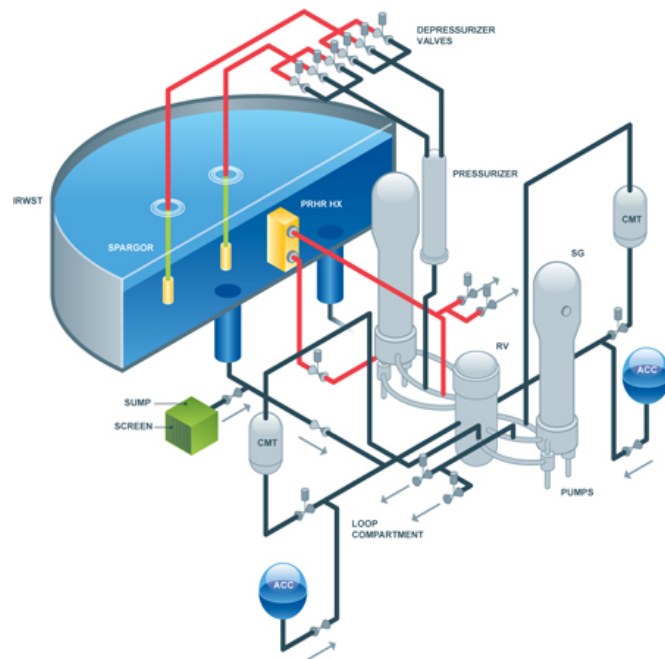


Figura 1.2: Reator AP1000 e seu sistema passivo de remoção de calor residual.

1.4 Utilização de Fluidos Supercríticos no Setor Nuclear

De um ponto de vista termodinâmico, dizemos que um fluido é supercrítico quando este encontra-se à pressão e temperatura acima do ponto crítico. Na Figura 1.3 — que mostra o diagrama de pressão por temperatura para a água — é possível observar esta região supercrítica e também a linha denominada pseudo-crítica, que para fins práticos, é a linha que determina a qual temperatura a variação de propriedades característica da transição supercrítica irá ocorrer para uma pressão diferente da supercrítica. Esta linha divide, portanto, a região supercrítica em duas subregiões: uma que se comporta tal como um líquido (acima desta linha) e a outra que se comporta tal como um gás (abaixo desta linha).

As principais aplicações termo-hidráulicas dos fluidos supercríticos advêm da acentuada variação de suas propriedades na vizinhança do ponto pseudo-crítico. Esta variação é mostrada na Figura 1.4 para o CO_2 a 9,0 MPa. O calor específico experimenta um salto enquanto a densidade, a condutividade térmica e a viscosidade experimentam uma queda acentuada. Isto ocorre devido à mudança do comportamento do fluido no ponto pseudo-crítico.

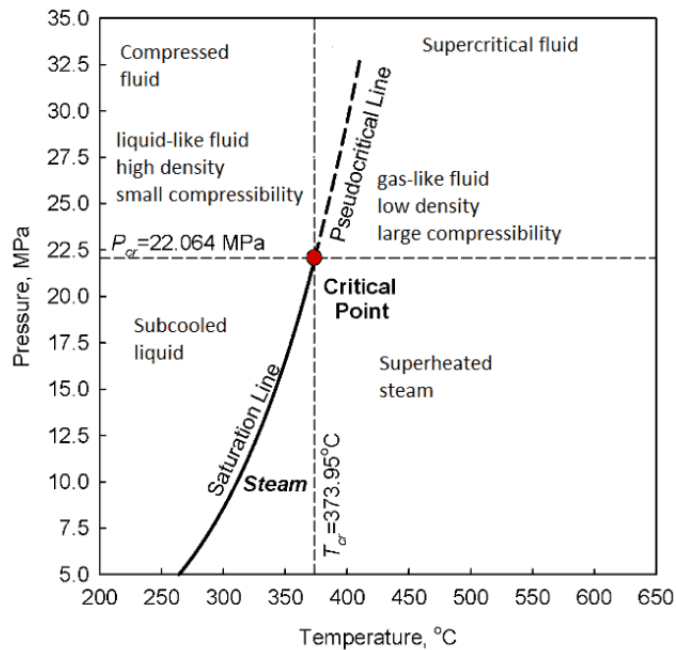


Figura 1.3: Diagrama pressão versus temperatura para a água.

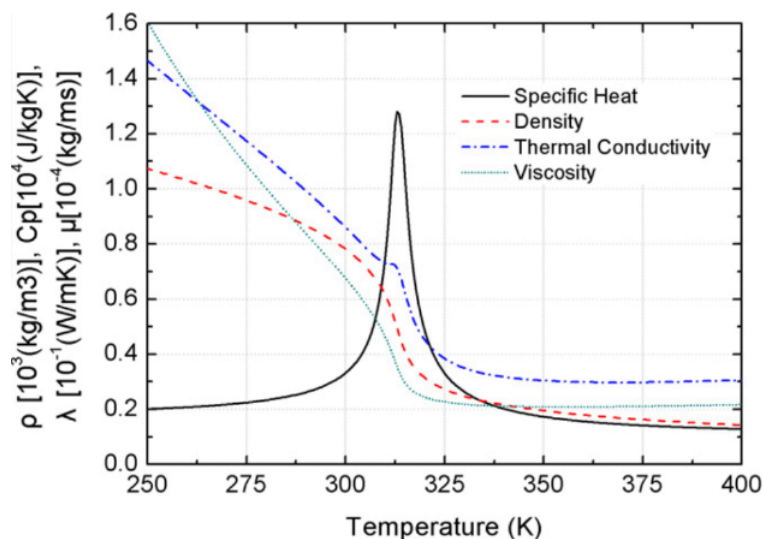


Figura 1.4: Variação das propriedades termodinâmicas do CO_2 a 9,0 MPa na vizinhança do ponto pseudo-crítico.

A principal motivação para a utilização de fluidos supercríticos na indústria nuclear é a otimização da eficiência térmica. Em um ciclo termodinâmico supercrítico, o patamar de temperatura tanto da entrada quanto da saída da turbina é mais elevado e, conseqüentemente, a eficiência é maior, de acordo com a Segunda Lei da Termodinâmica. Fluidos supercríticos apresentam altos valores de capacidade térmica e podem ser expandidos diretamente em turbinas (ciclo de Brayton supercrítico), eliminando a presença de geradores de vapor e pressurizadores. Além disso, no ponto de menor energia do sistema, o fluido supercrítico se comporta tal

como um líquido, apresentando baixo fator de compressibilidade, logo, o trabalho de compressão necessário é bastante reduzido [10].

Um dos reatores avançados da Gen IV é o Reator de Água Supercrítica (Supercritical Water Reactor - SCWR, em inglês). Este reator, que ainda está longe de ser totalmente viabilizado em termos de projeto, apresenta maior eficiência térmica e menor fluxo mássico de refrigerante por unidade de potência do núcleo, quando comparado aos tradicionais LWRs [11]. O esquemático simplificado deste conceito de reator é mostrado na Figura 1.5. O fluido bombeado para o núcleo é aquecido e, em seguida, expandido em uma turbina, gerando energia elétrica. O fluido, no seu ponto de energia mais baixa — isto é, imediatamente antes de adentrar o núcleo — pode ser subcrítico ou então supercrítico. Neste primeiro caso, dizemos que o ciclo termodinâmico é transcrito e no segundo, supercrítico. Entretanto, há divergências entre os autores quanto a esta nomenclatura.

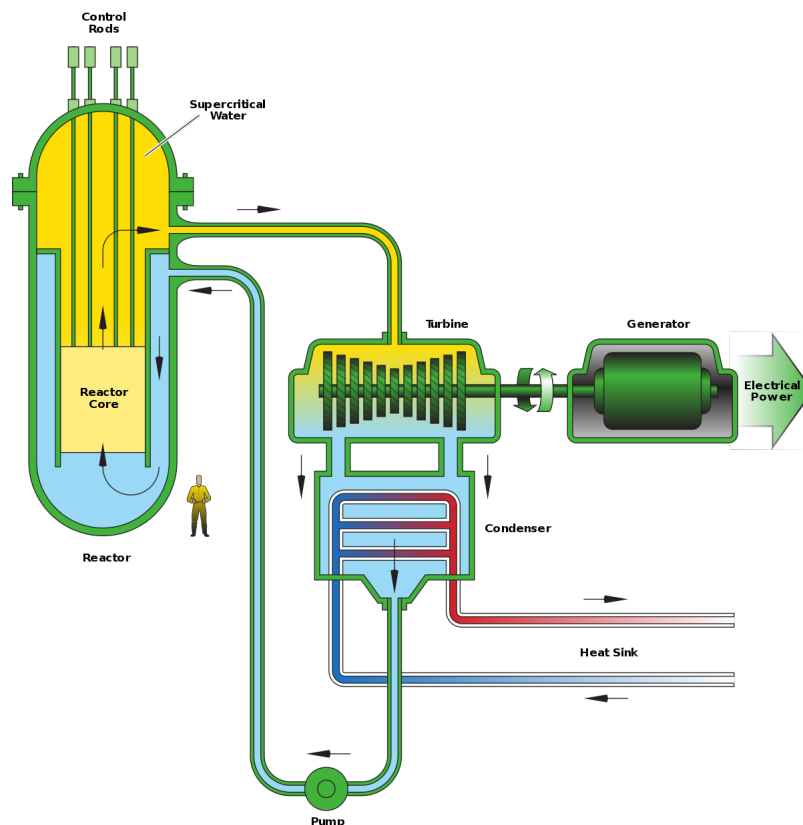


Figura 1.5: Modelo de um reator a água supercrítica (SCWR).

Embora a maioria dos fluidos apresentem um comportamento qualitativamente semelhante quanto às variações de suas propriedades no ponto crítico, alguns fluidos se destacam por apresentarem patamares de pressão e temperatura crítica favoráveis à sua utilização em reatores nucleares. Os fluidos mais estudados em aplicações deste tipo são o dióxido de carbono supercrítico (S-CO₂) e a água supercrítica (S-H₂). O S-CO₂, quando comparado à S-H₂O, apresenta temperatura e pressão críticas mais

baixas. Por este motivo, o S-CO₂ é preferível em alguns casos práticos, entretanto, a escolha do fluido mais adequado para determinado sistema é bastante complexa e depende de uma série de fatores ligados à operação e ao controle do processo.

Além da possibilidade de utilização a altas potências, os sistemas passivos de remoção de calor residual compostos por fluidos supercríticos também apresentam vantagens operacionais em algumas circunstâncias. As grandes variações de densidade experimentadas por um fluido na proximidade do ponto pseudo-crítico são capazes de gerar grande força motriz em um circuito de circulação natural (natural circulation loop - NCL, em inglês), produzindo altas vazões de escoamento e, conseqüentemente, elevadas taxas de transferência de calor.

Além do SCWR, existem alguns reatores modulares de pequeno porte (microreatores), como o SUPERSTAR (Sustainable Proliferation-resistance Enhanced Refined Secure Transportable Autonomous Reactor), que também estão em fase de desenvolvimento, e integram o ciclo de Brayton do S-CO₂, a tecnologia de um reator rápido arrefecido a chumbo (lead-cooled fast reactor - LFR, em inglês) e o conceito de segurança passiva por meio da circulação natural. O SUPERSTAR está sendo desenvolvido pelo Argonne National Laboratory nos Estados Unidos, utiliza S-CO₂ no circuito secundário e apresenta grande nível de autonomia, assim como os demais reatores modulares pequenos e reatores portáteis. O chumbo líquido no sistema primário escoar sem a necessidade de bombas (convecção natural), o ciclo de combustível pode ser projetado para durar até 30 anos. Além disso, o reator apresenta uma razão unitária de produção por consumo de combustível.

1.5 Desafios

Apesar da grande motivação do ponto de vista tecnológico, o projeto de um circuito de circulação natural supercrítico (supercritical natural circulation loop - SCNCL, em inglês) apresenta uma série de limitações. Uma destas consiste na deterioração da transferência de calor (heat transfer deterioration - HTD, em inglês). Este fenômeno ocorre quando a diferença de temperatura do fluido entre as seções de aquecimento e resfriamento não se encontra mais na região de grande expansividade térmica, causando redução das forças de empuxo no circuito. Este fenômeno é caracterizado pela súbita redução do coeficiente de transferência de calor do fluido associada à redução da vazão mássica de escoamento e, conseqüentemente, ao acentuado aumento da temperatura da parede. A HTD ocorre em todo e qualquer SCNCL e deve ser prevista, a fim de ser evitada.

Outro grande desafio relacionado à utilização de SCNCLs é existência de instabilidades dinâmicas, isto é, regiões onde não existem soluções em estado estacionário. Embora as instabilidades possam ser bastante complexas em natureza, para cada

sistema individual, é sempre possível determinar o patamar de estabilidade.

1.6 Motivação

Considerando o contexto descrito, observou-se, na última década em especial, um grande contingente de trabalhos teóricos, experimentais e também computacionais envolvendo SCNCLs, em especial os de geometria retangular - a maioria destes ocupando-se, entretanto, com altos níveis de potência, ou seja, voltados para a segurança passiva de um reator de grande porte. Além disso, a maioria dos trabalhos examina uma única configuração específica de circuito, a saber: (i) aquecedor horizontal e resfriador horizontal (HHHC), (ii) aquecedor horizontal e resfriador vertical (HHVC), (iii) aquecedor vertical e resfriador horizontal (VHHC) ou (iv) aquecedor vertical e resfriador vertical (VHVC). Não foram observados trabalhos que comparam o surgimento do regime de HTD em diferentes configurações de um mesmo SCNCL.

Adicionalmente, observou-se que existem pouquíssimas correlações para a transferência de calor aplicáveis a um SCNCL. Poucos trabalhos abordaram este tema e sabe-se também que a extrapolação das correlações para convecção forçada ou convecção natural externa não fornecem boas aproximações para a transferência de calor em um SCNCL.

1.7 Objetivo

O objetivo geral do presente trabalho é investigar o surgimento do regime de HTD em todas as quatro configurações clássicas de um SCNCL retangular operando em baixo patamar de potência e desenvolver correlações para a transferência de calor para as quatro configurações individuais.

Os objetivos específicos do trabalho são os seguintes:

- Observar o comportamento das variáveis vazão e temperatura em função da potência de aquecimento a fim de identificar o limiar da HTD;
- Comparar a previsão para o número de Reynolds feita através das correlações existentes, com os resultados obtidos pelas simulações.
- Propor correlações para o número de Reynolds para cada uma das quatro configurações individuais do SCNCL estudado.
- Comparar o fator de atrito calculado pela correlação existente na literatura, com os resultados obtidos.

- Desenvolver uma correlação para o fator de atrito válida para uma faixa inferior de número de Reynolds.
- Comparar a extensão da transferência de calor prevista por correlações existentes, com os resultados obtidos pelas simulações,
- Desenvolver correlações para a transferência de calor para cada uma das quatro configurações individuais estudadas.

1.8 Organização do Texto

No capítulo 1, foi apresentada uma introdução ao escopo da pesquisa realizada e também foram apresentados os objetivos gerais e específicos a serem desenvolvidos.

No capítulo 2, será apresentada uma revisão bibliográfica direcionada para o tema da circulação natural do S-CO₂. Neste capítulo serão apresentadas as principais observações e conclusões dos estudos experimentais e numérico-computacionais sobre o tema.

No capítulo 3, será apresentado o problema físico e as metodologias de solução numérica e de análise dos resultados.

No capítulo 4, serão apresentados os resultados das simulações, a verificação dos resultados e a análise da transferência de calor para as diferentes configurações estudadas.

No capítulo 5, serão discutidas as conclusões e apresentadas as sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

A literatura sobre o fenômeno da convecção natural em condutos, isto é, circulação natural, começou a surgir no final dos anos 1950 e reúne hoje um vasto número de estudos teóricos, experimentais e numérico-computacionais. A maior parte desta literatura estuda a água subcrítica como fluido refrigerante, tanto monofásica, como bifásica. Este grande contingente de pesquisas alavancou o desenvolvimento dos sistemas passivos de segurança nuclear existentes.

Nesta última década, entretanto, pôde-se observar um considerável número de estudos publicados em circulação natural de fluidos supercríticos. A maioria destes estudos são de natureza numérico-computacional considerando a dificuldade existente em alcançar o elevado patamar de temperaturas e pressões característico de um fluido supercrítico em laboratório. A água, por exemplo, apresenta temperatura crítica $T_c = 373,95$ °C e pressão crítica $P_c = 22,064$ MPa. Por esta razão, a maioria dos estudos experimentais utiliza o CO₂, cuja condição crítica é mais amena ($T_c = 31,23$ °C e $P_c = 7,39$ MPa).

No que diz respeito ao conteúdo dos estudos em circulação natural de fluidos supercríticos, é possível observar três principais tendências: (i) trabalhos experimentais e numérico-computacionais que estudam a mudança do comportamento termo-hidráulico (principalmente o surgimento da HTD) dos fluidos supercríticos mediante à alteração de variáveis que influenciam o sistema, como diâmetro do tubo, dimensão do circuito, pressão de operação, etc; (ii) trabalhos teóricos que propõem mecanismos que expliquem a dinâmica das instabilidades observadas em determinadas condições de operação; (iii) trabalhos experimentais e numérico-computacionais que buscam determinar o limiar de instabilidade em um SCNCL.

Neste capítulo, será apresentado um resumo dos fundamentos físicos de escoamentos supercríticos necessários para a discussão desenvolvida ao longo desta dissertação. Em seguida serão apresentados os números adimensionais utilizados e considerações sobre SCNCLs presentes na literatura. Após esta introdução, será apresentada uma compilação das principais contribuições dos estudos relevantes acerca

do tema, subdivididos em experimentais e numérico-computacionais.

2.1 Fundamentos de Escoamentos Supercríticos

Dizemos que um fluido é supercrítico quando este se encontra simultaneamente a uma temperatura superior ou igual à temperatura crítica e a uma pressão superior ou igual à pressão crítica. O fluido que se encontra supercrítico apresenta uma única fase, isto é, ao cruzar o ponto crítico, a interface gás-líquido desaparece.

Em um diagrama pressão por temperatura, a região que compreende, simultaneamente, temperaturas superiores à temperatura crítica (T_c) e pressões acima da pressão crítica (P_c), é denominada região supercrítica. Esta região é dividida em duas subregiões por uma linha pseudocrítica. Na subregião superior, o fluido apresenta um comportamento semelhante ao de um líquido (baixa compressibilidade e alto volume específico) enquanto, na subregião inferior, o fluido assemelha-se a um gás (alta compressibilidade e baixo volume específico). Por este motivo, pode-se dizer que existe uma certa semelhança entre a linha pseudocrítica e a linha de saturação, porém no caso dos fluidos supercríticos, não há distinção entre fases.

Ponto pseudocrítico refere-se ao estado termodinâmico descrito pelo par (temperatura, pressão) onde ocorre a transição entre as duas subregiões assinaladas acima. Em outras palavras, a linha pseudocrítica é o conjunto de todos os pontos pseudocríticos existentes.

A variação das propriedades termofísicas de um fluido supercrítico em função da temperatura depende da pressão a qual o fluido se encontra. Na Figura 2.1 são apresentadas as principais propriedades termofísicas do CO_2 em função da temperatura para diferentes pressões. Para a densidade, observa-se que a variação é mais acentuada para pressões mais próximas da pressão crítica. Para pressões mais elevadas, a variação é menos acentuada. Um comportamento semelhante a este pode ser observado para a viscosidade e a condutividade térmica. Por outro lado, o calor específico à pressão constante (C_p) apresenta um comportamento diferente. Na vizinhança do ponto pseudocrítico o calor específico experimenta uma forte ascensão e o valor máximo ocorre neste ponto. O pico do C_p é mais elevado para pressões mais próximas da pressão crítica (RAO *et al.* [12]).

Enquanto a elevação dos valores de C_p próximo do ponto pseudocrítico é a principal vantagem tecnológica que impulsiona a utilização de fluidos supercríticos em sistemas de circulação forçada, para os sistemas de circulação natural, a forte variação da densidade é também um atrativo pois é capaz de gerar uma elevada força de empuxo em arranjos cíclicos, como o circuito de circulação natural.

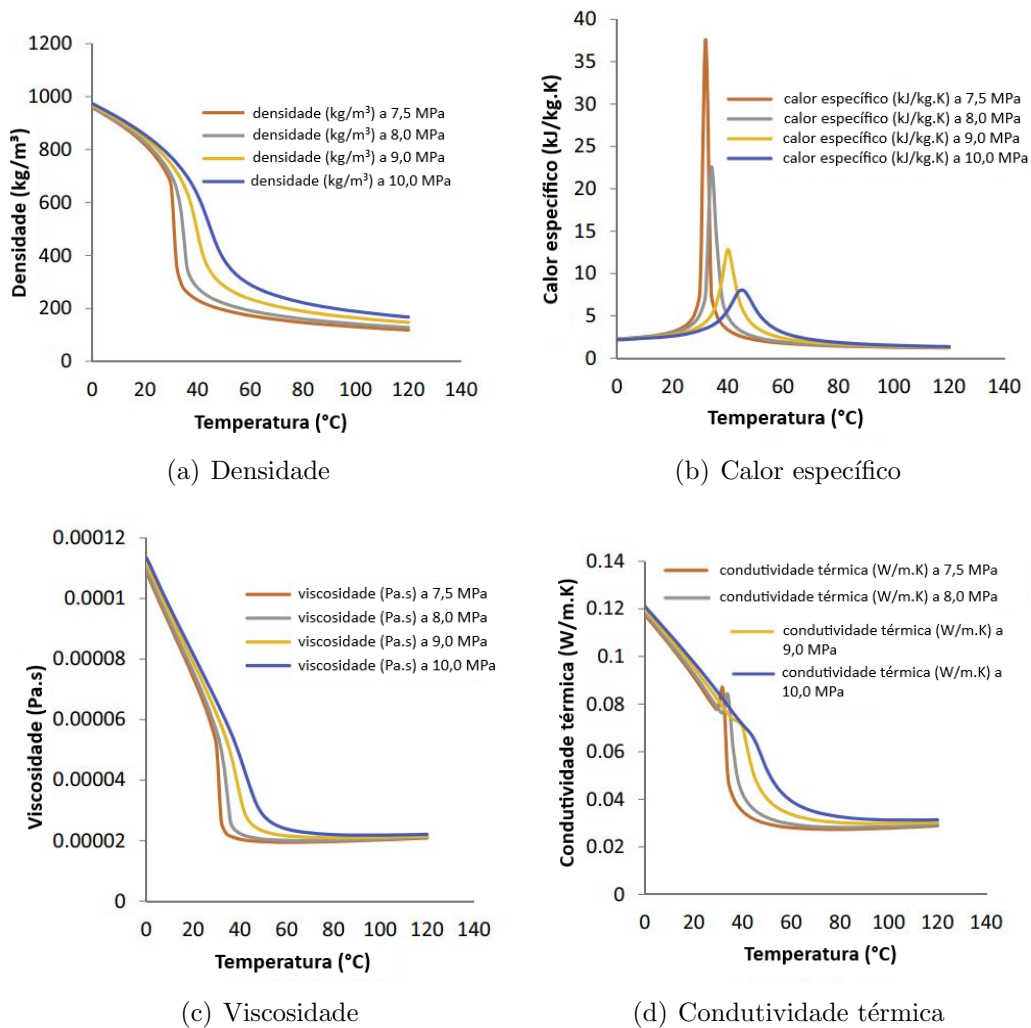


Figura 2.1: Propriedades termofísicas do CO₂ em função da temperatura à diferentes pressões.

2.2 Números Adimensionais Utilizados em Circulação Natural de Fluidos Supercríticos

Em face da complexidade do fenômeno da circulação natural e da limitação dos métodos exclusivamente analíticos em fornecer soluções válidas mesmo em casos simplificados, a utilização de números adimensionais é uma abordagem bastante comum dentro da literatura especializada. Os principais números adimensionais utilizados em circulação natural serão apresentados a seguir:

Número de Reynolds (Re)

O número de Reynolds representa a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas atuando sobre um fluido. Este número adimensional é comumente utilizado para a identificação dos regimes de escoamento. Números de Reynolds altos são

característicos de escoamentos turbulentos, onde as forças de inércia predominam sobre as forças viscosas. Por outro lado quando o número de Reynolds é baixo, caracteriza-se o escoamento laminar, onde as forças viscosas predominam sobre as forças de inércia.

Considerando a geometria utilizada neste trabalho e também em todos os demais citados neste capítulo (tubos circulares), temos a seguinte definição para o número de Reynolds:

$$Re = \frac{\rho u D}{\mu} = \frac{D \dot{m}}{A \mu}, \quad (2.1)$$

onde ρ , u , μ e \dot{m} são, respetivamente, a densidade, a velocidade, a viscosidade dinâmica e a vazão mássica do fluido. D e A são o diâmetro interno e a área da seção reta do tubo, respectivamente.

Número de Grashof (Gr)

O número de Grashof exprime a razão entre as forças de empuxo e as forças viscosas em um fluido. A razão Gr/Re^2 é comumente utilizada para caracterização do regime de convecção do fluido, de acordo com o seguinte critério:

$Gr/Re \gg 1 \rightarrow$ convecção natural

$Gr/Re \approx 1 \rightarrow$ convecção mista

$Gr/Re \ll 1 \rightarrow$ convecção forçada

Enquanto o número de Grashof é usualmente utilizado em análises de circulação natural externa, a opção pelo número de Grashof modificado (Gr_m) para circuitos de circulação natural é praticamente um consenso na literatura. Este número pode ser definido pela seguinte expressão:

$$Gr_m = \frac{g \dot{Q} \beta D^3 \rho^2 H}{A \mu^3 C_p}, \quad (2.2)$$

onde g é a aceleração da gravidade, \dot{Q} é a potência térmica do aquecedor e β é o coeficiente de expansão térmica do fluido.

Número de Prandtl (Pr)

O número de Prandtl expressa a relação entre a difusividade cinemática e a difusividade térmica. Este número depende exclusivamente das características do fluido. Por exemplo, altos números de Prandtl caracterizam um fluido cuja resistência à transferência de calor é grande quando comparada à resistência à transferência de quantidade de movimento. O número de Prandtl é definido da seguinte maneira:

$$Pr = \frac{C_p \mu}{k}, \quad (2.3)$$

onde k é a condutividade térmica do fluido.

Número de Rayleigh (Ra)

O número de Rayleigh é diretamente relacionado a problemas de convecção natural, embora no caso específico da circulação natural em circuitos retangulares, a literatura opte na maior parte dos casos pela utilização do número de Grashof.

O número de Rayleigh possibilita a análise categórica dos diferentes regimes de escoamento e transferência de calor em um sistema, como será visto posteriormente. O número de Rayleigh é definido como o produto do número de Prandtl pelo número de Grashof, como na expressão a seguir:

$$Ra = Pr \cdot Gr = \frac{g \rho \beta (T_w - T_\infty) x^3}{\nu \alpha}, \quad (2.4)$$

sendo ν e α , respectivamente, a viscosidade cinemática e a difusividade térmica do fluido. T_w é a temperatura da parede e T_∞ , a temperatura quiescente, isto é, a temperatura do fluido distante da parede.

Número de Nusselt (Nu)

O número de Nusselt representa a razão entre a transferência de calor convectiva e a transferência de calor condutiva. Este número corresponde à forma adimensional do coeficiente médio de transferência de calor (\bar{h}) e é definido da seguinte maneira:

$$Nu = \frac{\bar{h} D}{k}. \quad (2.5)$$

2.3 Considerações acerca da Modelagem de um SCNCL

É conhecido o fato de que líquidos monofásicos apresentam alta condutividade térmica. Por outro lado, este efeito é contrabalanceado pelas baixas velocidades de escoamento e conseqüentemente menor taxa de troca térmica. Escoamentos bifásicos, por sua vez, apresentam coeficientes de transferência de calor mais elevados, porém apresentam maior grau de complexidade e geralmente demandam recursos adicionais para separação das fases, o que induz ao aumento significativo da queda de pressão e também dos custos de projeto. Fluidos supercríticos apresentam, em geral, coeficientes de transferência de calor mais elevados que os encontrados em escoamentos monofásicos e comparáveis aos encontrados em escoamentos bifásicos. Fluidos supercríticos são, portanto, uma alternativa viável aos refrigerantes tradicio-

nais utilizados no setor nuclear. Entretanto, existem também algumas desvantagens. Enquanto os fluidos bifásicos estão sujeitos ao fenômeno do fluxo de calor crítico, os fluidos supercríticos apresentam o fenômeno da HTD, que é caracterizado pela acentuada queda do coeficiente de transferência de calor. Além disto, os fluidos supercríticos apresentam instabilidades complexas cujo pleno entendimento ainda não é uma realidade (SARKAR *et al.* [13]).

Para o caso específico dos SCNCLs, algumas considerações precisam ser feitas. Primeiramente, devido à acentuada variação das propriedades termofísicas que um fluido experimenta ao cruzar o ponto pseudocrítico, os efeitos dinâmicos normais ao escoamento são consideráveis e geram assimetria axial. No caso de SCNCLs com aquecedores ou resfriadores horizontais, estas assimetrias são mais pronunciadas e, recomenda-se portanto a utilização de modelos tridimensionais. Isto ocorre em virtude da ação combinada da gravidade e do empuxo na seção reta do escoamento (ARCHANA *et al.* [14]).

Outra consideração importante adotada pela maioria dos autores no assunto é a utilização de um modelo de gás real ao invés do modelo Boussinesq, comumente empregado em estudos de convecção natural e circulação natural monofásica. Esta recomendação surge em razão dos efeitos de compressibilidade não desprezíveis que ocorrem no escoamento devido à variação pronunciada da densidade na vizinhança do ponto pseudocrítico.

Dentre outras variáveis externas que afetam o comportamento termo-hidráulico de um SCNCL, as de maior destaque na literatura são as seguintes: ângulo de inclinação do circuito, razão altura por largura (H/W) do circuito, pressão de operação, diâmetro do tubo (além das características do aquecedor e do resfriador, como temperatura ou potência, comprimento ativo, etc).

Tendo em vista as configurações tradicionais de um SCNCL retangular (HHHC, HHVC, VHHC e VHVC), algumas considerações devem ser feitas. A maioria dos reatores existentes no mundo possuem núcleos verticais como é o caso do PWR e BWR. Por este motivo o estudo de SCNCLs com aquecedores verticais são, em geral, capazes de fornecer uma estimativa mais realista para o projeto de uma unidade de remoção passiva de calor. Uma exceção importante são os reatores canadenses à água pesada (Canada Deuterium Uranium - CANDU, do inglês).

É sabido que os SCNCLs do tipo HHHC são os que apresentam a maior vazão mássica de circulação natural para qualquer valor de potência térmica de aquecimento. Entretanto, a configuração HHHC é a mais instável de todas do ponto de vista dinâmico. Por outro lado, os SCNCLs do tipo VHVC apresentam a menor vazão mássica de circulação natural dentre todas as quatro configurações em questão, apesar disso, são a configuração mais estável dentre as demais.

Por fim, espera-se que, devido à forte variação das propriedades do fluido, os es-

quem as de solução que envolvem acoplamento de equações de transporte apresentem uma dificuldade maior em atingir a convergência (BAZARGAN e MOHSENI [15]). Este fato, associado às considerações feitas a respeito do modelo (tridimensional e incompressível), faz com que o tempo computacional necessário para a simulação de um escoamento supercrítico seja relativamente maior em comparação com um escoamento subcrítico sob condições semelhantes.

2.4 Estudos sobre SCNCLs Retangulares

Nesta seção serão abordadas os principais trabalhos sobre a circulação natural do CO₂ supercrítico em circuitos retangulares, subdivididos em experimentais e numérico-computacionais.

2.4.1 Estudos Experimentais

Com o intuito de entender a dinâmica de um SCNCL, CHEN *et al.* [16] montaram um circuito retangular, por onde o CO₂ puro seria carregado a diferentes pressões (6,0 MPa, 6,3 MPa e 7,0 MPa). A potência do aquecedor e a temperatura da água de resfriamento foram mantidas constantes. Os tubos foram isolados termicamente e a temperatura inicial do CO₂ foi de 25 °C. Para as pressões iniciais de 6,0 MPa e 6,3 MPa, o CO₂ manteve-se subcrítico. No caso da pressão igual a 6,0 MPa, a vazão mássica apresentou comportamento oscilatório com reversão de sentido, enquanto, para a pressão inicial de 6,3 MPa, a vazão mássica apresentou oscilações até cerca de 800 s e então atingiu o estado estacionário. Para o caso da pressão inicial de 7,0 MPa, o CO₂ atingiu a zona supercrítica e não apresentou oscilações no fluxo mássico. Os pesquisadores deduziram que o aumento da pressão possui um efeito estabilizador em um NCL subcrítico. Posteriormente, no mesmo ano, os mesmos autores provaram que este efeito estende-se à faixa supercrítica de operação (CHEN *et al.* [17]).

ARCHANA *et al.* [14] estudaram um circuito de circulação natural de CO₂ supercrítico em estado estacionário, utilizando um código desenvolvido pelos próprios autores, e compararam com dados experimentais obtidos para as quatro diferentes configurações do circuito (HHHC, HHVC, VHHC e VHVC). Os autores concluíram que o modelo unidimensional oferece uma estimativa qualitativamente razoável do sistema apenas para valores baixos de potência de aquecimento e à medida que a carga térmica no aquecedor aumenta, a hipótese do escoamento plenamente desenvolvido — que é implícita do modelo unidimensional — torna-se substancialmente defazada. Os autores utilizaram também um modelo bidimensional axi-simétrico e observaram que a aplicação deste modelo se limita à configuração do circuito com

o aquecedor e refrigerador verticais — onde não há variação dos parâmetros do escoamento na direção circunferencial.

SWAPNALEE *et al.* [1] estudaram correlações para o escoamento em NCLs. Os autores construíram um aparato experimental e mostraram que as correlações então existentes não apresentavam boas estimativas para a circulação natural de fluidos supercríticos. Os autores derivaram equações do tipo $Re = f(Gr_m)$, para o estado estacionário, baseados em um fator de atrito experimental. Estas equações apresentaram boas estimativas para as quatro configurações de circuito (HHHC, HHVC, VHHC e VHVC). Além da comparação com os valores do experimento realizado com o CO₂, os autores analisaram resultados experimentais obtidos por outros pesquisadores utilizando outros fluidos supercríticos e concluíram que as equações apresentaram boas previsões em todos os casos apresentados. Atualmente, estas equações são utilizadas pela grande maioria dos pesquisadores para verificar os resultados de seus trabalhos numéricos e computacionais envolvendo SCNCLs retangulares.

2.4.2 Estudos Numérico-computacionais

Em 2005, CHATOORGOON *et al.* [3] encontraram uma relação entre a potência de aquecimento e a estabilidade em um SCNCL do tipo HHHC à 90°. Os pesquisadores utilizaram um código próprio e implementaram um modelo unidimensional transiente para obter a curva de estabilidade do circuito (Figura 2.2). Nesta figura, pode-se notar que existem três zonas de operação observadas: zona estável, zona de transição e zona instável. Pode-se observar também que, para uma determinada pressão, o incremento de potência causa uma transição no sentido da região instável e a transição entre as zonas instável e estável corresponde ao pico da vazão mássica de circulação natural.

CHEN e ZHANG [18] simularam um SCNCL do tipo HHHC à 90°, utilizando um modelo bidimensional transiente. Neste estudo, as condições de contorno térmicas utilizadas foram: (i) temperatura fixa no resfriador (298 K), (ii) temperaturas fixas no aquecedor (343 K, 523 K, 823 K e 1023 K) e (iii) tubos adiabáticos. Os autores obtiveram números de Reynolds da ordem de 10⁵, que são inerentes à circulação do S-CO₂ e raramente são observados em outros fluidos sob condições de circulação natural. Os autores analisaram diâmetros diferentes e observaram que para tubos com diâmetros menores, a velocidade oscila periodicamente entre valores positivos e negativos para todas as temperaturas do aquecedor abaixo da “segunda temperatura crítica” do CO₂, que consiste na temperatura acima da temperatura pseudo-crítica, onde as propriedades voltam a variar linearmente com a temperatura. A saber, esta temperatura é de aproximadamente 375 K para o CO₂. Quando a temperatura no aquecedor atinge a segunda temperatura crítica, a velocidade do fluido oscila inici-

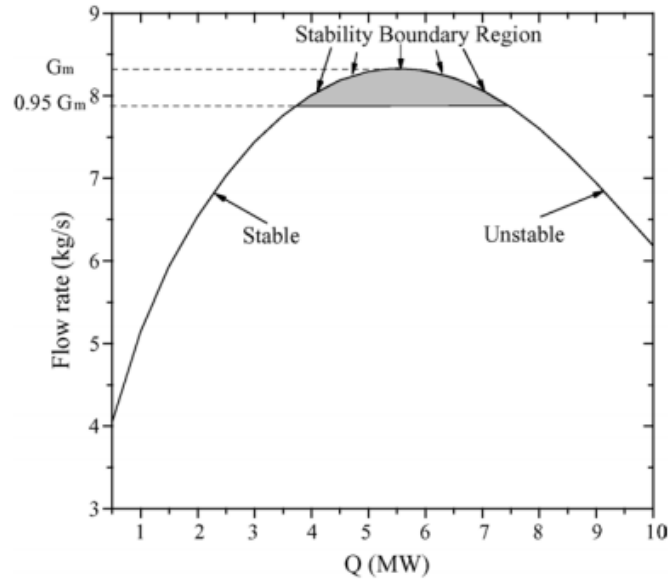


Figura 2.2: Vazão mássica em função da potência de aquecimento em um SCNCL do tipo HHHC [3].

almente, mas converge para um valor de equilíbrio no estado estacionário e o fluido apresenta o padrão unidirecional de escoamento. Para tubos com diâmetros maiores, todos os escoamentos são unidirecionais, independentemente da temperatura do aquecedor. Outro fenômeno que pôde ser observado neste estudo é que em tubos com maior diâmetro, a espessura da camada limite é menor. Conseqüentemente, os gradientes são maiores para os diâmetros maiores e o mesmo ocorre com os números de Nusselt. Por fim, observou-se também que a transferência de calor tende a diminuir com o aumento da temperatura do aquecedor e tubos com maior diâmetro apresentam transferência de calor muito maior.

Posteriormente, os mesmos autores (CHEN *et al.* [4]) realizam uma análise conservando o circuito e o modelo anteriores, porém com as seguintes condições de contorno: (i) temperatura fixa no resfriador (298,15 K), (ii) temperaturas fixas no aquecedor (323,15 K e 523 K) e (iii) tubos adiabáticos. Para temperatura do aquecedor igual a 323,15 K, observou-se um regime oscilatório periódico. Como pode ser visto na Figura 2.3, a velocidade medida na seção transversal do ponto médio do aquecedor oscila entre valores negativos e positivos, isto é, apresenta reversão periódica de sentido, enquanto a temperatura média medida na mesma seção oscila com amplitude maior logo após o instante $t = 0$ e depois passa a oscilar com amplitude menor em torno de uma média próxima de 308 K. Por outro lado, quando eleva-se a temperatura do aquecedor para 523 K, observa-se um comportamento diferente, como mostrado na Figura 2.4. A velocidade oscila entre valores negativos e positivos com amplitude grande, porém, decrescente, e depois ocorre uma transição e o escoamento torna-se unidirecional e oscila com amplitude baixa. Segundo os pes-

quisadores, esta transição ocorre quando a temperatura média do CO₂ no circuito ultrapassa a segunda temperatura crítica.

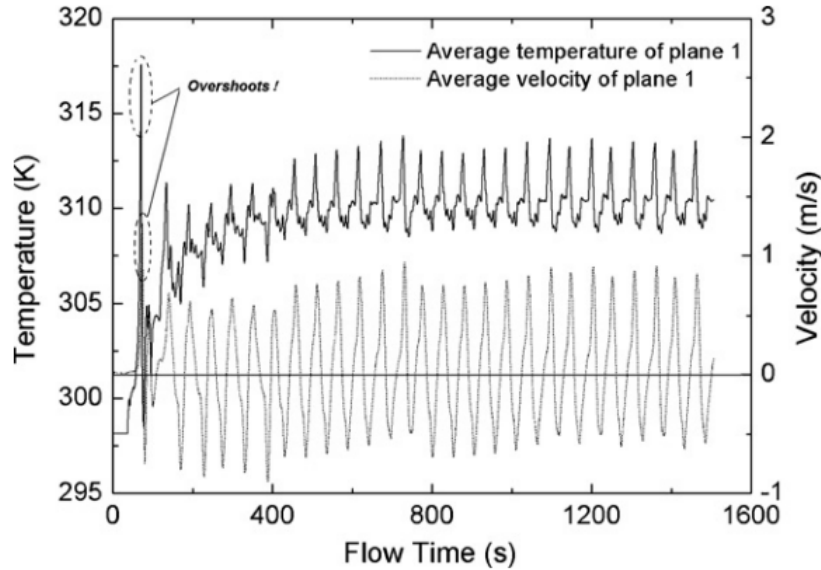
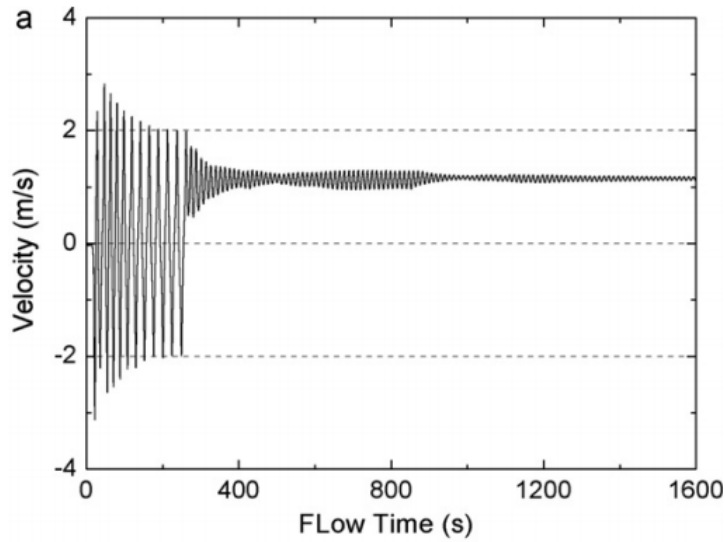


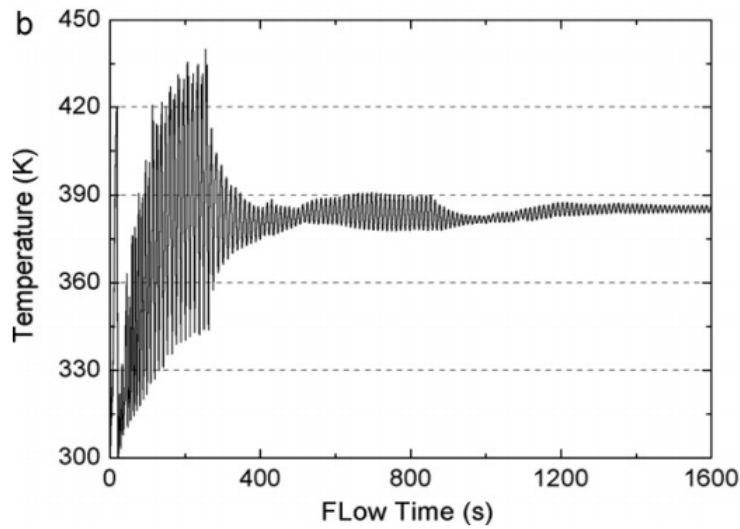
Figura 2.3: Variação da temperatura e da velocidade em função do tempo para $T_h = 323,15$ K [4].

CHEN *et al.* [5] estudaram o efeito das diferentes orientações do aquecedor em um NCL, utilizando um modelo transiente, bidimensional com simetria axial. Quatro configurações foram estudadas e são representadas na Figura 2.5. A temperatura da parede do resfriador foi mantida constante e igual a 298 K. Três diferentes valores de fluxo de calor na parede do aquecedor foram analisados (600 W/m², 6.000 W/m² e 60.000 W/m²). A tendência observada pelos pesquisadores foi a de maior estabilidade nos circuitos com aquecedores verticais (atingiram estado estacionário para todos os valores de fluxo térmico), enquanto os circuitos com aquecedores horizontais apresentaram oscilações na vazão mássica. O efeito do fluxo térmico observado que mais se destacou foi a frequência da oscilação: quanto maior o fluxo térmico, maior é a frequência das oscilações. Observou-se que, para o fluxo de 60.000 W/m², os circuitos com aquecedores horizontais apresentaram escoamento unidirecional oscilatório e, para os demais valores de fluxo, o escoamento oscila com reversão de direção. Na Figura 2.6 é possível observar o comportamento da vazão mássica em função do tempo para as quatro configurações estudadas.

A seguir, serão comentados os trabalhos de um grupo de pesquisadores que estudou à fundo a termo-hidráulica de um SCNCL do tipo HHHC dentro da zona de estabilidade, mais especificamente, em regime convectivo estacionário. Estes autores utilizaram o mesmo software (ANSYS Fluent) e o mesmo modelo em todos os seus trabalhos (tridimensional, estacionário, fluido compressível e modelo de turbulência RNG $\kappa - \epsilon$).



(a) Variação da velocidade



(b) Variação da temperatura

Figura 2.4: Variação da temperatura e da velocidade em função do tempo para $T_h = 523$ K [4].

SARKAR e BASU [6] estudaram três fluidos diferentes em um NCL do tipo HHHC: CO_2 supercrítico, água líquida monofásica e R134a. O efeito da pressão de operação, da temperatura do refrigerante e da potência de aquecimento foram estudados. Os autores observaram que a vazão mássica do sistema aumenta à medida que aumenta a potência do aquecedor até o ponto onde a temperatura mínima do sistema torna-se maior do que a temperatura pseudo-crítica. A partir deste ponto, o incremento adicional da carga térmica no aquecedor provoca uma queda da vazão mássica do sistema, ocasionando um rápido aumento na temperatura da parede, caracterizando o regime de HTD. Uma observação importante presente neste estudo é que o aumento da vazão mássica no sistema ocorre somente quando o fluido cruza o

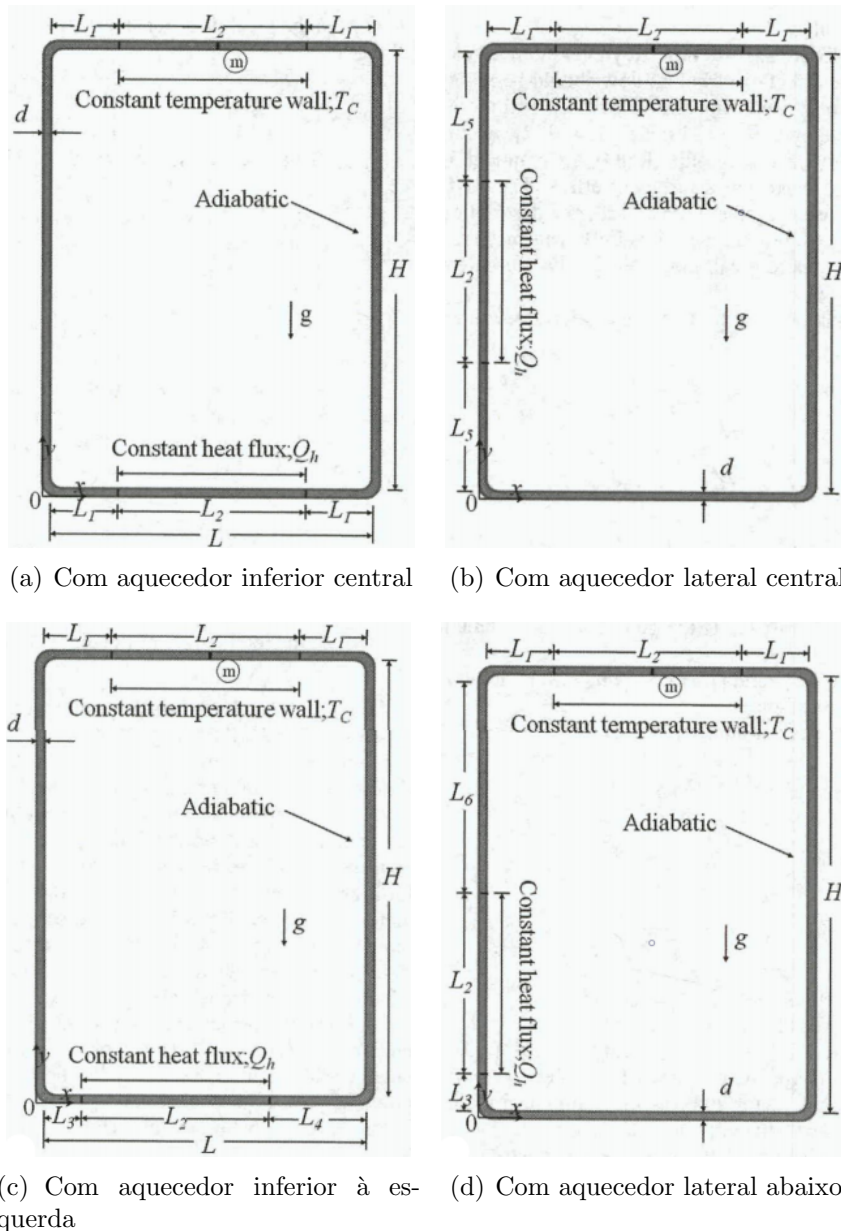


Figura 2.5: Configurações do circuito estudadas por CHEN *et al.* [5].

ponto pseudo-crítico em sua passagem pelo aquecedor. Isto se deve ao elevado gradiente de densidade gerado entre aquecedor (supercrítico) e resfriador (subcrítico). Outra observação importante é que o regime de deterioração da transferência de calor pode ser postergado pela diminuição da temperatura do sumidouro de calor e pelo aumento da pressão do sistema, expandindo assim, a zona de operação do NCL, aumentando a vazão de circulação e, conseqüentemente, otimizando a transferência de calor do sistema. Na Figura 2.7 pode-se notar o efeito da pressão de operação para o caso onde a temperatura do resfriador é constante e igual a 305 K. Já na Figura 2.8, o efeito da temperatura do resfriador pode ser observado, considerando o caso onde a pressão é constante e igual a 8 MPa. No que diz respeito

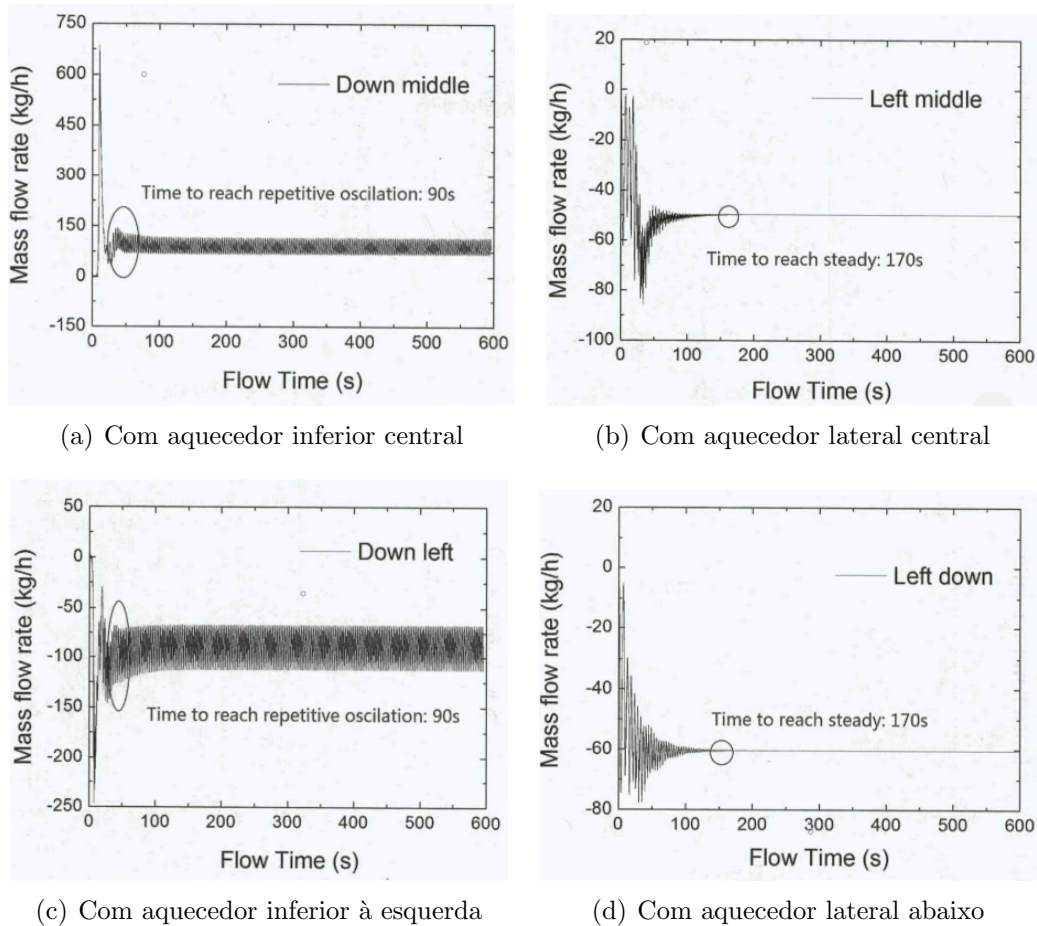
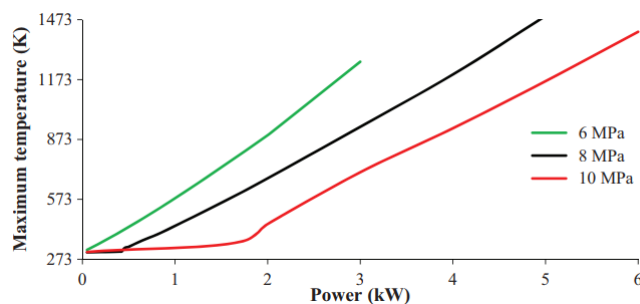


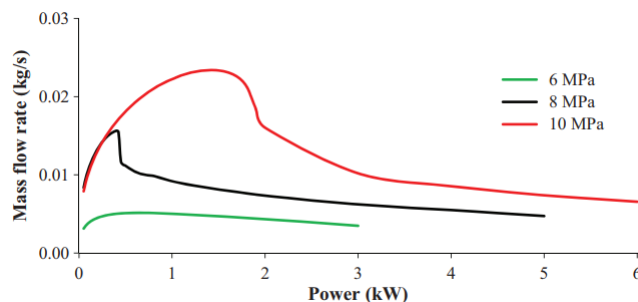
Figura 2.6: Vazão mássica em função do tempo para diferentes configurações do circuito [5].

à comparação entre os fluidos refrigerantes, o inventário de massa e o patamar de temperatura atingido pelo S-CO₂ foram mais baixos comparado aos demais, porém somente antes do início do regime de HTD.

No artigo SARKAR e BASU [19], os autores basicamente estenderam a análise do artigo anterior, utilizando os mesmos fluidos e o mesmo problema físico, exceto pela condição de aquecimento, uma vez que, neste caso, foi adotada uma temperatura constante na parede do aquecedor. Os pesquisadores discutiram a magnitude da velocidade do escoamento em função da pressão de operação e da temperatura de aquecimento. A tendência geral observada foi que maiores pressões e temperaturas de aquecimento induzem maiores velocidades e temperaturas. Ao comparar o CO₂ supercrítico com a água, os autores analisaram as seções retas do escoamento no ponto médio do aquecedor e notaram que o CO₂ apresenta uma assimetria axial mais pronunciada. Esta particularidade estende-se a todos os fluidos que se encontram próximos do ponto pseudo-crítico e deve-se ao gradiente de densidades na seção reta. A Figura 2.9 apresenta a comparação do perfil de temperaturas da água subcrítica e do CO₂ supercrítico, ambos à pressão de 8,0 MPa e submetidos às



(a) Variação da temperatura máxima com a potência para diferentes pressões



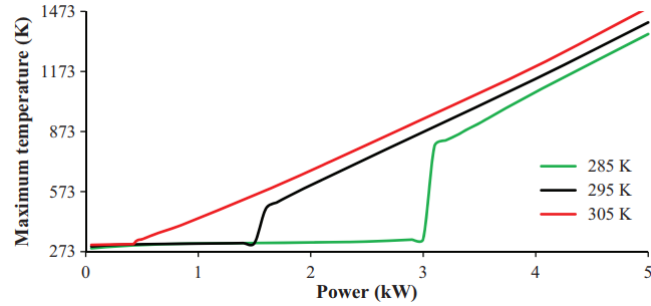
(b) Variação da vazão mássica com a potência para diferentes pressões

Figura 2.7: Variação da temperatura máxima e da vazão mássica com a potência para diferentes pressões [6].

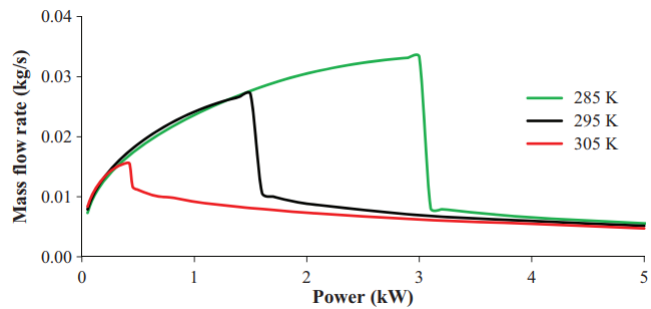
mesmas temperaturas de resfriamento (315 K) e aquecimento (371 K).

SARKAR e BASU [20] estudaram a influência de parâmetros geométricos sobre o comportamento termo-hidráulico do mesmo sistema citado anteriormente, só que desta vez, os autores se restringiram à análise do CO_2 . Neste trabalho foi analisada a relação entre o coeficiente de transferência de calor e a potência de aquecimento. Observou-se que a transferência de calor apresenta um pico justamente na iminência do regime de HTD e experimenta uma queda súbita logo após, como pode ser visto na Figura 2.10. O efeito do diâmetro do tubo pode ser visto na Figura 2.11 e, para as condições do estudo (HHHC, $P = 8,0$ MPa e $T_C = 395$ K), o aumento do diâmetro causa um aumento da vazão mássica de circulação natural, inclusive no regime de HTD. No que diz respeito à altura H do circuito pôde-se observar que o aumento de H causa um modesto aumento na vazão de circulação natural e no coeficiente de transferência de calor. Já a largura W do circuito tem o efeito oposto: quanto maior W , menor é a circulação natural.

Como foi mencionado na introdução, o fenômeno da circulação natural supercrítica carece de correlações empíricas. Isto levou YADAV *et al.* [2] a criarem correlações específica para o CO_2 . Eles derivaram correlação para Re e Nu dos resultados numéricos provenientes de um modelo tridimensional estacionário aplicado a um NCL retangular do tipo HHHC. A correlação para transferência de calor é tal-

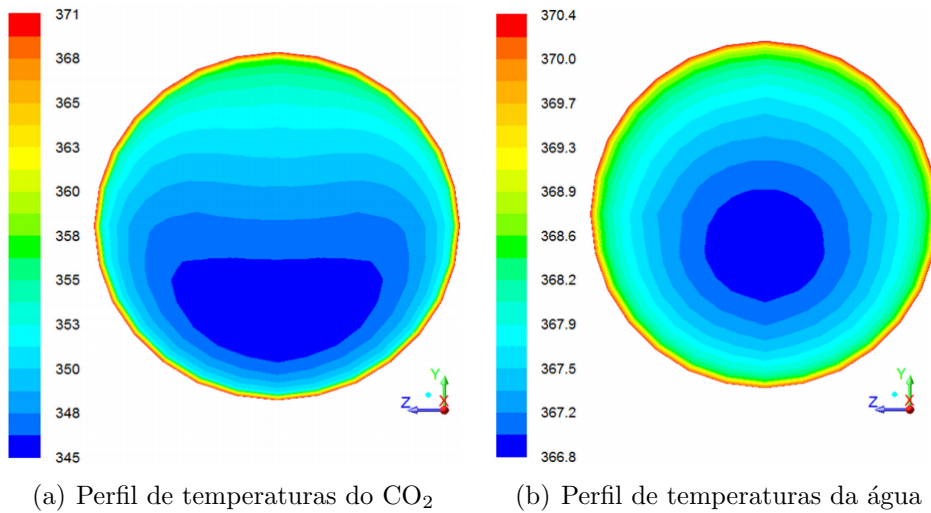


(a) Variação da temperatura máxima com a potência para diferentes temperaturas de resfriamento



(b) Variação da vazão mássica com a potência para diferentes temperaturas de resfriamento

Figura 2.8: Variação da temperatura máxima e da vazão mássica com a potência para diferentes temperaturas de resfriamento [6].



(a) Perfil de temperaturas do CO₂

(b) Perfil de temperaturas da água

Figura 2.9: Perfis de temperatura do CO₂ e da água a 8,0 MPa [6].

vez a única presente na literatura destinada, exclusivamente, ao sistema investigado nesta dissertação e a correlação para o número de Reynolds apresentou na análise dos autores em questão, uma previsão melhor do que a de SWAPNALEE *et al.* [1].

A Tabela 2.1 resume os principais estudos numérico-computacionais envolvendo a circulação natural do CO₂ supercrítico em NCLs retangulares. Pode-se observar que

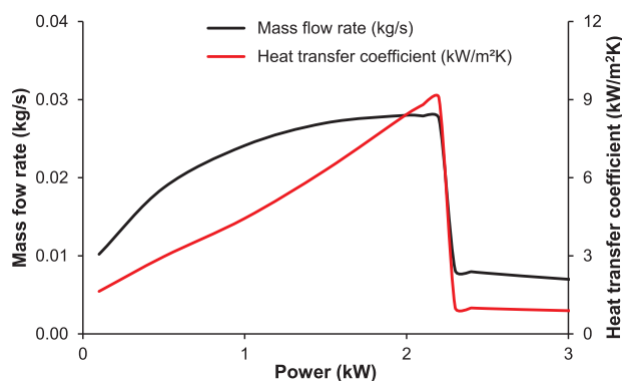


Figura 2.10: Vazão mássica e coeficiente de transferência de calor como funções da potência [6].

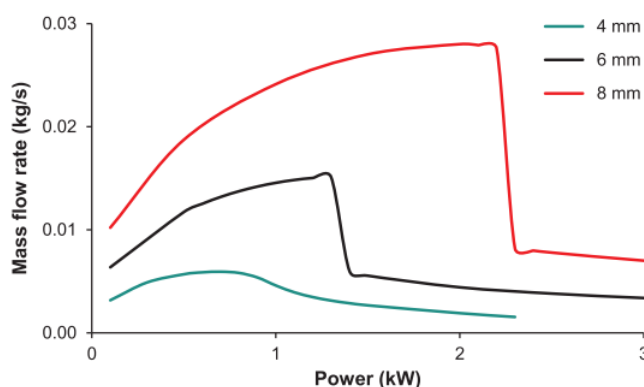


Figura 2.11: Vazão mássica como função da potência para $D_i = 4$ mm, 6 mm e 8 mm [6].

o modelo de turbulência mais utilizado na literatura é o RNG $\kappa - \epsilon$ e a configuração mais estudada é o circuito HHC. Outra tendência observada é que, na maioria das vezes, modelos unidimensionais foram utilizados para análises de estabilidade em regime transiente. Embora seja amplamente discutido que os modelos unidimensionais não apresentam boa concordância com resultados experimentais para a circulação natural de fluidos supercríticos — especialmente no caso onde os aquecedores e resfriadores estão na posição horizontal —, o uso destes modelos justifica-se pelo elevado tempo computacional necessário para a simulação de um modelo transiente bi ou tridimensional. Modelos unidimensionais assumem propriedades constantes na seção reta do escoamento e, devido à acentuada assimetria axial característica dos fluidos supercríticos, esta hipótese acaba por agregar um erro numérico substancial. Além disto, modelos unidimensionais, via de regra, utilizam correlações empíricas e, por este motivo, não utilizam modelos de turbulência, como pode ser percebido também na Tabela 2.1.

O presente trabalho visa cobrir a lacuna que consiste na inexistência de um estudo comparativo entre as diferentes configurações de circuito utilizando um modelo

Tabela 2.1: Resumo dos principais estudos computacionais do S-CO₂ em NCLs retangulares

Estudo	Circuitos estudados	Modelo	Modelo de turbulência
ARCHANA <i>et al.</i> [14]	HHHC, HHVC, VHHC e VHVC	estacionário, 1D e 2D	$\kappa - \epsilon$ padrão
ARCHANA <i>et al.</i> [21]	HHHC, HHVC, VHHC e VHVC	transiente, 1D	não utiliza
BASU <i>et al.</i> [22]	HHHC	transiente, 1D	não utiliza
CHEN e ZHANG [18]	HHHC	transiente, 2D	RNG $\kappa - \epsilon$
CHEN <i>et al.</i> [23]	HHHC	transiente, 2D	RNG $\kappa - \epsilon$
CHEN <i>et al.</i> [5]	HHHC e VHHC	transiente, 2D	RNG $\kappa - \epsilon$
CHEN <i>et al.</i> [24]	HHHC	transiente, 2D	RNG $\kappa - \epsilon$
CHEN <i>et al.</i> [4]	HHHC	transiente, 2D	RNG $\kappa - \epsilon$
JAIN e RIZWAN-UDDIN [11]	HHHC	transiente, 1D	não utiliza
KUMAR e GOPAL [25]	HHHC	estacionário, 1D	não utiliza
KUMAR e GOPAL [26]	HHHC	estacionário, 1D	não utiliza
SARKAR e BASU [6]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
SARKAR e BASU [19]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
SARKAR e BASU [27]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
SARKAR e BASU [20]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
SHARMA <i>et al.</i> [28]	HHHC	transiente, 1D	não utiliza
YADAV <i>et al.</i> [29]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
YADAV <i>et al.</i> [30]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
YADAV <i>et al.</i> [2]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
YADAV <i>et al.</i> [31]	HHHC	estacionário, 3D	RNG $\kappa - \epsilon$
ZHANG <i>et al.</i> [32]	HHHC	transiente, 2D	RNG $\kappa - \epsilon$

tridimensional. Considerando que a maioria dos pesquisadores se dedicaram exclusivamente à análise da configuração HHHC — por ser a que apresenta maior vazão de circulação natural — uma outra lacuna consiste na carência de estudos que considerem as demais configurações possíveis para o circuito, uma vez que estas podem ser interessantes considerando-se as especificidades do reator ao qual destina-se o sistema de circulação natural. Este trabalho também visa estudar a descrição do escoamento e da transferência de calor por meio de correlações existentes na literatura, tipicamente desenvolvidas para o circuito HHHC, e observar se estas se aplicam às demais configurações.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo, serão apresentados o problema físico e a metodologia utilizada para a solução deste. Logo no início será descrito o problema físico e suas respectivas condições de contorno. Em seguida, serão apresentadas as equações que governam a dinâmica e a energia dos fluidos, que sustentam a análise fluidodinâmica computacional. De forma a complementar estas equações, serão apresentadas as formulações do modelo de turbulência utilizado e do modelo de gás real. Serão abordadas, logo após, as considerações computacionais admitidas, mais especificamente: o software utilizado, a metodologia de criação das geometrias e das malhas, a discretização das variáveis, e, por fim, o método de análise dos resultados e da verificação.

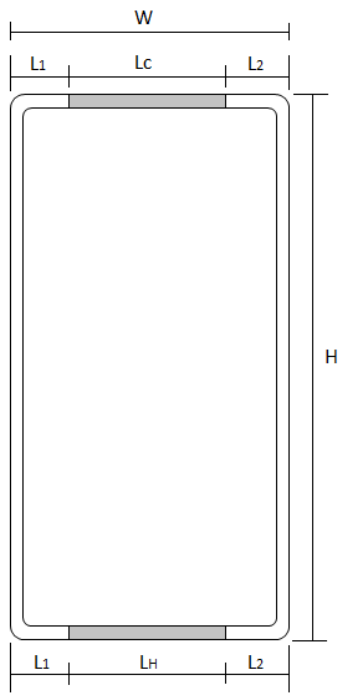
3.1 Problema Físico

O problema físico estudado consiste em quatro circuitos de circulação natural retangulares com dimensões iguais, cuja única distinção entre eles consiste na posição dos aquecedores e resfriadores, caracterizando, assim, as quatro configurações mencionadas nos capítulos anteriores para um mesmo circuito: HHHC, HHVC, VHHC e VHVC.

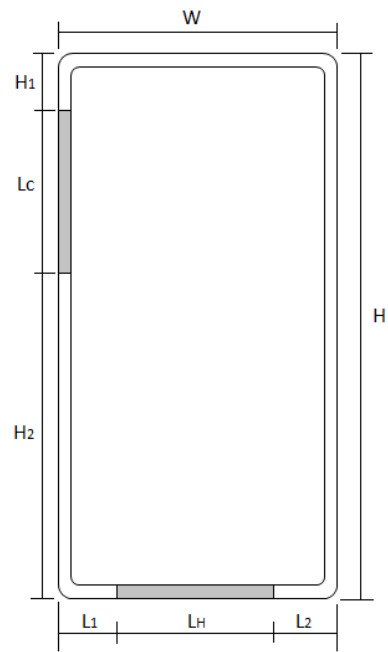
As quatro geometrias do problema físico são ilustradas na Figura 3.1, com suas respectivas dimensões físicas assinaladas. As regiões em cinza correspondem às seções de aquecimento e resfriamento, enquanto as regiões em branco correspondem aos tubos.

Os tubos, aquecedores e resfriadores são constituídos de aço inoxidável e possuem diâmetro interno D_i . Os cotovelos do circuito descrevem uma curva cujo diâmetro interno equivale a $D_i/2$.

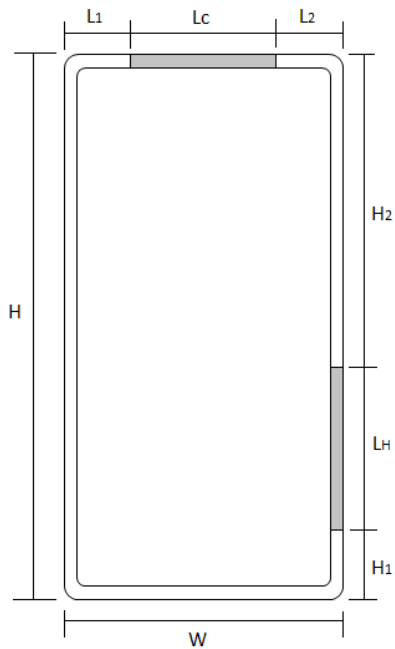
Os circuitos se encontram perpendiculares à linha horizontal do solo e no interior destes encontra-se o CO_2 puro a uma determinada pressão (foram estudadas três pressões diferentes). As condições de contorno adotadas foram:



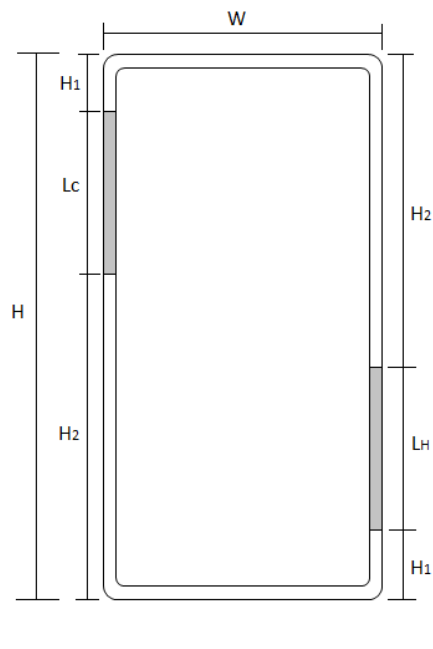
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3.1: Configurações do circuito de circulação natural: (a) HHHC, (b) HHVC, (c) VHHC e (d) VHVC.

- fluxo térmico constante na parede do aquecedor ($q_w'' = cte$);
- temperatura constante na parede do resfriador ($T_c = cte$);
- tubos adiabáticos ($q_{tubos}'' = 0$);
- velocidade nula em todas as superfícies sólidas.

3.2 Descrição das Equações Governantes

Nesta seção, serão apresentadas as equações que fundamentam a dinâmica dos fluidos, baseadas na descrição feita por TODREAS e KAZIMI [33]. Por razões mencionadas no capítulo anterior, optou-se pela utilização de um modelo estacionário tridimensional. As equações que serão apresentadas a seguir neste capítulo estão ajustadas à este modelo, além de considerar o fluido como compressível.

As três equações de conservação fundamentais da fluidodinâmica, na forma diferencial e representadas através da notação tensorial utilizada por ANSYS [34], são as seguintes:

- Equação da conservação da massa:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (3.1)$$

onde u_j representa a j -ésima componente do vetor velocidade.

- Equação da conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + \rho g_i, \quad (3.2)$$

onde P , g e τ_{ji} representam, respectivamente, a pressão, a aceleração da gravidade e o tensor das tensões cisalhantes atuantes no fluido.

- Equação da conservação da energia:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h_{tot}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_j \tau_{ji} \right), \quad (3.3)$$

onde T é a temperatura, k_{eff} representa a condutividade térmica efetiva e h_{tot} descreve a entalpia total, definida pela seguinte equação:

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2} u_i^2. \quad (3.4)$$

3.3 Modelo de Turbulência

No que diz respeito ao fechamento da turbulência em um sistema de equações, como as apresentadas na seção anterior, existe uma gama variada de modelos disponíveis, variando em complexidade e especificidades, isto é, adaptando-se melhor ou pior a um determinado sistema em vista de suas particularidades.

Uma classe de modelos muito comum na literatura é a classe dos modelos baseados nas médias de Reynolds (Reynolds Averaged Navier Stokes - RANS, do inglês). Estes modelos visam promover o fechamento da turbulência através da introdução das tensões de Reynolds na equação da conservação da quantidade de movimento. Dentro desta classe, os modelos mais conhecidos são os modelos $k - \epsilon$ e $k - \omega$. Estes modelos de duas equações são muito utilizados em CFD por serem robustos, isto é, aplicáveis na maior parte dos problemas de engenharia e, ao mesmo tempo, simples do ponto de vista computacional.

Como foi discutido no capítulo anterior, os modelos da família $k - \epsilon$ têm sido capazes de fornecer bons resultados para os problemas de circulação natural de fluidos supercríticos e, por esta razão, optou-se pela utilização do modelo de turbulência RNG $k - \epsilon$. Este modelo consiste em um aperfeiçoamento do modelo $k - \epsilon$ padrão e utiliza a teoria estatística do grupo de renormalização (renormalization group - RNG, do inglês) para levar em consideração a contribuição do movimento em menores escalas de turbilhonamento.

Na Equação 3.2, o tensor τ_{ji} é definido como:

$$\tau_{ji} = \mu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right), \quad (3.5)$$

onde o termo μ_{eff} é a viscosidade efetiva, que, por sua vez, é definida por:

$$\mu_{eff} = \mu + C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\epsilon}, \quad (3.6)$$

onde C_μ é uma constante.

As variáveis k e ϵ são obtidas, respectivamente, através das Equações 3.7 e 3.8 do modelo RNG $k - \epsilon$, apresentadas da maneira como foram implementadas no código do software utilizado [34]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\kappa) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\kappa u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_\kappa \mu_{eff} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right) + G_\kappa + G_b - \rho\epsilon - Y_M + S_\kappa, \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_\epsilon \mu_{eff} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} (G_\kappa + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{\kappa} - R_\epsilon + S_\epsilon, \quad (3.8)$$

onde o termo G_κ representa a geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média e é definido pela Equação 3.9. O termo Y_M é desprezível para escoamentos com baixos números de Mach, como é o caso deste trabalho. Os termos α_κ e α_ϵ são os números de Prandtl efetivos inversos para κ e ϵ , respectivamente. S_κ e S_ϵ são termos fonte fornecidos pelo usuário do software utilizado.

$$G_\kappa = -\rho \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \quad (3.9)$$

onde a notação das médias de Reynolds se aplica, isto é, o termo u' representa a flutuação da velocidade e a sobreposição da barra a um determinado termo indica a média temporal deste.

O termo G_b , que aparece nas Equações 3.7 e 3.8, representa a produção de energia cinética turbulenta devido ao empuxo e é determinado pela Equação 3.10.

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (3.10)$$

onde β é o coeficiente de expansão térmica, Pr_t é o número de Prandtl turbulento e μ_t é a viscosidade turbulenta, que pode ser obtida, para valores altos de Re , através da seguinte relação:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon}, \quad (3.11)$$

sendo C_μ uma constante.

Por fim, o termo R_ϵ da Equação 3.8 consiste na maior diferença entre este modelo e o modelo $k - \epsilon$ padrão e é obtido pela seguinte relação:

$$R_\epsilon = \frac{C_\mu \rho \eta^3 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right) \epsilon^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{1}{\kappa}, \quad (3.12)$$

onde η_0 e β são constantes, enquanto η é definido da seguinte maneira:

$$\eta \equiv S \frac{\kappa}{\epsilon} \quad (3.13)$$

Onde S é o módulo do tensor da taxa de deformação, definido da seguinte maneira:

$$S \equiv \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (3.14)$$

onde S representa o tensor da taxa de deformação.

Uma consideração adicional deve ser feita a respeito da solução numérica próxima à parede. Os modelos de turbulência, de forma geral, não apresentam boas soluções nas subcamadas viscosas próximas às superfícies. Como o escopo da análise desta

dissertação envolve a definição de grandezas nesta região (como fluxos, propriedades, etc.), fez-se necessária a utilização de um tratamento específico para a parede. Para tal utilizou-se o pacote de funções padrão disponíveis no software ANSYS Fluent, baseadas nas equações de LAUNDER e SPALDING [35].

3.4 Propriedades do CO₂

Seguindo a orientação dos pesquisadores mencionados no capítulo anterior, optou-se pela utilização de um modelo de gás real compressível. Utilizou-se, neste trabalho, uma subrotina pré-estabelecida disponível no catálogo do software utilizado, nomeada gás real NIST. Esta função, quando adaptada ao CO₂, utiliza a equação de estado de Helmholtz desenvolvida por SPAN e WAGNER [36] e padroniza as propriedades termodinâmicas e de transporte de acordo com a base de dados REFPROP v7.0 do Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia (National Institute of Standards and Technology - NIST, em inglês).

A equação de estado é considerada a mais precisa disponível do NIST e, segundo SPAN e WAGNER [36], apresenta, na faixa de pressões até 30 MPa e temperaturas até 523 K, uma incerteza na faixa de $\pm 0,03 \%$ até $\pm 0,05 \%$ para a densidade e $\pm 0,15 \%$ até $\pm 1,5 \%$ para o calor específico à pressão constante. Embora, segundo WANG *et al.* [37], o erro relativo da densidade seja consideravelmente maior na vizinhança imediata do ponto pseudo-crítico, isto é, para temperaturas reduzidas entre 1,0 e 1,1, podendo chegar até 4 %, baseando-se em valores experimentais. Por outro lado, todas as equações de estado disponíveis na literatura tendem a apresentar erros relativos maiores nesta região.

A equação de SPAN e WAGNER [36] baseia-se na equação fundamental da energia de Helmholtz representada pela letra A. A energia de Helmholtz adimensional, por sua vez, é definida como:

$$\phi(\delta, \tau) = \frac{A(\rho, T)}{RT}, \quad (3.15)$$

sendo δ a densidade reduzida e τ a temperatura reduzida inversa, definidos, respectivamente, por:

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_c}, \quad (3.16)$$

$$\tau = \frac{T_c}{T}, \quad (3.17)$$

onde ρ_c e T_c representam a densidade crítica e a temperatura crítica, respectivamente.

A energia de Helmholtz adimensional pode ser dividida em duas partes. A primeira representa o comportamento de gás ideal (ϕ^o) e a segunda descreve uma contribuição residual da energia (ϕ^r).

$$\phi(\delta, \tau) = \phi^o(\delta, \tau) + \phi^r(\delta, \tau). \quad (3.18)$$

Através da combinação das derivadas da Equação 3.18, é possível calcular quaisquer propriedades termodinâmicas. Este procedimento é exemplificado na Tabela 3.1 para algumas propriedades arbitrárias.

Tabela 3.1: Relação de algumas propriedades termodinâmicas com a energia de Helmholtz ϕ

Propriedade	Relação com ϕ
$p(T, \rho) = - \left(\frac{\partial A}{\partial v} \right)_T$	$\frac{p(\delta, \tau)}{\rho RT} = 1 + \delta \phi_\delta^r$
$h(T, p) = A - T \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_v - v \left(\frac{\partial A}{\partial v} \right)_T$	$\frac{h(\delta, \tau)}{RT} = 1 + \tau(\phi_\tau^o + \phi_\tau^r) + \delta \phi_\delta^r$
$c_p(T, \rho) = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p$	$\frac{c_p(\delta, \tau)}{R} = -\tau^2(\phi_{\tau\tau}^o + \phi_{\tau\tau}^r) + \frac{(1 + \delta \phi_\delta^r - \delta \tau \phi_{\delta\tau}^r)^2}{1 + 2\delta \phi_\delta^r + \delta^2 \phi_{\delta\delta}^r}$

Na Tabela 3.1, os termos ϕ_δ , $\delta_{\delta\delta}$, ϕ_τ , $\phi_{\tau\tau}$ e $\phi_{\delta\tau}$ são as derivadas parciais de ϕ , definidas como:

$$\phi_\delta = \left[\frac{\partial \phi}{\partial \delta} \right]_\tau, \quad (3.19)$$

$$\delta_{\delta\delta} = \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \delta^2} \right]_\tau, \quad (3.20)$$

$$\phi_\tau = \left[\frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right]_\delta, \quad (3.21)$$

$$\phi_{\tau\tau} = \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} \right]_\delta, \quad (3.22)$$

$$\phi_{\delta\tau} = \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \delta \partial \tau} \right]_\tau. \quad (3.23)$$

SPAN e WAGNER [36] propuseram em sua correlação as seguintes expressões para $\phi^o(\delta, \tau)$ e $\phi^r(\delta, \tau)$, respectivamente:

$$\phi^o(\delta, \tau) = \ln(\delta) + a_1^o + a_2^o \tau + a_3^o \ln(\tau) + \sum_{i=4}^8 a_i^o \ln[1 - \exp(-\tau \theta_i^o)], \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned}
\phi^r(\delta, \tau) = & \sum_{i=1}^7 n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} + \sum_{i=8}^{34} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} e^{-\delta^{c_i}} + \sum_{i=35}^{39} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} e^{-\alpha_i (\delta - \epsilon_i)^2 - \beta_i (\tau - \gamma_i)^2} \\
& + \sum_{i=40}^{42} n_i \Delta^{b_i} \delta e^{C_i (\delta - 1)^2 - D_i (\tau - 1)^2},
\end{aligned} \tag{3.25}$$

sendo Δ definido por:

$$\Delta = \left\{ (1 - \tau) + A_i [(\delta - 1)^2]^{1/(2\beta)_i} \right\}^2 + B_i [(\delta - 1)^2]^{a_i}. \tag{3.26}$$

Todos os coeficientes e expoentes das Equações 3.24 e 3.25 são tabelados em função de i . As derivadas de ϕ (Equações 3.19 a 3.22) expressas em séries de potências também são conhecidas e apresentadas por SPAN e WAGNER [36], encerrando assim, a equação constitutiva utilizada para descrever o fluido.

3.5 ANSYS Fluent

No contexto atual da metodologia CFD, um dos métodos mais utilizados pelos pesquisadores no mundo é o método dos volumes finitos (MVF). Este método baseia-se na formulação de volumes de controle e, através da divisão do domínio em pequenos elementos — que atuam como volumes de controle —, é capaz de resolver algebricamente as equações de conservação previamente integradas sobre os referenciados volumes.

O método dos volumes finitos originou-se do método das diferenças finitas (MDF) e supera seu precursor, na grande maioria das aplicações em engenharia, devido à imposição da conservação de massa, quantidade de movimento e energia em cada elemento isoladamente e também no domínio inteiro.

Para este trabalho, foi utilizado o software ANSYS Fluent v. 18.2, que é atualmente uma das maiores plataformas comerciais destinadas a simulação de fluidos. Este software utiliza o modelo dos volumes finitos.

No Apêndice A deste trabalho, são apresentadas mais informações sobre o MVF e como este é implementado no ANSYS Fluent.

3.6 Estudo das Malhas

As geometrias apresentadas na Seção 3.4 foram reproduzidas no software ANSYS SpaceClaim 2016 e exportadas para o software ANSYS Meshing para a criação das malhas (nodalização).

A escolha do tipo da malha é uma decisão importante e deve levar em consideração uma série de fatores. Os principais fatores levados em conta neste trabalho foram o tempo computacional e as exigências do modelo utilizado. Por este motivo, optou-se por utilizar uma malha estruturada do tipo butterfly, com refino na parede. Malhas estruturadas possuem, em geral, menor número de elementos, além de maior velocidade de acoplamento das variáveis e, por esta razão, demandam menos tempo computacional. A malha do tipo butterfly, que consiste em uma malha híbrida cilíndrica com um paralelogramo no centro, é ideal para tubos circulares pois equilibra simplicidade e qualidade, em termos de ortogonalidade e densidade de elementos (HERNANDEZ-PEREZ *et al.* [38]). No que diz respeito ao método RANS de duas equações e, mais especificamente, ao modelo de turbulência utilizado (RNG $\kappa - \epsilon$), é desejável controlar a distância do primeiro nó em relação à parede e garantir que esta seja compatível com a necessidade do modelo.

É importante salientar que existem múltiplas maneiras de analisar a qualidade das malhas, com o intuito de garantir que as incertezas inerentes a elas sejam menores ou da mesma ordem de grandeza que as demais componentes da análise numérica. Neste trabalho optou-se pela realização do estudo da convergência das malhas, isto é, a análise de um grupo de variáveis específicas mediante à simulação sequencial de malhas crescentemente refinadas, em busca de um patamar de independência da solução em relação ao crescimento da malha. Adicionalmente foram analisados: qualidade ortogonal, assimetria (skewness, em inglês) e distância adimensional y^+ . Este último é definido como:

$$y^+ = \frac{y\rho u_\tau}{\mu}, \quad (3.27)$$

onde u_τ é a velocidade friccional, definida por:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}, \quad (3.28)$$

em que τ_w é a tensão cisalhante na parede, obtida através de:

$$\tau_w = \frac{1}{8}f\rho u_\infty^2, \quad (3.29)$$

sendo u_∞ a velocidade da corrente livre e f o fator de atrito, que pode ser estimado pela seguinte correlação empírica, para escoamentos turbulentos em tubos circulares:

$$f = 0,184Re^{-0,2}. \quad (3.30)$$

Para o modelo de turbulência RNG $\kappa - \epsilon$, associado às funções padrão para a parede, recomenda-se a utilização de um valor de y^+ entre 30 e 300 (ANSYS [39]). Entretanto, segundo SPALART [40], embora a implementação de funções para a

parede seja capaz de corrigir os resultados do modelo de turbulência para a região logarítmica de velocidades, a escolha de valores baixos de y^+ implica em uma redução favorável de possíveis erros numéricos.

3.7 Discretização das Variáveis

O esquema PRESTO! foi utilizado para a discretização dos termos de pressão. As demais variáveis foram discretizadas segundo um esquema de segunda ordem. O acoplamento da pressão e velocidade foi realizado através do algoritmo PISO. Esta combinação de esquemas de discretização e acoplamento é exatamente a mesma utilizada por SARKAR e BASU [27].

O esquema PRESTO! (Pressure Staggering Option, em inglês) apresenta uma melhor resolução do campo de pressões dentro do domínio do problema uma vez que ele utiliza um balanço discreto da continuidade para estimar a pressão na face do elemento de controle, enquanto os tradicionais esquemas de primeira e segunda ordem utilizam interpolações. Segundo ANSYS [34] este esquema é recomendável para simulações de convecção natural com números de Rayleigh elevados, dentre outros casos.

O software ANSYS Fluent oferece duas possibilidades de solução numérica: segregada ou acoplada. Para mais detalhes, encoraja-se que o autor leia o Apêndice A desta dissertação. Um dos algoritmos de acoplamento oferecidos é o PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators, em inglês), que faz parte da família dos algoritmos SIMPLE e SIMPLEC. Estes algoritmos apresentam uma limitação: as velocidades, após a correção da pressão, não satisfazem a equação de balanço de quantidade de movimento e por este motivo o cálculo deve ser repetido até que esta condição seja satisfeita. O algoritmo PISO é o mais sofisticado deste grupo, pois utiliza correção da quantidade de movimento e das assimetrias existentes no domínio, diminuindo substancialmente o número de interações necessárias para atingir a convergência.

3.8 Análise dos Parâmetros de Interesse

Seguindo a orientação da maioria dos trabalhos existentes ([27], [6], [20], [19], [2]), escolheu-se a seção reta no ponto médio do aquecedor para a avaliação dos resultados. As propriedades do CO_2 foram avaliadas à temperatura média T_m , definida por:

$$T_m = \frac{1}{A} \int_A T dA, \quad (3.31)$$

onde A é a área da seção reta.

A densidade ρ foi calculada de maneira análoga, como pode-se ver:

$$\rho = \frac{1}{A} \int_A \rho dA. \quad (3.32)$$

O coeficiente de transferência de calor h foi caculado segundo a definição:

$$h = \frac{q_w''}{T_w - T_b}, \quad (3.33)$$

onde T_w é a temperatura da parede, definida como a média circunferencial da seção reta:

$$T_w = \frac{1}{l} \int_l T dl, \quad (3.34)$$

onde l é a coordenada circunferencial.

A temperatura bulk T_b , que aparece na Equação 3.33 foi aproximada, neste caso, como a média pela vazão mássica:

$$T_b = \frac{\int_A T |\rho u dA|}{\int_A |\rho u dA|}. \quad (3.35)$$

O coeficiente de expansão térmica β foi obtido a partir da seguinte expressão:

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P. \quad (3.36)$$

As propriedades C_p , μ , β e k foram avaliadas à temperatura média na área T_m :

$$T_m = \frac{1}{A} \int_A T dA. \quad (3.37)$$

Por fim, a potência de aquecimento \dot{Q} foi obtida a partir da equação:

$$\dot{Q} = q_w'' \pi D L_H. \quad (3.38)$$

Para a análise do fator de atrito, utilizou-se a Equação 3.39 aplicada a uma seção adiabática horizontal do tubo, de comprimento L igual a $L_H/4$, adjacente ao aquecedor.

$$f = \frac{\pi^2 \rho \Delta P D^5}{8m^2 L}, \quad (3.39)$$

onde ΔP é a diferença de pressão do fluido entre a entrada e a saída da seção em questão.

O resultados foram comparados com a correlação de YADAV *et al.* [2] para o fator de atrito (Equação 3.40). Esta correlação é válida para $27.000 \leq Re \leq 180.000$.

$$f = (0,7907 \ln Re - 1,868)^{-2}, \quad (3.40)$$

Para a análise da transferência de calor, os resultados foram comparados com duas correlações:

- Correlação de Dittus-Boelter:

Esta correlação é utilizada tradicionalmente para problemas de convecção forçada em tubos circulares e tem a seguinte forma para a seção de aquecimento, segundo INCROPERA e DEWITT [41]:

$$Nu = 0,0243 Re^{0,8} Pr^{0,4}. \quad (3.41)$$

- Correlação de YADAV *et al.* [2]:

Esta correlação foi derivada especificamente para a circulação natural do CO₂ em circuitos retangulares e tem a seguinte forma para a seção de aquecimento:

$$Nu = 0,01705 Re^{0,8807} Pr^{0,2312}. \quad (3.42)$$

3.9 Verificação

A verificação deste trabalho foi conduzida — assim como na convergência de malhas — individualmente para cada configuração do circuito e somente para a pressão de operação média (9,0 MPa). Os resultados foram verificados através da comparação com duas correlações empíricas derivadas, especificamente, para a circulação natural do CO₂ em circuitos retangulares:

- Correlação de SWAPNALEE *et al.* [1]:

$$Re = 2,583 \left(\frac{Gr_m}{N_G} \right)^{0,352}, \quad (3.43)$$

onde N_G é definido como:

$$N_G = \frac{L_{tot}}{D}, \quad (3.44)$$

sendo L_{tot} o comprimento total do circuito.

- Correlação de YADAV *et al.* [2]:

$$Re = 2,066 \left(\frac{Gr_m}{N_G} \right)^{0,361}. \quad (3.45)$$

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Neste capítulo, os resultados das simulações serão apresentados e discutidos dentro do escopo definido no objetivo deste trabalho (seção 1.7). Primeiramente serão apresentadas as malhas geradas e o estudo de convergência realizado. Em seguida será apresentado o resultado da verificação da simulação. Serão, por fim, apresentados os resultados das simulações categorizados de modo a contemplar as seguintes análises: (i) análise do efeito da pressão, (ii) análise do efeito da configuração, (iii) análise do fator de atrito, (iv) análise dos campos de temperatura e velocidade, (v) análise dos perfis de velocidade e (vi) análise da transferência de calor.

Os parâmetros geométricos utilizados para as simulações são indicados na Tabela 4.1. Três valores de pressão de operação P foram estudados: 8,5 MPa, 9,0 MPa e 9,5 MPa. A temperatura da parede do resfriador T_C utilizada foi 298 K (aproximadamente 25 °C).

Tabela 4.1: Parâmetros geométricos utilizados.

Parâmetro	Medida (m)
H	1,1
H_1	0,1
H_2	0,6
W	0,6
L_C	0,4
L_H	0,4
L_1	0,1
L_2	0,1
D_i	0,008

4.1 Convergência de Malhas

Com o intuito de minimizar os erros numéricos provenientes das malhas, foi realizado um estudo prévio de convergência da solução. Seis malhas foram criadas, segundo uma razão de ordem aproximadamente 2 em relação ao número de elementos. Uma estratégia de refino uniforme foi adotada, isto é, a cada malha nova criada, todas as direções foram incrementadas de maneira uniforme. Na Tabela 4.2 estão apresentados os parâmetros de cada malha e na Figura 4.1 são ilustradas as seções retas destas.

Tabela 4.2: Parâmetros das malhas criadas.

Nome	Elementos	Nós	Qualidade ortogonal mínima	Skewness máximo
Malha 1	25.014	30.320	0,8484	0,4716
Malha 2	50.844	57.088	0,8325	0,4722
Malha 3	111.780	123.120	0,7160	0,4797
Malha 4	198.464	214.412	0,6568	0,4934
Malha 5	408.480	432.768	0,7847	0,4894
Malha 6	802.368	843.760	0,7681	0,2319

O estudo da convergência das malhas foi realizado individualmente para cada circuito à potência de aquecimento de 700 W. Isto porque, para esta potência, todos os circuitos encontram-se no regime de deterioração da transferência de calor — onde observou-se maior dificuldade de convergência, devido à maior variação espacial das propriedades. A potência de 700 W apresenta, portanto, uma aproximação razoável e representativa da faixa de 0 a 100 W de potência pois além de situar-se próximo à média, possui um efeito nivelador sobre a convergência. Optou-se, também, por realizar o estudo da convergência à pressão de 9,0 MPa, que corresponde à média do intervalo estudado.

As variáveis analisadas foram as temperaturas médias de 9 seções retas igualmente espaçadas da seção de aquecimento. A primeira seção foi tomada à entrada do aquecedor — tomando o fluido como referencial — e a última seção corresponde à saída do aquecedor. As curvas dos valores interpolados a partir destes pontos estão apresentadas nas Figuras 4.2, 4.3, 4.4 e 4.5, para os circuitos HHHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente. Nestes gráficos foram representadas somente quatro malhas consecutivas, sendo as duas mais refinadas representativas da convergência propriamente dita. Ou seja, a última malha representada em cada gráfico foi considerada a mais refinada e a penúltima, a malha escolhida para a simulação, uma vez que o erro relativo desta em relação à mais refinada é mínimo e o número

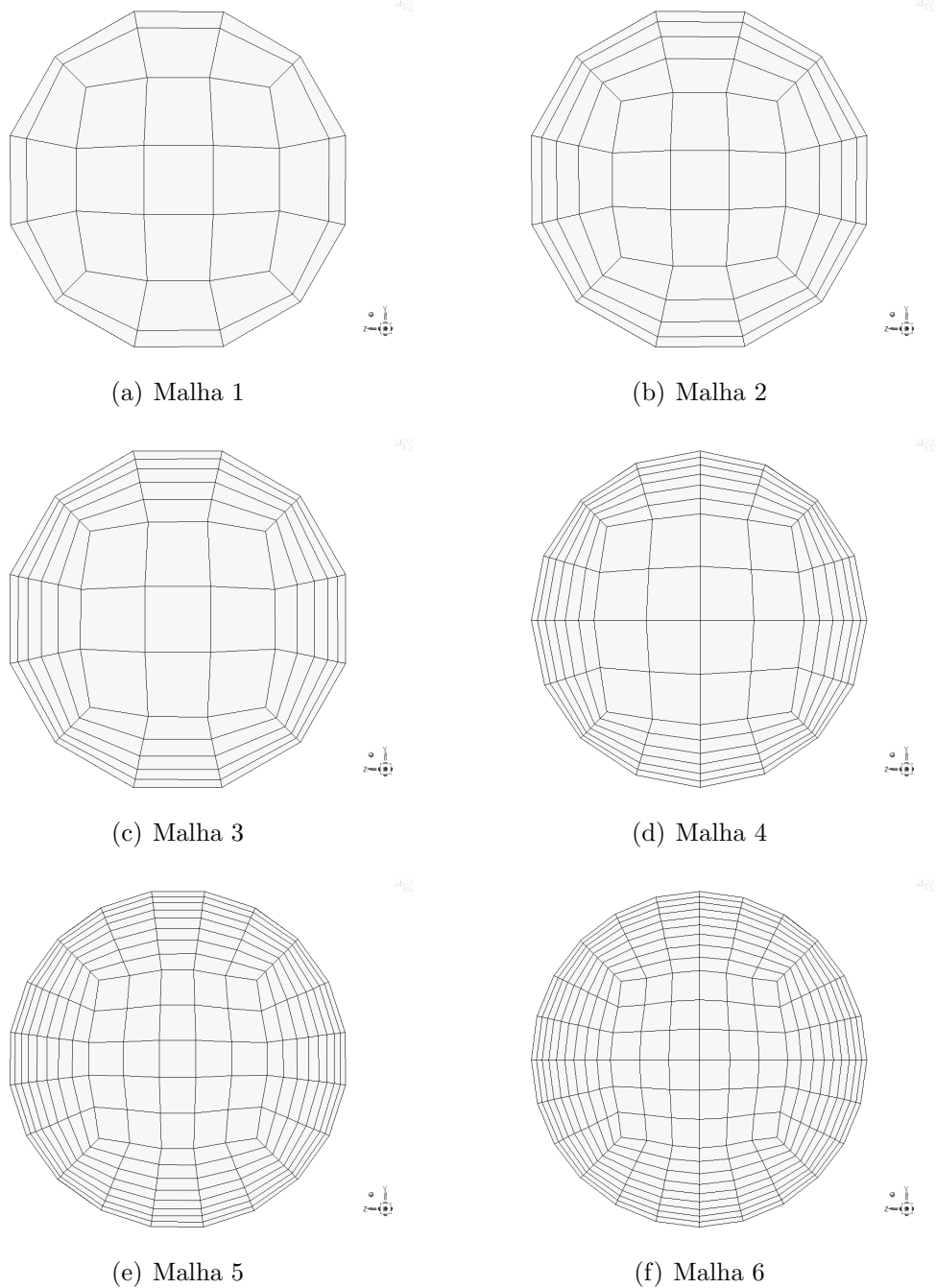


Figura 4.1: Seções retas das malhas criadas.

de elementos é aproximadamente a metade, proporcionando uma favorável redução do tempo computacional.

Portanto, para as quatro configurações de circuito, as malhas escolhidas estão relacionadas na Tabela 4.3. Adicionalmente, constam nesta tabela os valores de y^+ obtidos em cada caso. Todos os valores obtidos estão dentro dos limites recomendados para o modelo utilizado, como discutido no Capítulo 3.

Tabela 4.3: Malhas escolhidas por configuração de circuito.

Configuração	Malha escolhida	y^+
HHHC	Malha 5	41,1
HHVC	Malha 4	49,8
VHHC	Malha 3	56,2
VHVC	Malha 5	46,9

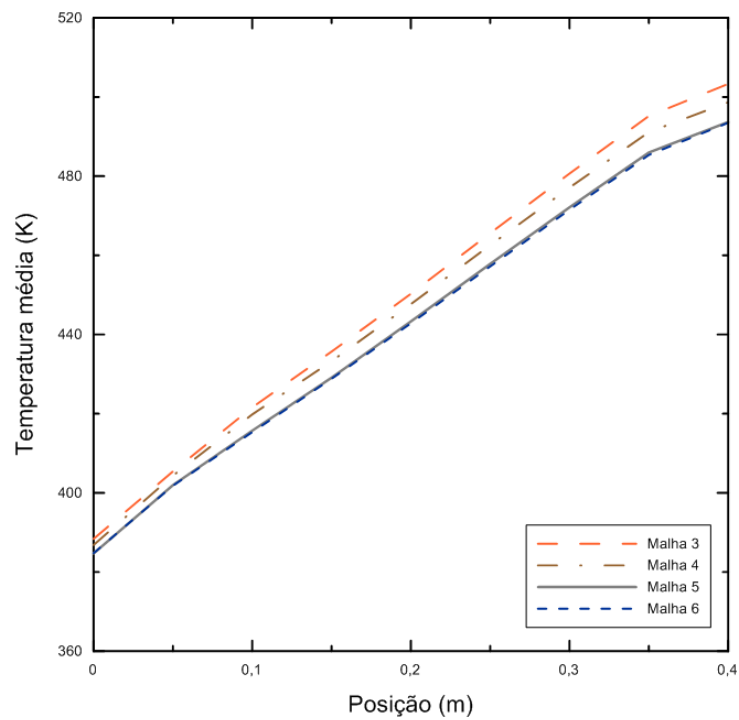


Figura 4.2: Temperatura média como função da distância para o circuito HHHC.

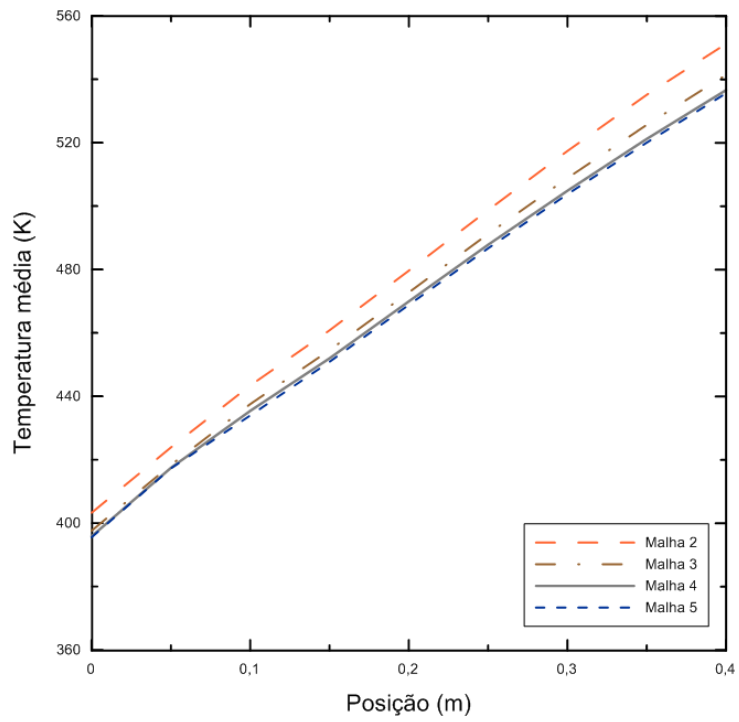


Figura 4.3: Temperatura média como função da distância para o circuito HHVC.

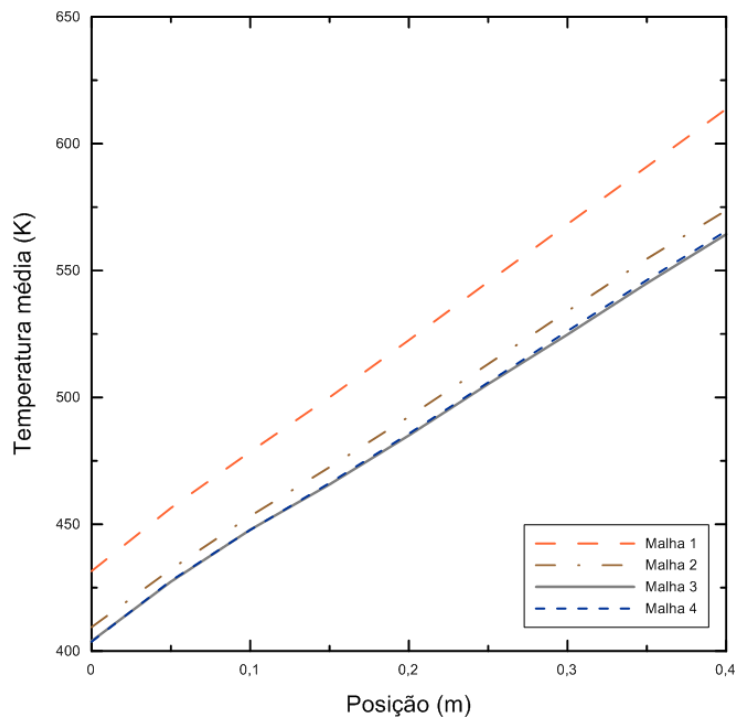


Figura 4.4: Temperatura média como função da distância para o circuito VHHC.

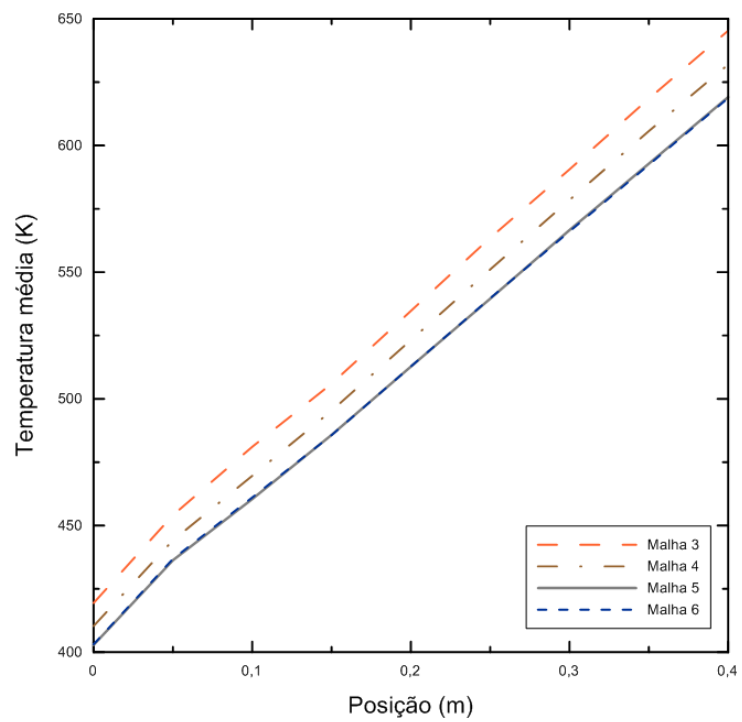


Figura 4.5: Temperatura média como função da distância para o circuito VHVC.

4.2 Verificação

Como foi mencionado na seção 3.9, com o intuito de verificar os resultados das simulações, a relação entre os números adimensionais Re e Gr_m foi analisada e comparada com as correlações de SWAPNALEE *et al.* [1] e YADAV *et al.* [2]. As Figuras 4.6, 4.7, 4.8 e 4.9 ilustram este procedimento aplicado aos circuitos HHHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente, onde os resultados apresentados referem-se à completa faixa de pressões estudadas.

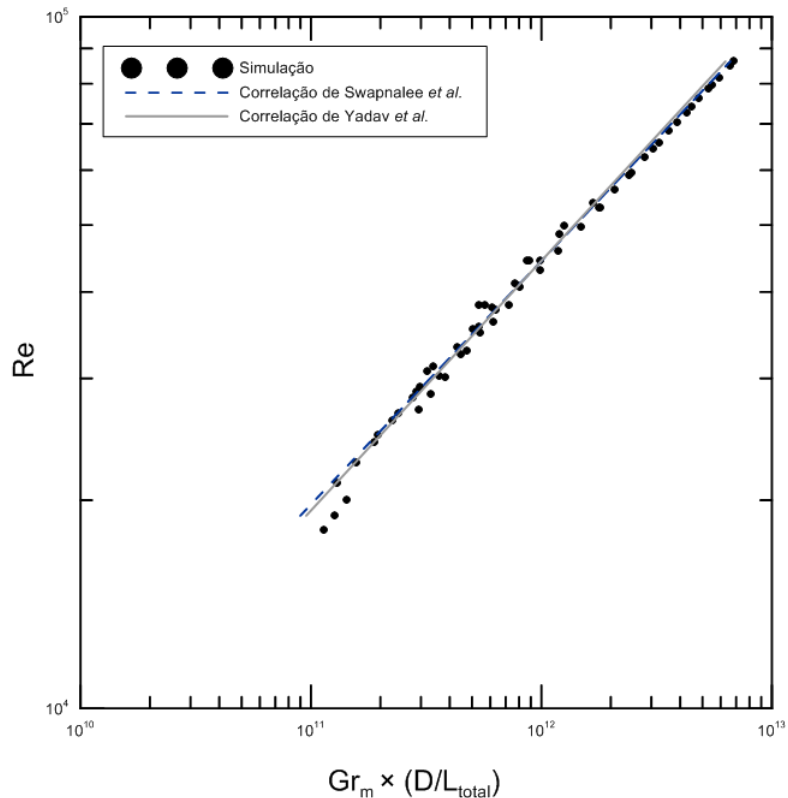


Figura 4.6: Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito HHHC.

Observou-se que uma boa concordância dos resultados com as correlações dos referenciados autores foi obtida para os circuitos HHHC e HHVC — principalmente para números de Grashof altos —, enquanto para os circuitos com aquecedores verticais notou-se que as correlações forneceram números de Reynolds maiores que os obtidos via simulação (cerca de 2,5 % maiores). Uma explicação para isto é que ambas as correlações utilizadas foram derivadas para o circuito HHHC. Embora SWAPNALEE *et al.* [1] tenham avaliado outras configurações, os pesquisadores não sinalizaram em seu artigo a metodologia utilizada para estimativa da distância H utilizada no cálculo do número de Grashof. Associado a isto, consideráveis discordâncias foram observadas também por estes autores para as configurações HHVC, VHHC e VHVC.

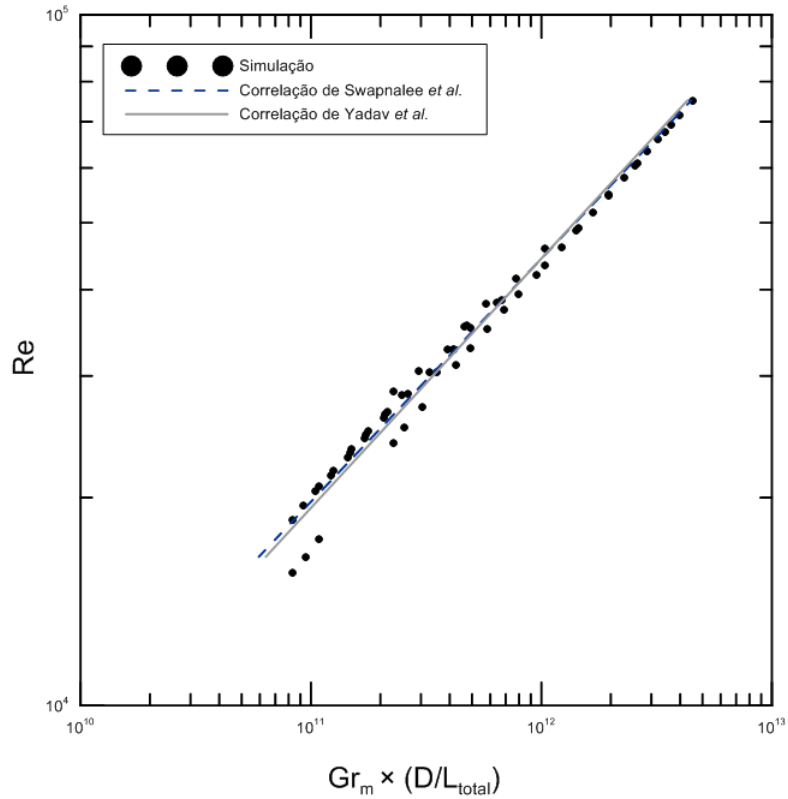


Figura 4.7: Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito HHVC.

Observou-se também que, em todos os casos, os resultados onde parte do fluido encontra-se mais próximo da faixa subcrítica, caracterizado pelos baixos números de Grashof, apresentam erro maior. Estes resultados são representados pelos pontos mais à esquerda em relação ao eixo das abscissas, sendo estas as soluções numéricas correspondentes aos menores valores de potência da faixa estudada.

Considerando este contexto, foram desenvolvidas, neste estudo, quatro diferentes correlações empíricas que expressam Re em função de Gr_m (uma para cada configuração). Considerando H como a distância vertical entre os centros do aquecedor e do resfriador, temos a regressão dos pontos apresentadas nas Figuras 4.10, 4.11, 4.12 e 4.13, para as configurações HHHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente, e, na Tabela 4.4, temos as correlações empíricas propostas. Para esta análise, os pontos onde a maior parte do fluido encontra-se subcrítico foram desconsiderados.

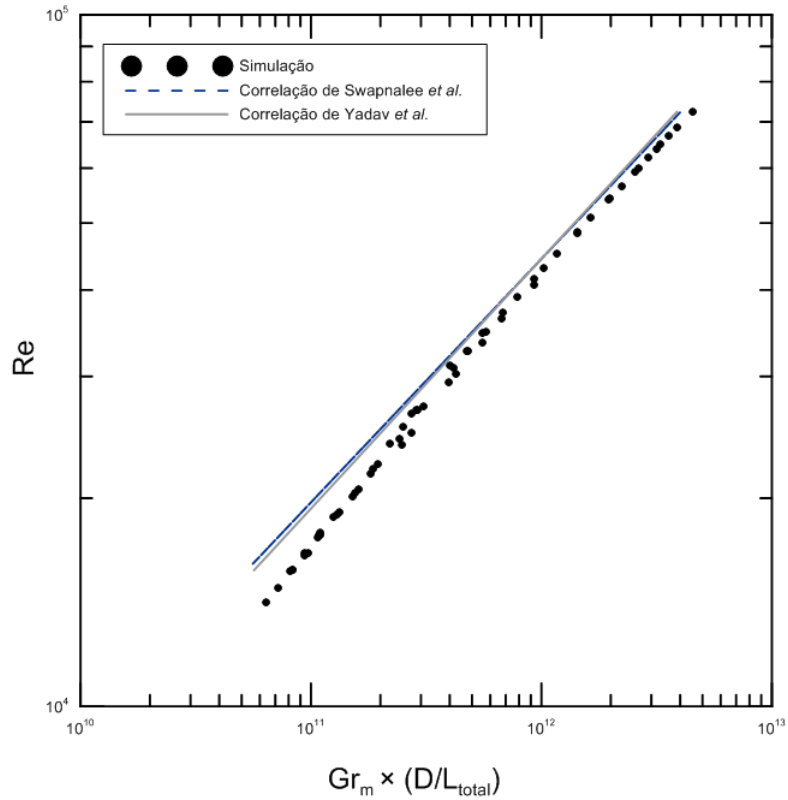


Figura 4.8: Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHHC.

Tabela 4.4: Correlações propostas para o número de Reynolds.

Configuração	Correlação proposta	Coefficiente de determinação (R^2)
HHHC	$Re = 2,8199(Gr_m/N_G)^{0,3495}$	0,9953
HHVC	$Re = 3,6840(Gr_m/N_G)^{0,3397}$	0,9929
VHHC	$Re = 1,0314(Gr_m/N_G)^{0,3841}$	0,9980
VHVC	$Re = 1,1258(Gr_m/N_G)^{0,3811}$	0,9973

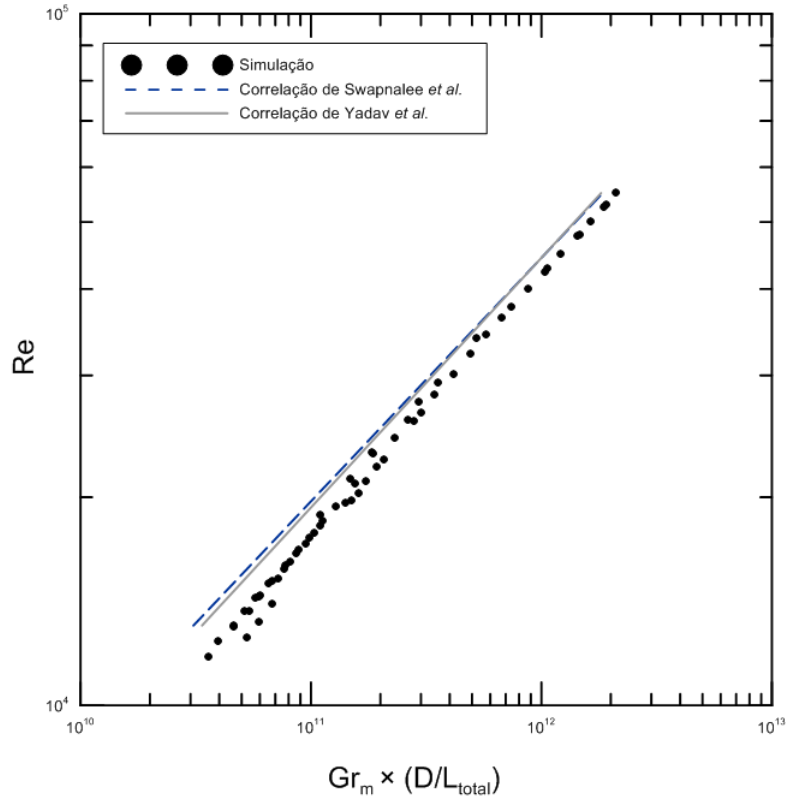


Figura 4.9: Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHVC.

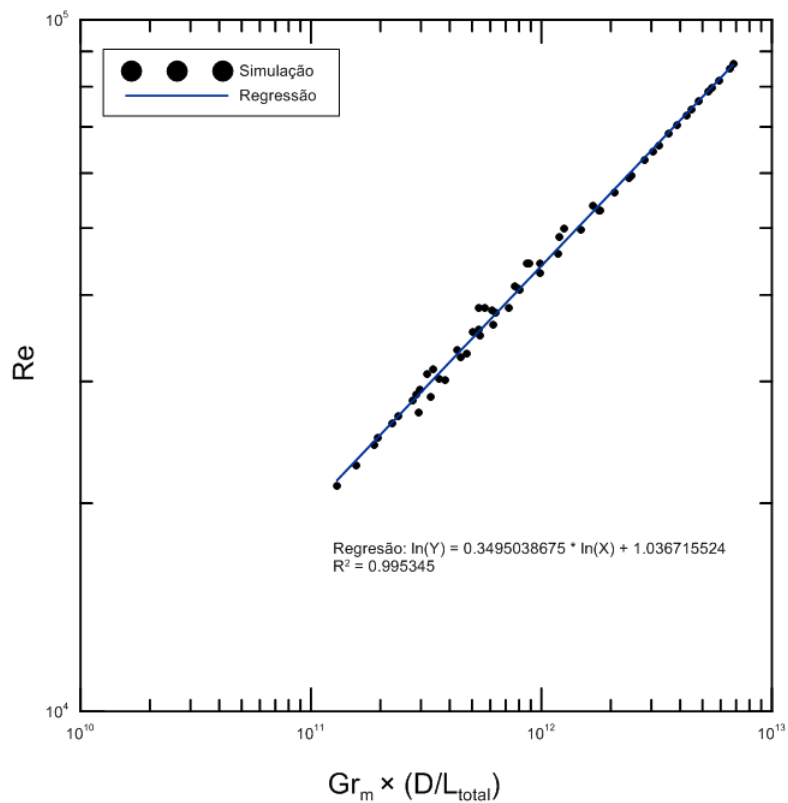


Figura 4.10: Correlação proposta para Re em função de Gr_m para o circuito HHHC.

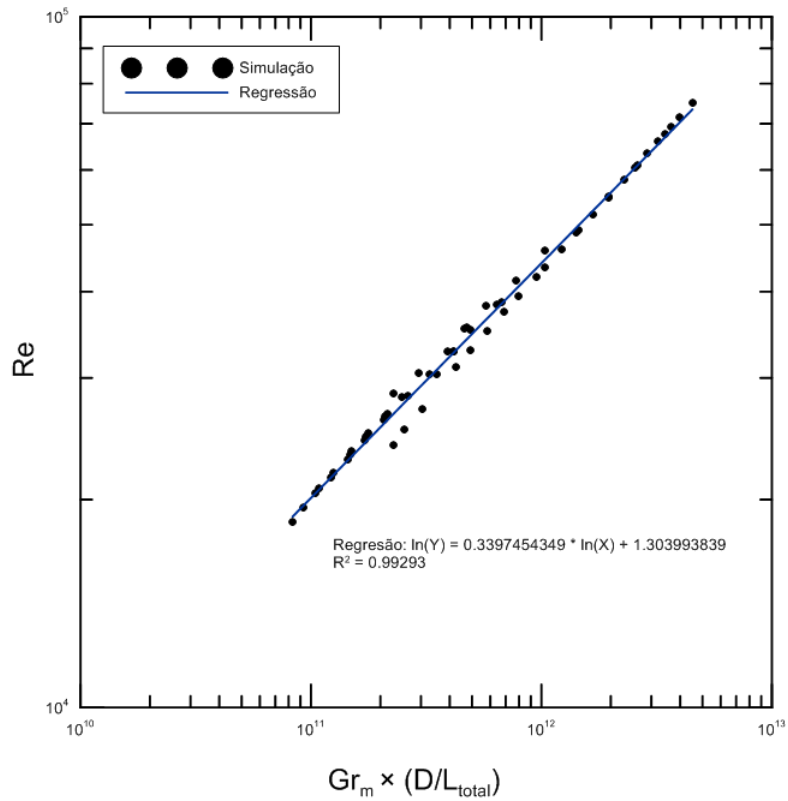


Figura 4.11: Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito HHVC.

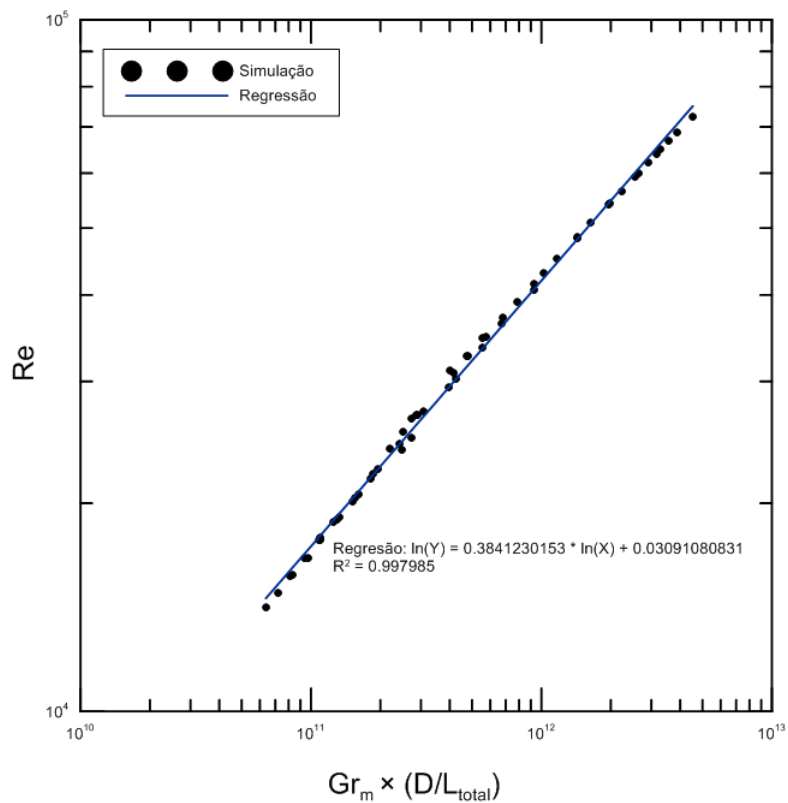


Figura 4.12: Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHHC.

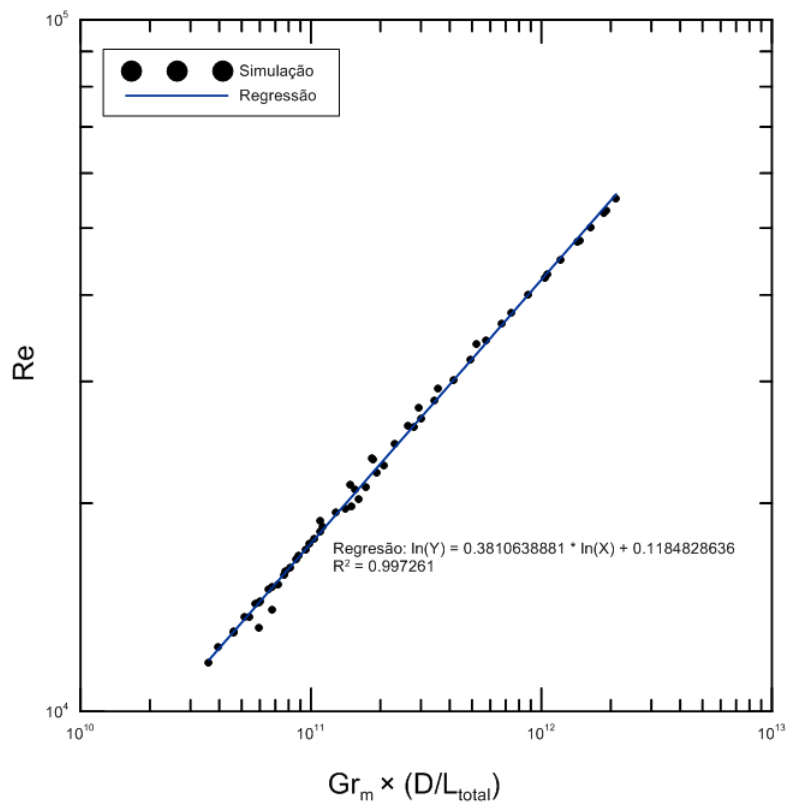


Figura 4.13: Número de Reynolds em função do número de Grashof modificado para o circuito VHVC.

4.3 Efeito da Configuração

Nesta seção será estudado o efeito das diferentes configurações geométricas sobre o comportamento termo-hidráulico do sistema em estado estacionário, mais especificamente, no que refere-se ao surgimento do regime de HTD. As variáveis analisadas foram a vazão mássica de circulação natural e a temperatura média, ambos avaliados na seção reta do ponto médio do aquecedor. Nas Figuras 4.14, 4.15 e 4.16, estão representadas as curvas de evolução da vazão mássica e da temperatura média em função da potência para as pressões de operação de 8,5, 9,0 e 9,5 MPa, respectivamente.

Pode-se notar que, para todas as pressões de operação estudadas, a vazão mássica do circuito HHHC é a maior entre os demais para toda a faixa de potências. O surgimento do regime de HTD — caracterizado pela queda abrupta da vazão mássica — é mais tardio no circuito HHHC, mediante ao incremento contínuo da potência. Enquanto isto, o circuito VHVC apresenta a menor vazão mássica de todos os circuitos e também adentra na região de HTD mais precocemente, comparado com as demais configurações.

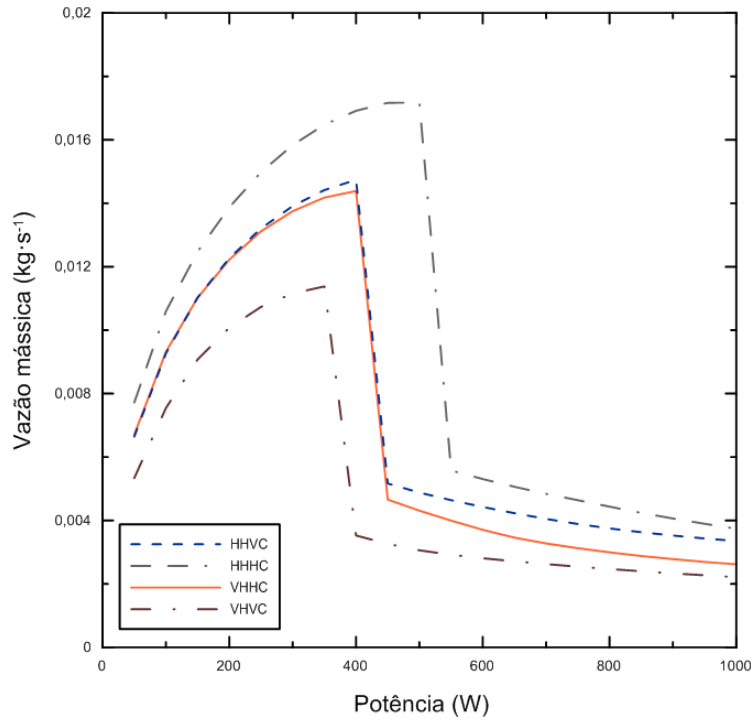
Outra observação importante é que a variação das propriedades estudadas é bastante semelhante para os circuitos HHVC e VHHC antes do regime de HTD, embora o valor máximo da vazão mássica para o circuito HHVC seja ligeiramente maior do que a do circuito VHHC para todas as pressões de operação estudadas.

Uma tendência geral observada para todos os valores de pressão é que, no regime de HTD, existe uma ordem bem estabelecida entre as vazões mássicas. Para uma determinada potência, as vazões mássicas seguem a seguinte ordem crescente:

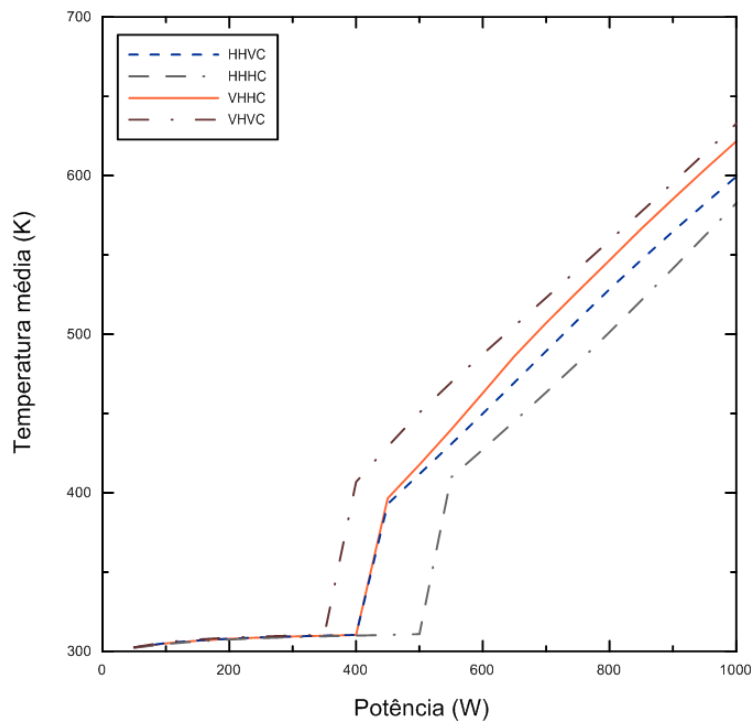
$$\dot{m}_{HHHC} > \dot{m}_{HHVC} > \dot{m}_{VHHC} > \dot{m}_{VHVC}.$$

Pode ser observado que a evolução das temperaturas médias até o surgimento do regime de HTD se dá de maneira quase idêntica para todas as configurações. Porém, o surgimento do regime de HTD dá-se a potências diferentes para cada configuração e, embora a inclinação das curvas de temperatura em função da pressão sejam semelhantes, existe um deslocamento entre as curvas no eixo das potências.

Por fim, pode-se notar que o circuito VHHC apresenta queda mais acentuada da vazão mássica em função da potência durante o regime de HTD, comparado com as demais configurações. Por consequência, esta configuração também apresenta a maior taxa de aumento da temperatura média em função da potência em regime de HTD.

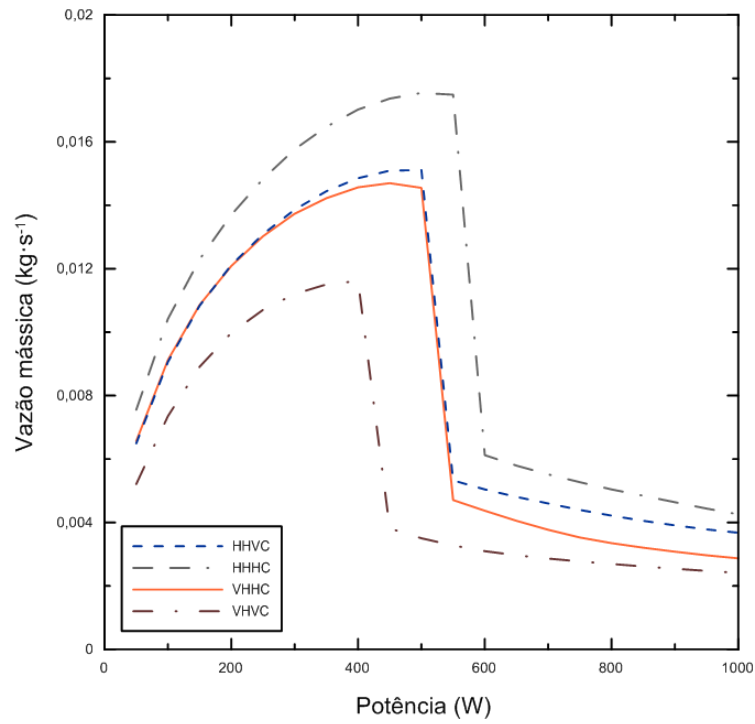


(a) Vazão mássica como função da potência

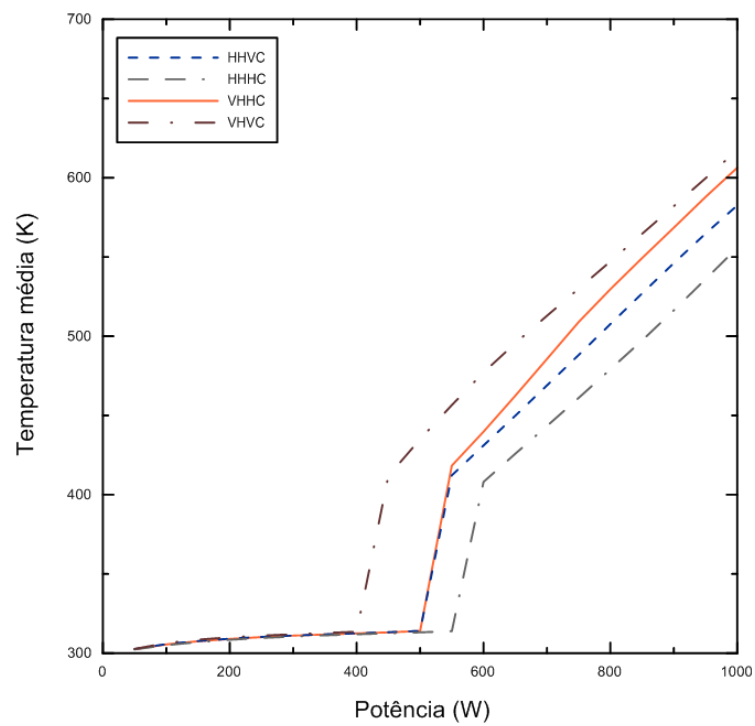


(b) Temperatura média como função da potência

Figura 4.14: Vazão mássica e temperatura como funções da potência a 8,5 MPa.

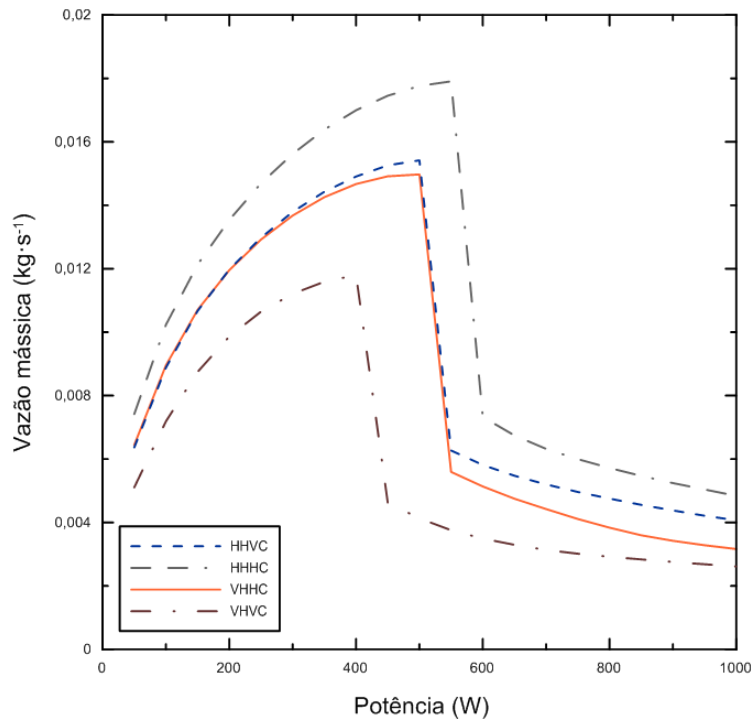


(a) Vazão mássica como função da potência

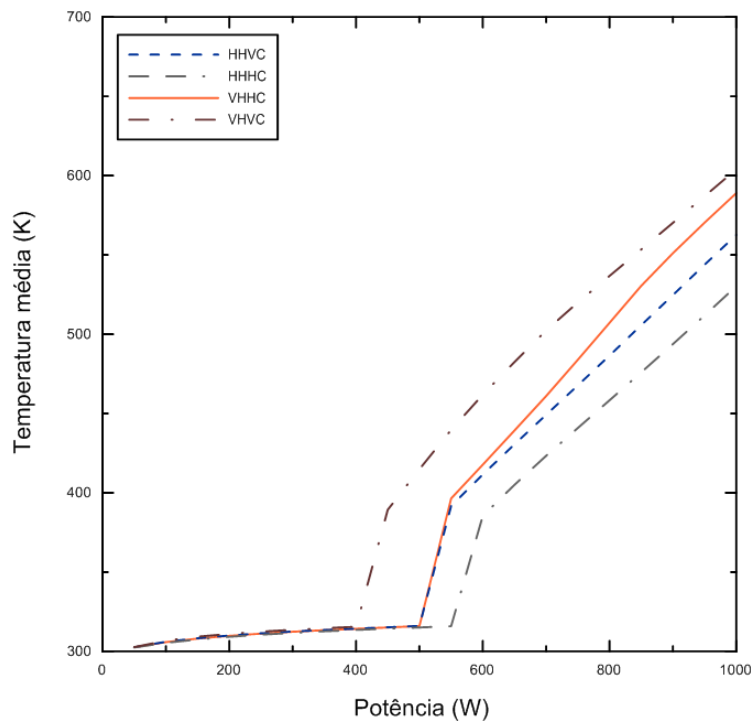


(b) Temperatura média como função da potência

Figura 4.15: Vazão mássica e temperatura como funções da potência a 9,0 MPa.



(a) Vazão mássica como função da potência



(b) Temperatura média como função da potência

Figura 4.16: Vazão mássica e temperatura como funções da potência a 9,5 MPa.

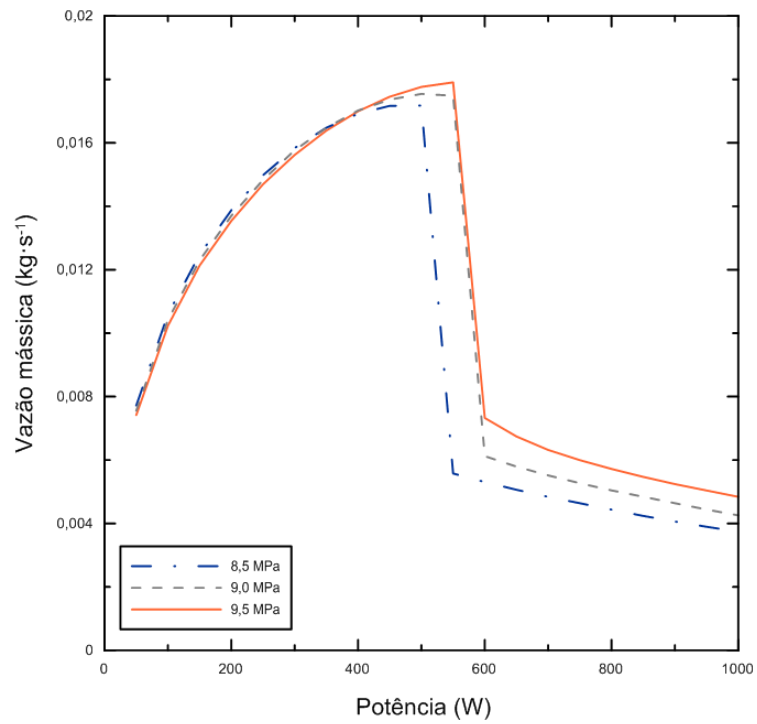
4.4 Efeito da Pressão

Com intuito de estudar o efeito da pressão sobre o comportamento termo-hidráulico do sistema, utilizou-se uma estratégia semelhante à da seção anterior. As variáveis vazão mássica e temperatura média foram analisadas para diferentes potências de aquecimento e curvas interpoladoras foram geradas. Nas Figuras 4.17, 4.18, 4.19 e 4.20, estão representadas as curvas de evolução da vazão mássica e da temperatura média em função da potência para as configurações HHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente, para as três diferentes condições de pressão.

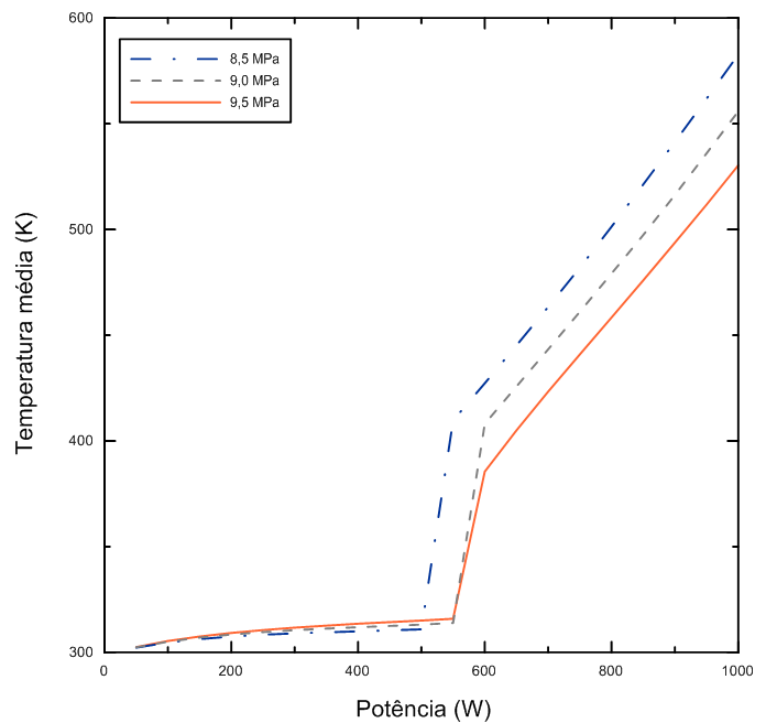
Todas as configurações apresentaram um efeito qualitativamente semelhante. Este efeito pode ser descrito da seguinte maneira: Quando varia-se a pressão de 8,5 a 9,0 MPa, retarda-se consideravelmente o surgimento de HTD, enquanto, quando varia-se a pressão de 9,0 para 9,5 MPa, o efeito é qualitativamente o mesmo, porém, menos pronunciado (praticamente imperceptível).

Os valores de vazão mássica máxima variam muito pouco com a pressão, embora sigam à seguinte ordem para todas as configurações estudadas: $\dot{m}_{8,5MPa} > \dot{m}_{9,0MPa} > \dot{m}_{9,5MPa}$.

Durante o regime de HTD, as vazões mássicas apresentam um substancial efeito da pressão para todas as configurações estudadas: quanto maior a pressão, maior é a vazão mássica e menor é a temperatura média para um determinado valor de potência.

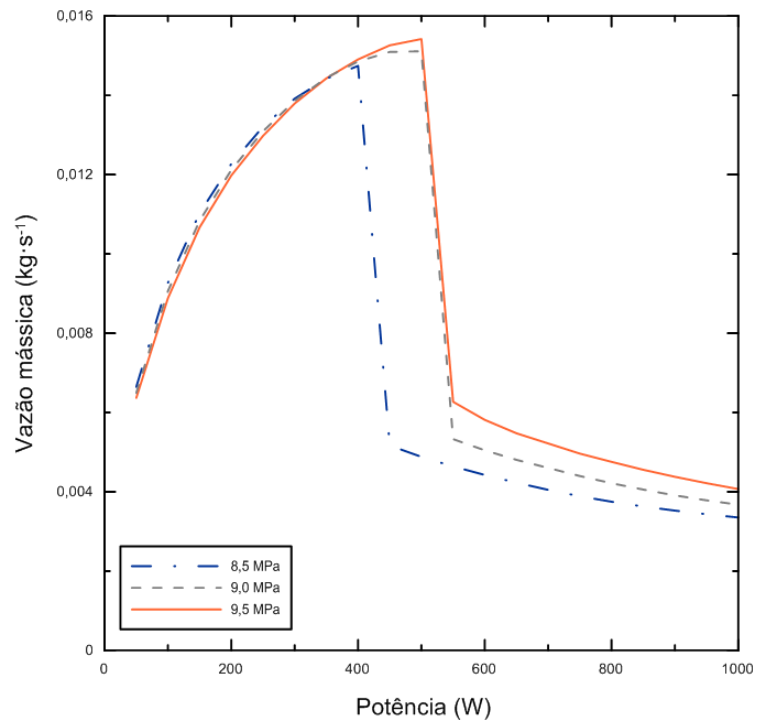


(a) Vazão mássica como função da potência

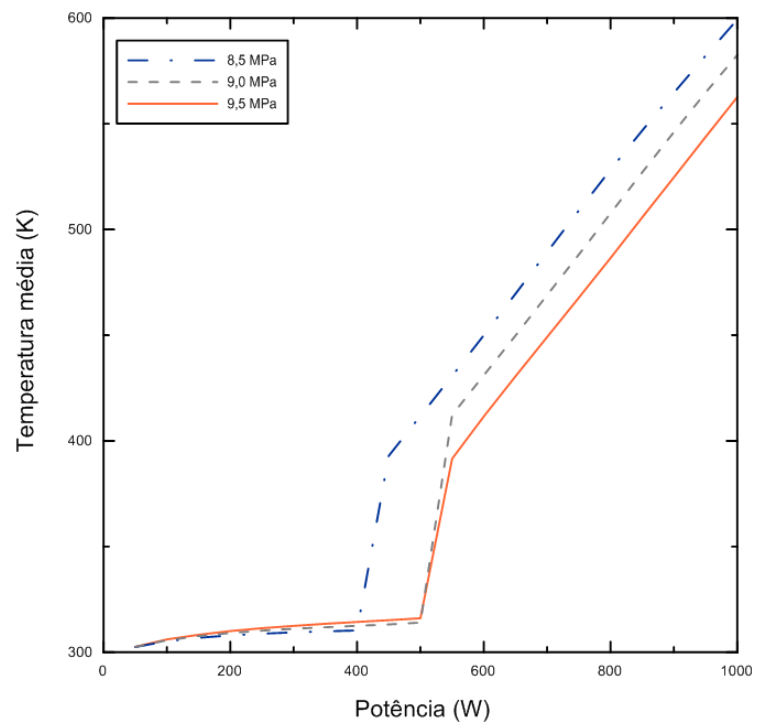


(b) Temperatura média como função da potência

Figura 4.17: Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito HHHC.

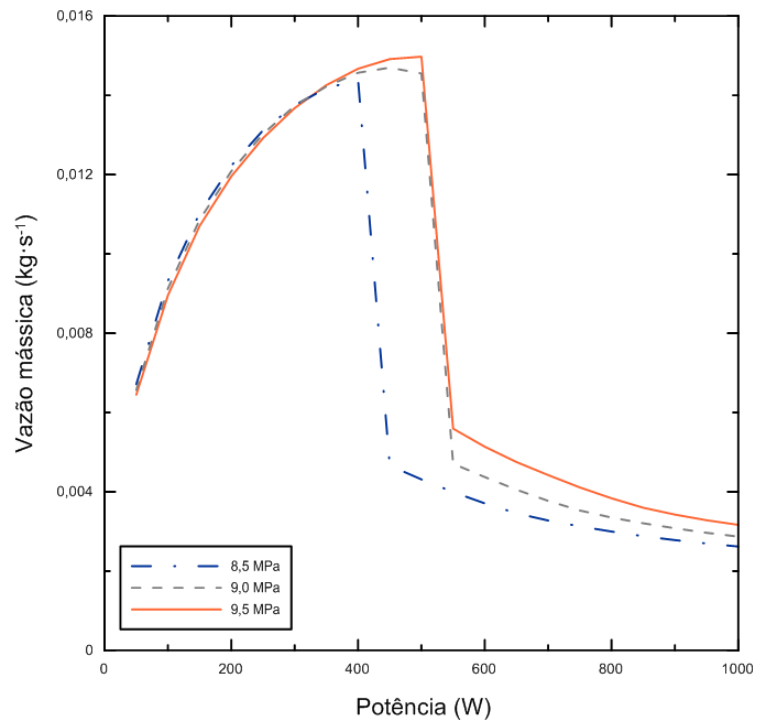


(a) Vazão mássica como função da potência

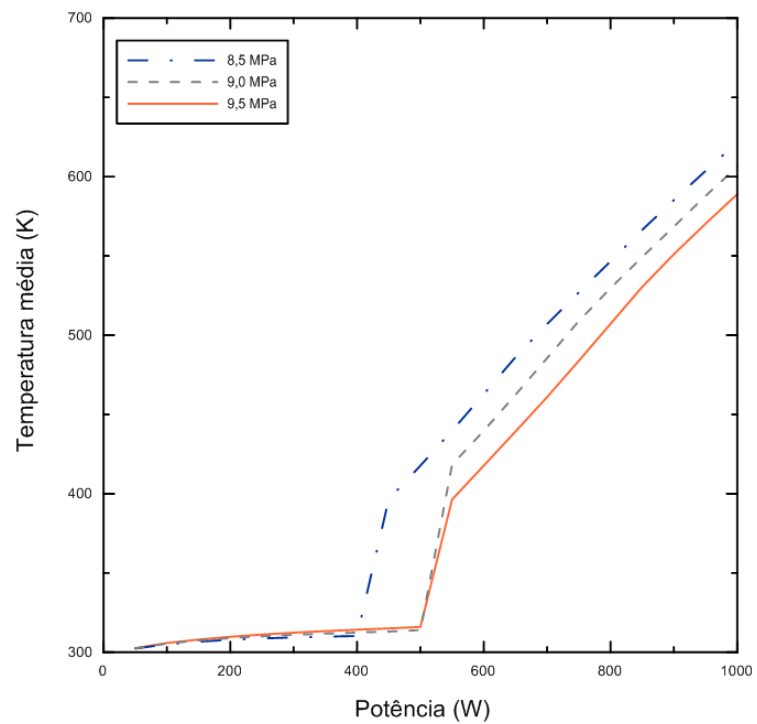


(b) Temperatura média como função da potência

Figura 4.18: Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito HHVC.

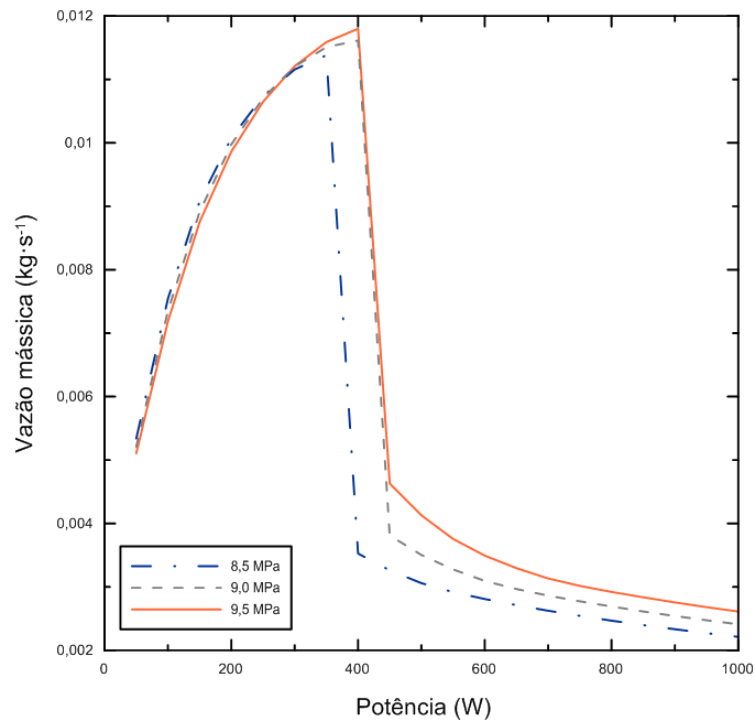


(a) Vazão mássica como função da potência

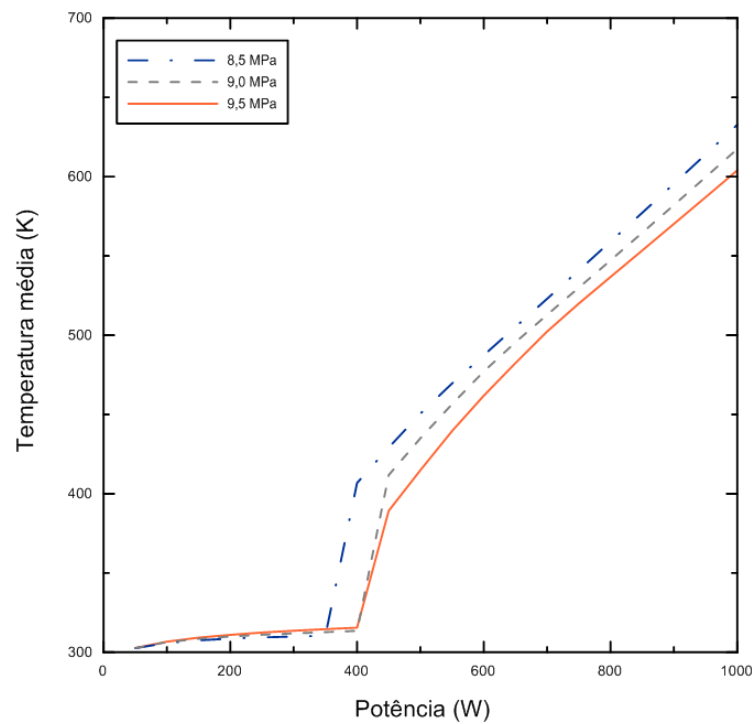


(b) Temperatura média como função da potência

Figura 4.19: Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito VHHC.



(a) Vazão mássica como função da potência



(b) Temperatura média como função da potência

Figura 4.20: Vazão mássica e temperatura como funções da potência para o circuito VHVC.

4.5 Análise do Fator de Atrito

A relação entre o fator de atrito de Darcy e o número de Reynolds foi investigada. A Figura 4.21 mostra esta relação, onde foi apresentada também a previsão feita pela correlação de YADAV *et al.* [2]. Como pode ser visto na figura, há uma boa concordância entre os resultados e as previsões, embora, para valores de Reynolds mais altos, a correlação apresenta diferenças maiores (podendo chegar até 14 %).

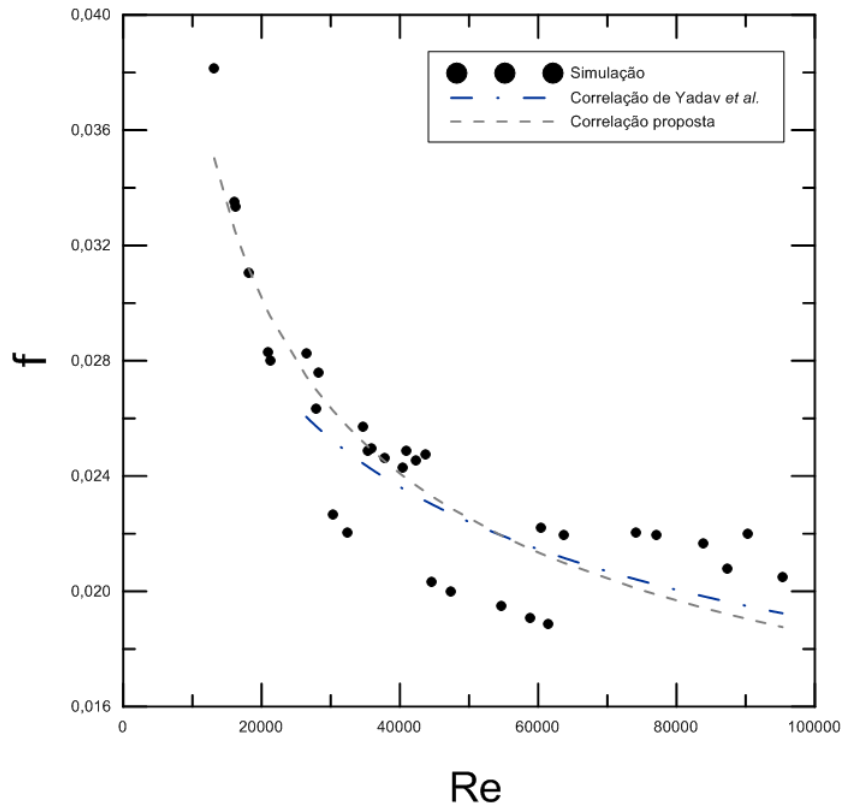


Figura 4.21: Fator de atrito de Darcy como função do número de Reynolds.

Uma nova correlação (Equação 4.1) foi desenvolvida através do ajuste dos dados provenientes das simulações. Foram consideradas todas as configurações de circuitos e todas as pressões estudadas neste trabalho. A correlação gerada apresenta coeficiente de determinação R^2 igual a 0,8723 e apresentou erros menores que a correlação de YADAV *et al.* [2] (cerca de até 11 %). Além disto, a correlação proposta é válida para números de Reynolds menores ($13.000 \leq Re \leq 96.000$).

$$f = (0,988 \ln Re - 4,0265)^{-2}. \quad (4.1)$$

4.6 Análise dos Campos de Temperatura e Velocidade

Campos de temperatura e velocidade foram analisados a fim de entender melhor as características do escoamento e transferência de calor. Os contornos de temperatura e velocidade das seções retas do ponto médio do aquecedor são representados nas Figuras 4.22, 4.23, 4.24 e 4.25, para os circuitos HHHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente. Foram analisados os perfis a 300 W e 800 W de potência de aquecimento a fim de observar os efeitos da HTD.

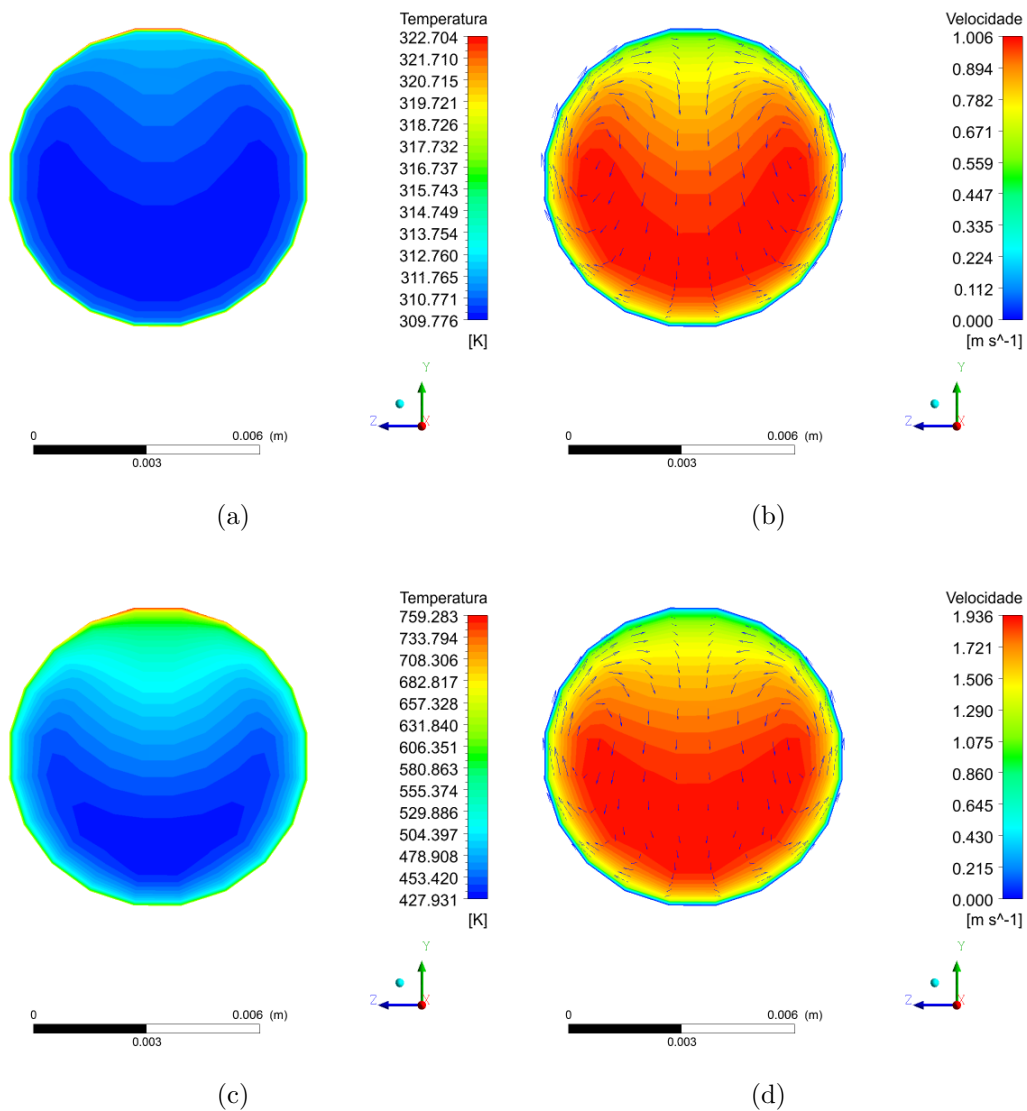


Figura 4.22: Campos de temperatura e velocidade para o circuito HHHC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.

É possível observar que os campos de temperatura e velocidade das seções retas

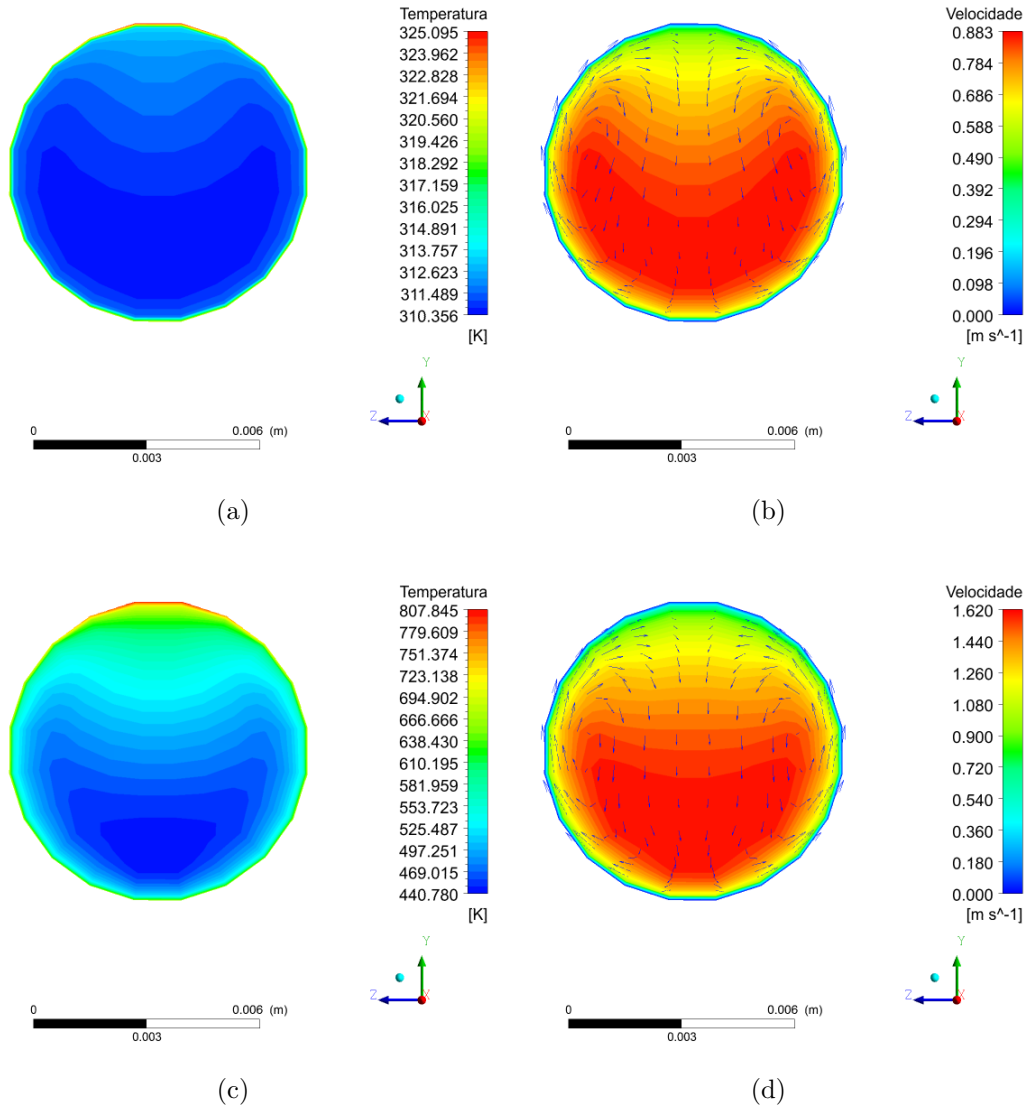


Figura 4.23: Campos de temperatura e velocidade para o circuito HHVC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.

dos circuitos HHHC e HHVC apresentam uma acentuada assimetria axial, enquanto, para os circuitos com aquecedores verticais (VHHHC e VHVC) os contornos são praticamente simétricos. Este fato já foi observado por outros pesquisadores e deve-se à ação combinada do empuxo e da gravidade paralelos à seção reta do escoamento. Nas Figuras 4.22, 4.23, 4.24 e 4.25 é possível observar as linhas de correntes do vetor velocidade nas seções. Para os circuitos com aquecedores horizontais, a convecção natural na seção reta do tubo é responsável por este padrão característico de movimento (ascendente na parte próxima à parede e descendente na parte central do tubo). Para os circuitos com aquecedores verticais, nota-se que as componentes do vetor velocidade normais ao eixo axial do tubo são desprezíveis. Pode-se notar nas mesmas figuras que, no regime de HTD, a variação da temperatura é muito maior.

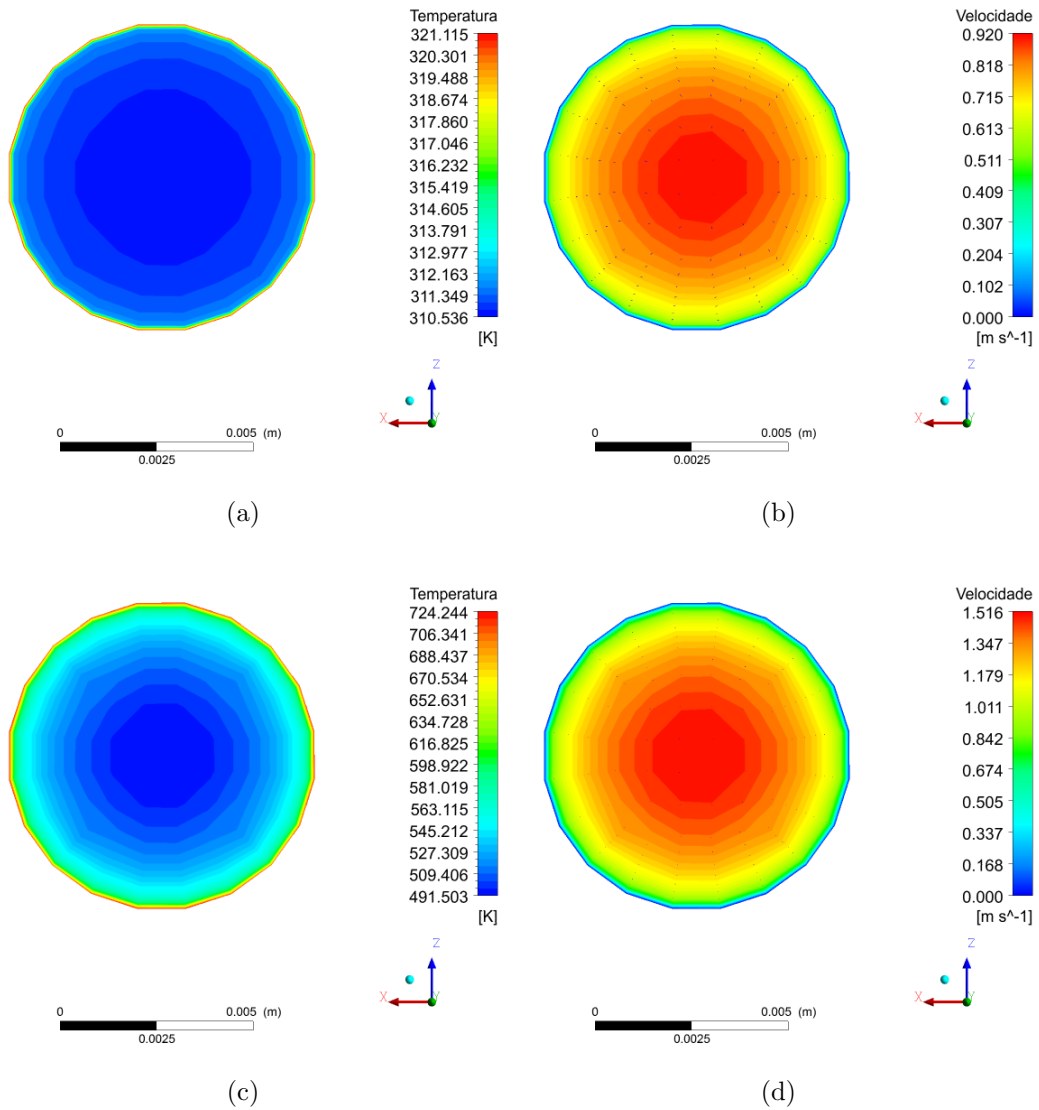


Figura 4.24: Campos de temperatura e velocidade para o circuito VVHC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.

Neste regime, o módulo da velocidade também aumenta consideravelmente, embora a vazão mássica diminua.

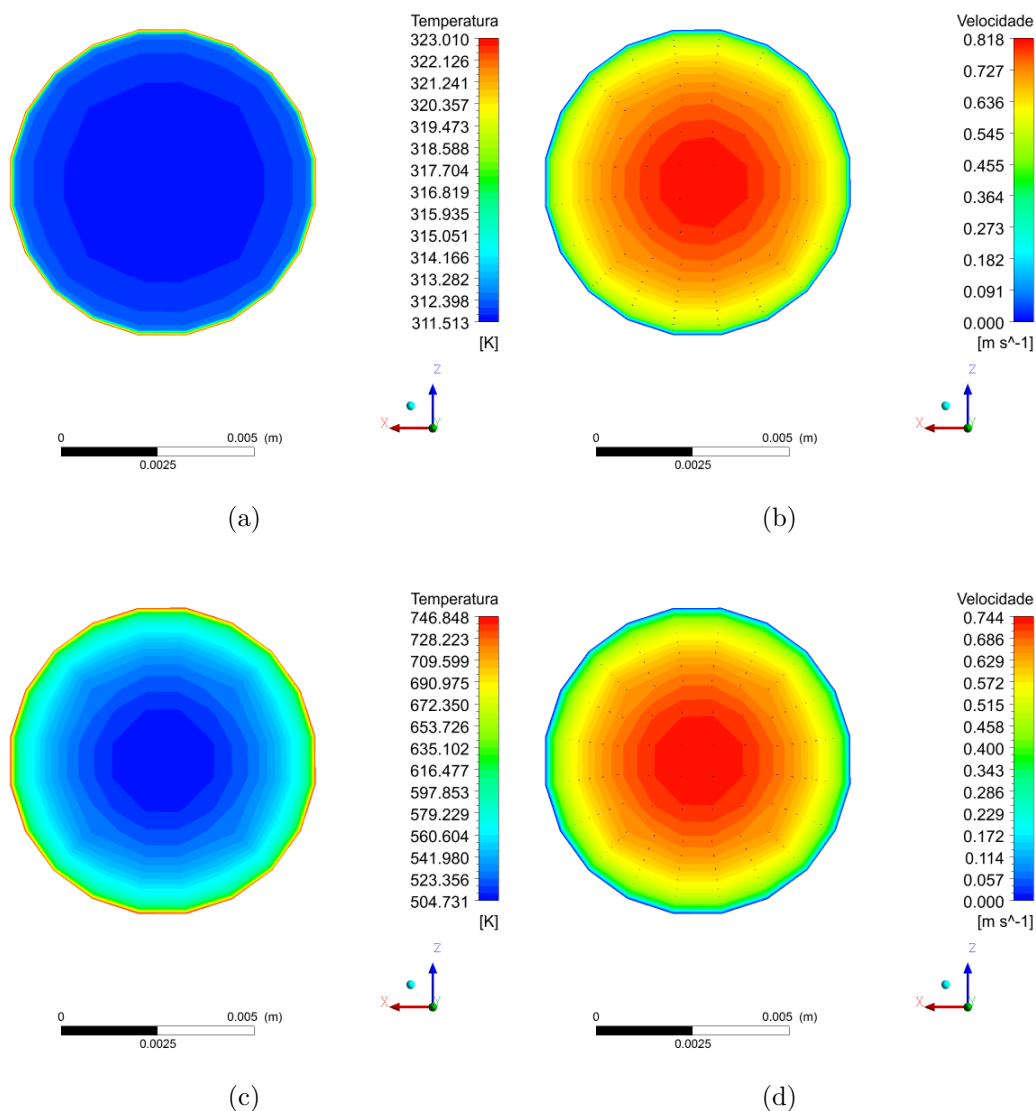
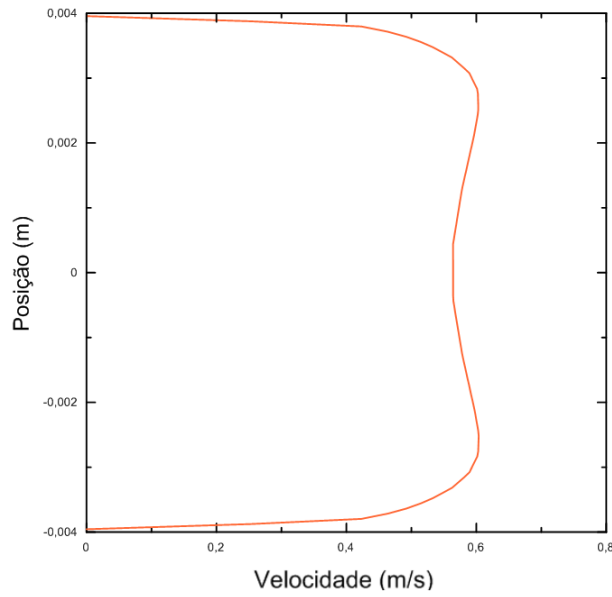


Figura 4.25: Campos de temperatura e velocidade para o circuito VHVC: (a) temperatura a 300 W, (b) velocidade a 300 W, (c) temperatura a 800 W, (d) velocidade a 800 W.

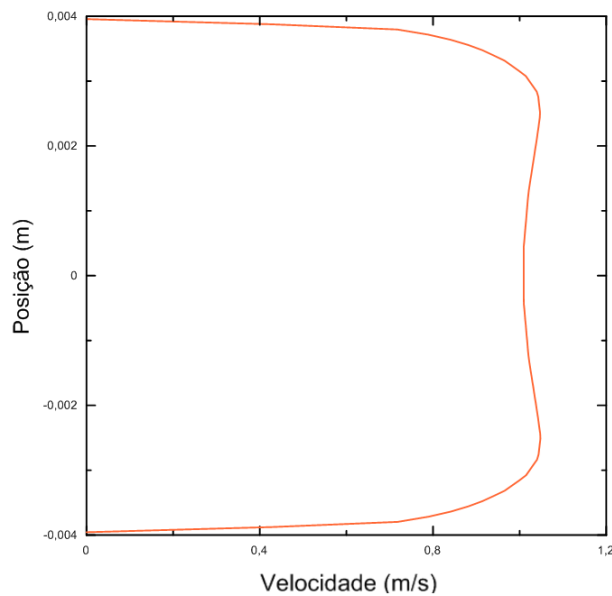
4.7 Análise dos Perfis de Velocidade

De forma a complementar a análise dos campos de velocidade feita na seção anterior, foram analisados também os perfis de velocidade, na linha que intersecta o plano central do NCL e a seção reta do ponto médio dos aquecedores. Nas figuras 4.26, 4.27, 4.28 e 4.29 são apresentados os perfis de velocidades, em função da posição na referenciada linha, para os circuitos HHHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente, a 300 e 800 W (antes e depois do surgimento da HTD). A posição nula simboliza o centro do tubo, enquanto valores negativos e positivos representam, respectivamente, as posições inferiores e superiores do tubo.

Pode-se observar que os circuitos com aquecedores horizontais apresentam um



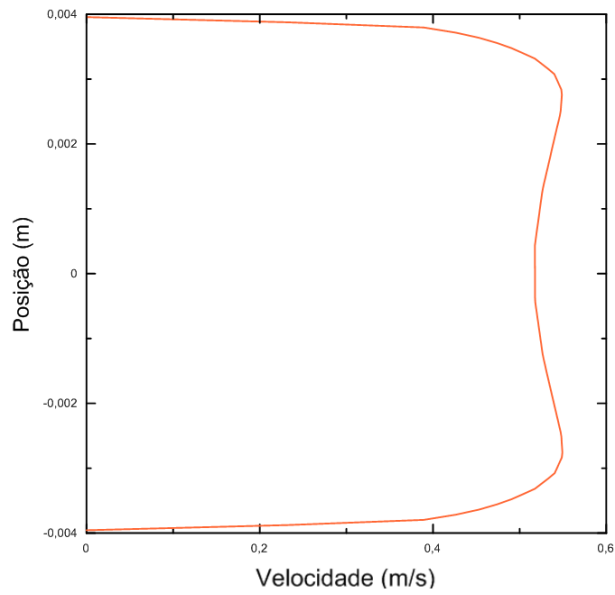
(a)



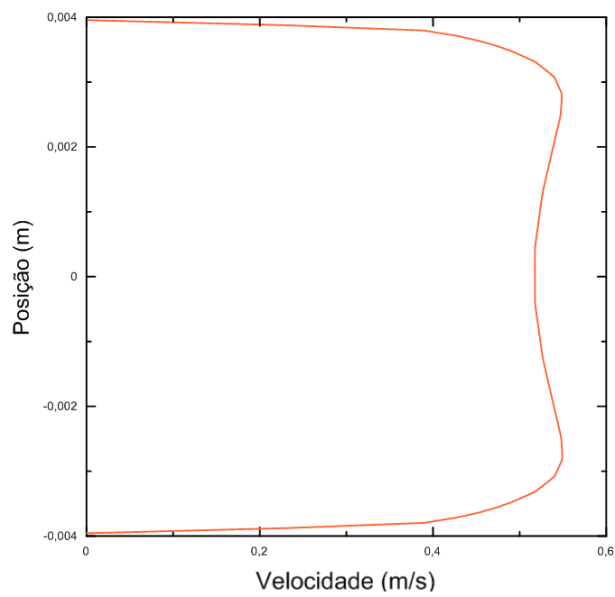
(b)

Figura 4.26: Perfil de velocidade para o circuito HHHC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.

perfil de velocidades com formato característico, onde a velocidade máxima não ocorre no centro, e sim, a uma distância mais próxima da parede. Este fenômeno é uma consequência da circulação natural na seção reta do tubo, onde as velocidades na parte central do tubo apresentam fortes contribuições das componentes paralelas à seção reta do escoamento. Para os circuitos com aquecedores verticais, observa-se o padrão característico dos escoamentos monofásicos tradicionais, onde a velocidade máxima ocorre na região central do tubo.

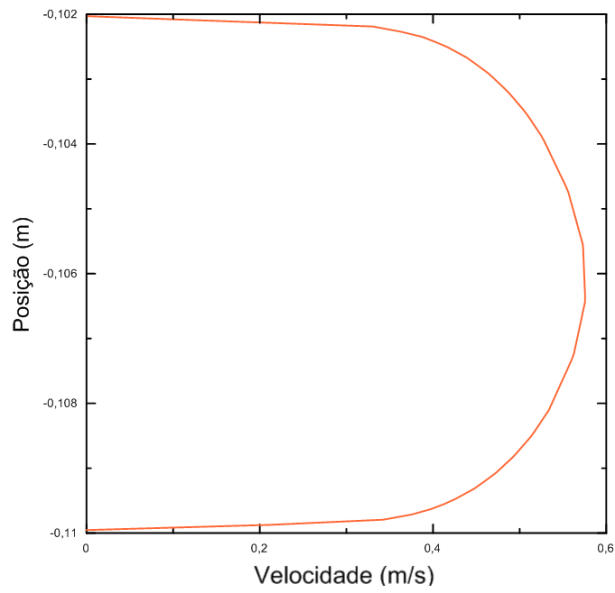


(a)

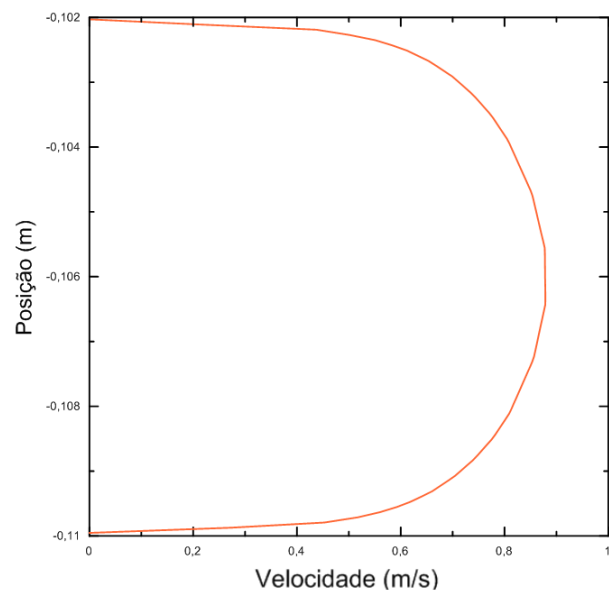


(b)

Figura 4.27: Perfil de velocidade para o circuito HHVC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.

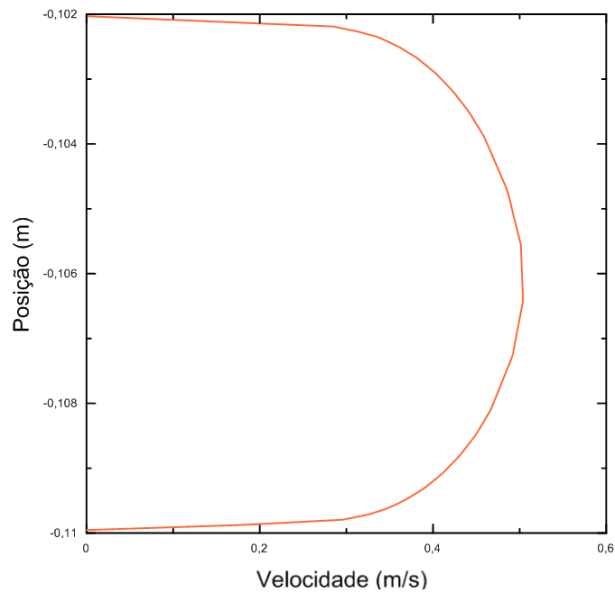


(a)

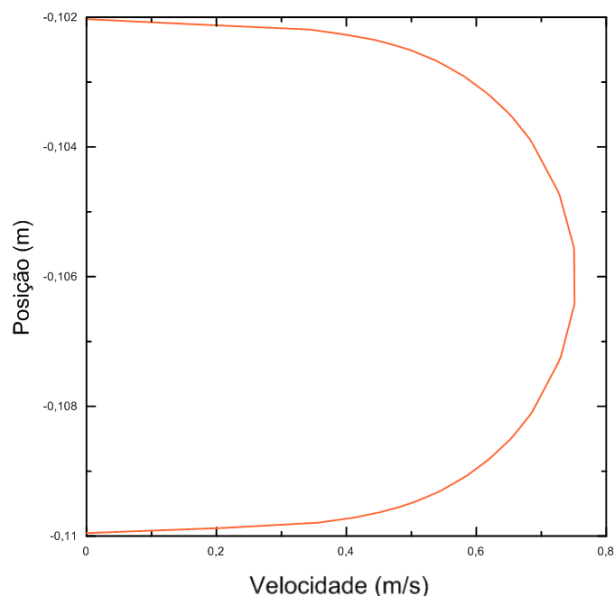


(b)

Figura 4.28: Perfil de velocidade para o circuito VHHC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.



(a)



(b)

Figura 4.29: Perfil de velocidade para o circuito VHVC: (a) a 300 W, (b) a 800 W.

4.8 Análise da Transferência de Calor

A transferência de calor foi avaliada através do número de Nusselt e os resultados foram comparados com as correlações de Dittus-Boelter e YADAV *et al.* [2]. Nas Figuras 4.30, 4.31, 4.32 e 4.33 é apresentada a relação entre o número de Nusselt e o número de Grashof modificado para os regimes de transferência de calor normal e em HTD, para os circuitos HHHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente.

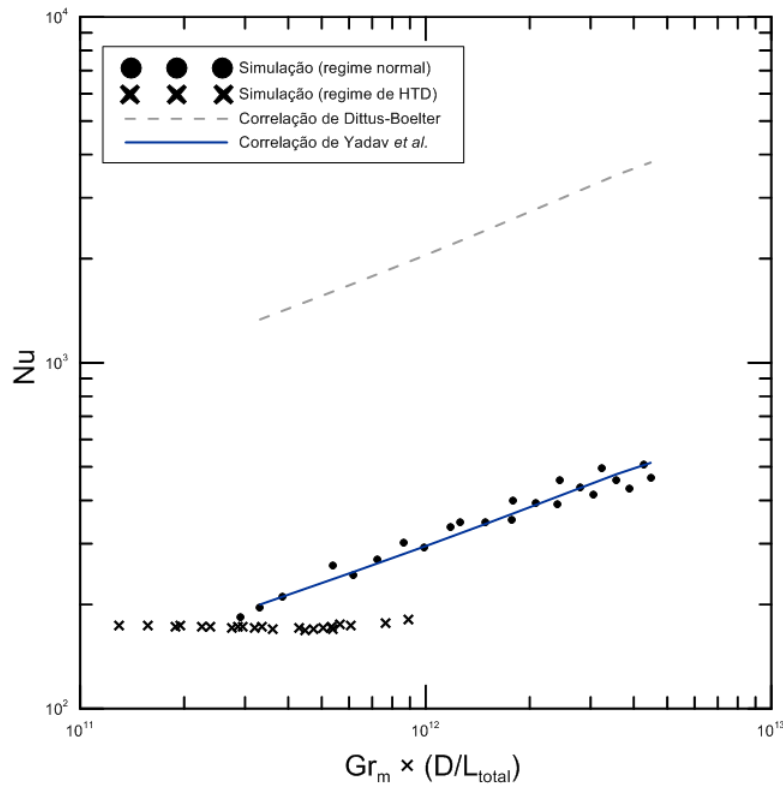


Figura 4.30: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito HHHC.

Observa-se, primeiramente, que a correlação de Dittus-Boelter não apresenta uma estimativa válida para o sistema estudado. Este comportamento era esperado e deve-se ao fato desta correlação ser destinada à convecção forçada. Por outro lado, a correlação de YADAV *et al.* [2] apresentou uma boa concordância com os resultados obtidos para as diferentes configurações. Entretanto, nota-se que esta correlação não é capaz de prever o número de Nusselt em regime de HTD.

Para o regime normal de transferência de calor, foi analisada a relação entre Nu , Gr_m e Pr . Correlações do tipo Nu em função de Gr e Pr foram geradas. As Figuras 4.34, 4.35, 4.36 e 4.37 mostram esta relação para os circuitos HHHC, HHVC, VHHC e VHVC, respectivamente. A regressão dos resultados em forma de plano é apresentada nestas figuras e as equações provenientes destes são apresentadas na Tabela 4.5.

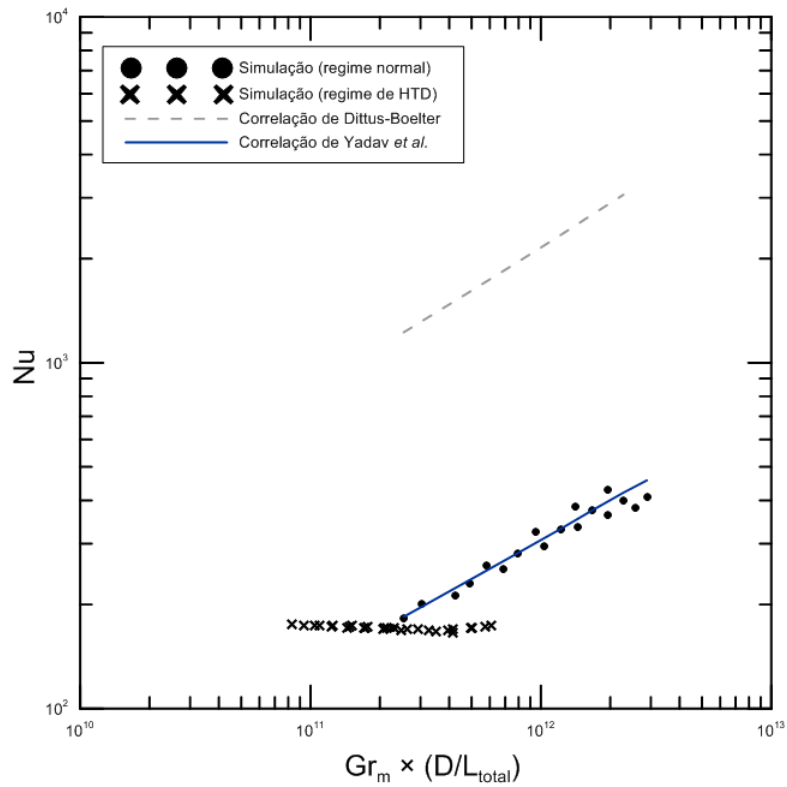


Figura 4.31: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito HHVC.

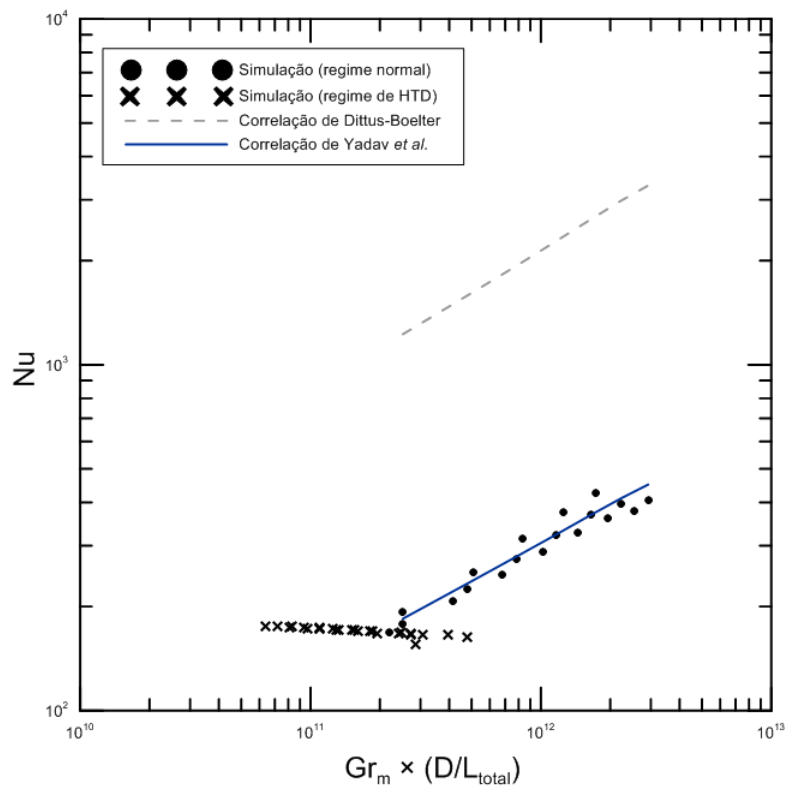


Figura 4.32: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito VHHC.

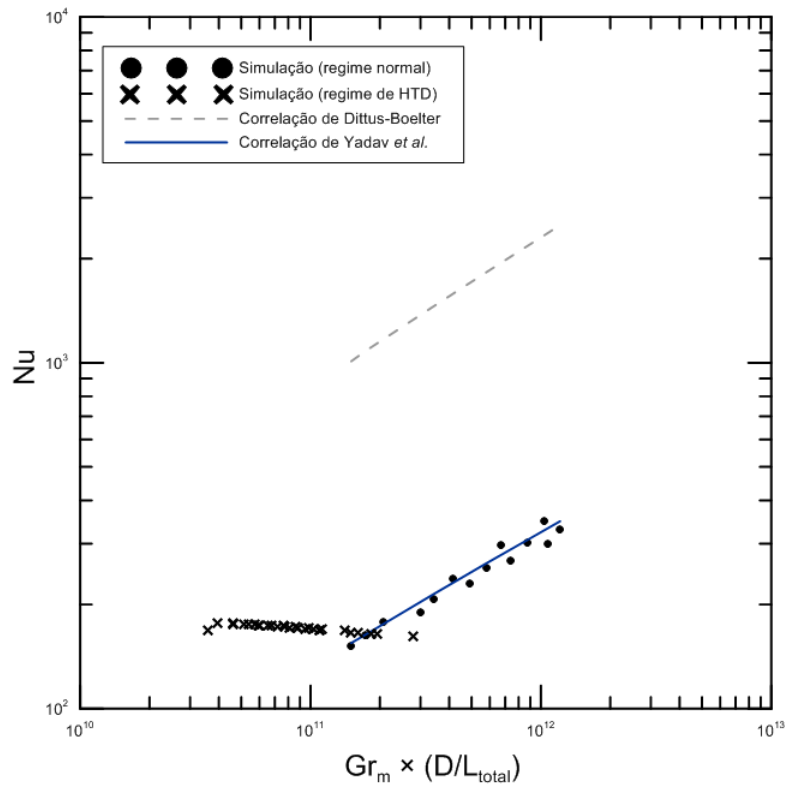


Figura 4.33: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado para o circuito VHVC.

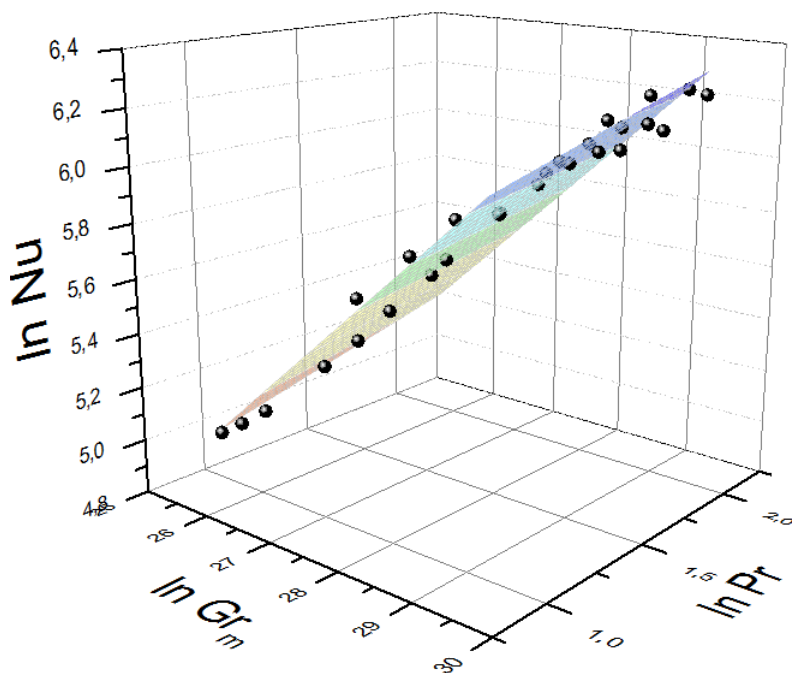


Figura 4.34: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito HHC.

Para o regime de HTD, constatou-se não ser passível de representação através de correlação do tipo $Nu = aGr^bPr^c$. Embora as Figuras 4.26, 4.27, 4.28 e 4.29

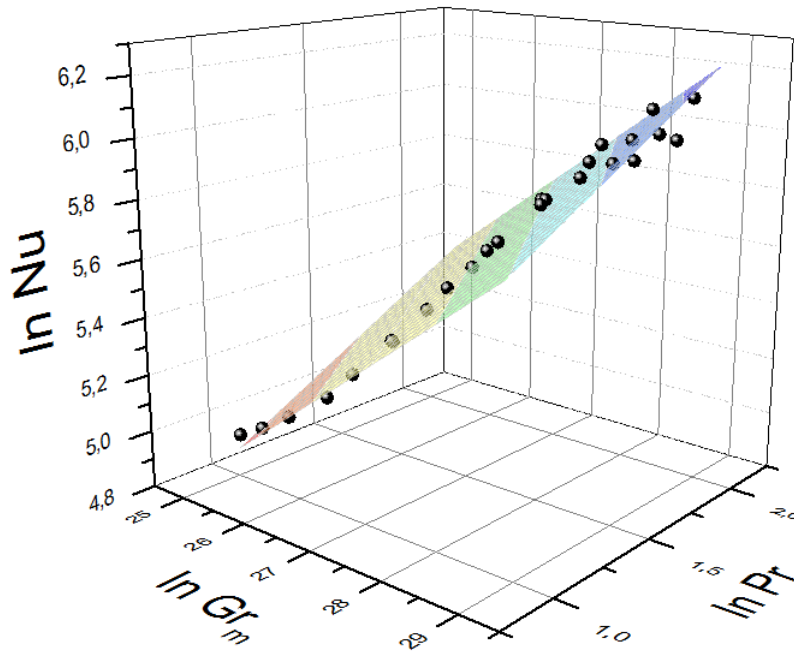


Figura 4.35: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito HHVC.

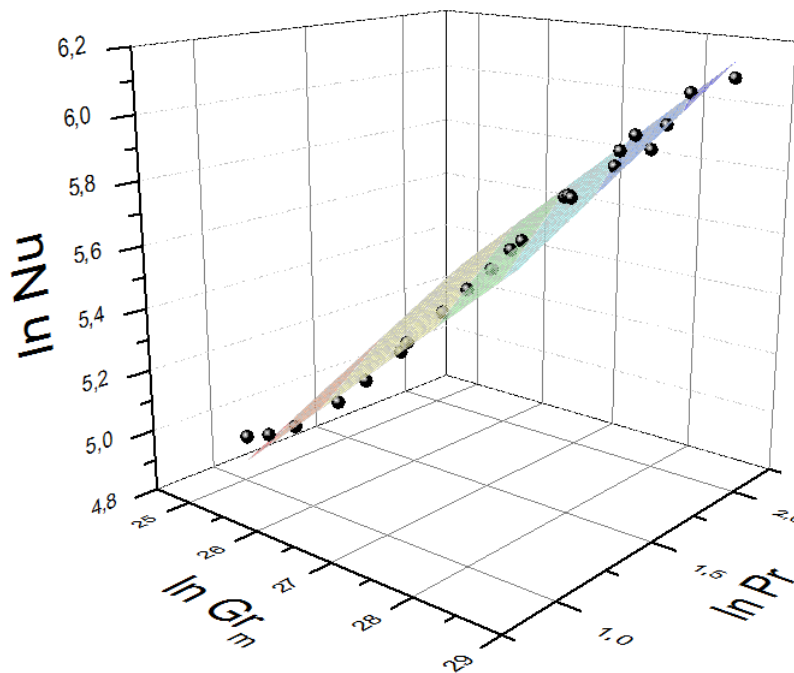


Figura 4.36: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito VHHC.

sugiram um comportamento ordenado dos pontos correspondentes a este regime, quando analisados sob uma escala ampliada, percebe-se que os pontos não apresentam ordenação e, quaisquer regressões apresentam coeficientes de determinação muito baixos (abaixo de 0,1). A razão deste comportamento é justamente a limitação da transferência de calor por convecção, característica deste regime.

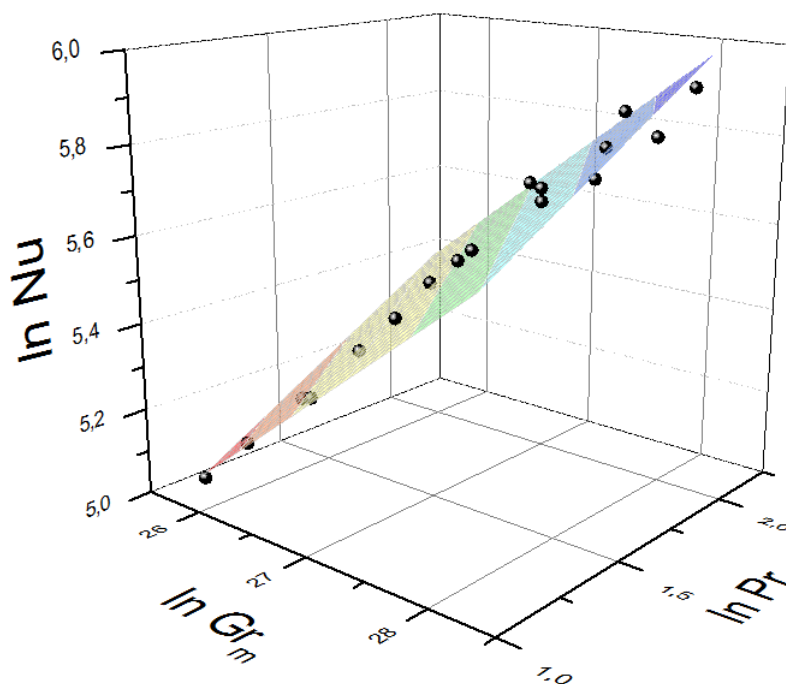


Figura 4.37: Número de Nusselt como função do número de Grashof modificado e do número de Prandtl para o circuito VHVC.

Tabela 4.5: Correlações propostas para o número de Nusselt.

Configuração	Correlação proposta	Coefficiente de determinação (R^2)
HHHC	$Nu = 0,2258(Gr_m/N_G)^{0,23898} Pr^{0,3789}$	0,9924
HHVC	$Nu = 0,1217(Gr_m/N_G)^{0,2717} Pr^{0,2072}$	0,9810
VHHC	$Nu = 0,4273(Gr_m/N_G)^{0,2131} Pr^{0,4272}$	0,9875
VHVC	$Nu = 0,1934(Gr_m/N_G)^{0,2440} Pr^{0,3590}$	0,9890

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

Neste trabalho, foi estudado o fenômeno da deterioração da transferência de calor (HTD) em circuitos de circulação natural de CO₂ supercrítico (SCNCL). Quatro das principais variações geométricas de um circuito de circulação natural retangular foram analisadas (HHHC, HHVC, VHHC e VHVC). Embora um número restrito de estudos na literatura tenha comparado as características termo-hidráulicas destas quatro configurações tradicionais, não foram identificados estudos que utilizassem modelos tridimensionais para tal. Além disto, existe, na literatura, uma escassez de correlações empíricas para a transferência de calor que sejam válidas para circuitos de circulação natural. Dentre as poucas correlações existentes, nenhuma que relacionasse a transferência de calor com o número de Grashof foi encontrada. Este trabalho procurou cobrir esta lacuna provendo uma análise das particularidades físicas de cada configuração do circuito e, por fim, uma série de correlações empíricas que satisfazem o problema da transferência de calor para as principais configurações existentes de um SCNCL retangular.

Neste capítulo, serão apresentadas as principais conclusões obtidas, tão bem quanto as sugestões propostas para pesquisas futuras neste tema.

5.1 Conclusões

Todas as quatro geometrias estudadas obtiveram soluções convergidas em estado estacionário para a faixa de potência de 0 a 1000 W e para as pressões de 8,5, 9,0 e 9,5 MPa. O fenômeno da deterioração da transferência de calor pôde ser observado em todos os casos estudados. Em uma primeira etapa, incrementos de potência causaram elevação da vazão mássica de circulação natural em todos os casos estudados, até que um ponto máximo fosse atingido. A partir deste ponto, o regime de HTD se estabeleceu, caracterizado pela queda abrupta da vazão mássica e pelo acentuado aumento da temperatura média. Depois disto, a vazão continuou a cair lentamente com a temperatura até o limite de observação do presente estudo. Como

esperado, o circuito HHC apresentou a maior vazão de circulação natural dentre as demais geometrias, enquanto o circuito VHVC apresentou a menor vazão. Os circuitos HHVC e VHVC apresentaram comportamentos muito semelhantes entre si até o surgimento do regime de HTD, onde o HHVC apresentou uma maior vazão mássica de circulação e, conseqüentemente, um menor incremento da temperatura média.

As correlações de SWAPNALEE *et al.* [1] e YADAV *et al.* [2] para o número de Reynolds, em função do número de Grashof, apresentaram boa concordância com os resultados da simulação para os circuitos HHC e HHVC. Por outro lado, para os circuitos VHHC e VHVC, estas correlações forneceram valores de Reynolds consideravelmente maiores do que os observados. Foram propostas quatro correlações para Re em função de Gr_m , uma para cada configuração individual do circuito.

Foi feita uma análise do fator de atrito f em função de Re utilizando dados de todas as configurações e pressões estudadas. A correlação de YADAV *et al.* [2] apresentou uma concordância razoável com os dados das simulações para baixos números de Reynolds, embora, esta correlação tenha se mostrado bastante imprecisa para números de Reynolds mais elevados. Uma nova correlação foi proposta e esta, além de apresentar erros menores, que pode ser utilizada para uma faixa de Re mais baixa.

Através da análise dos campos de temperatura e velocidade das seções retas do escoamento, pôde-se concluir que o modelo tridimensional é o mais adequado para a análise dos circuitos estudados, principalmente no caso dos circuitos HHVC e HHC, onde observa-se um alto nível de assimetria axial.

No que diz respeito à transferência de calor, concluiu-se que, até mesmo para baixos números de Grashof, as correlações voltadas para convecção forçada não fornecem boas estimativas para o número de Nusselt. Enquanto isto, a correlação de YADAV *et al.* [2] apresentou boa concordância com os resultados obtidos nas simulações. Correlações empíricas foram propostas para a estimativa de Nu em função de Gr_m e Pr , levando em conta a configuração do circuito. Estas correlações devem fornecer estimativas mais precisas para a transferência de calor em sistemas com Pr e Gr_m dentro da faixa considerada neste estudo e, possivelmente, para valores além desta faixa.

Por fim, a fluidodinâmica computacional tem se mostrado capaz de prever com elevada exatidão e baixo custo, o comportamento termo-hidráulico dos sistemas de circulação natural, como pode ser visto na literatura. Modelos bi e tridimensionais são especialmente úteis para a verificação de equações empíricas, que podem servir de base para o desenvolvimento de modelos unidimensionais mais simples.

5.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Para trabalhos futuros sugere-se que geometrias mais realistas sejam analisadas, como estruturas híbridas do tipo NCL com feixe de varetas combustíveis na seção de aquecimento, por exemplo. Este tipo de análise configura uma transição entre modelos de circuitos primários e sistemas passivos de remoção de calor residuais reais. Análises deste tipo foram realizadas utilizando água como fluido refrigerante e ajudaram a consolidar o conhecimento acerca dos sistemas de remoção passiva de calor existentes hoje.

Como continuação do presente trabalho, sugere-se a análise do efeito da temperatura do sumidouro de calor sobre as variáveis consideradas e a análise da estabilidade utilizando um modelo transiente. Outras implementações viáveis são o estudo da perda de carga por atrito no sistema e a colocação de aletas nos aquecedores e resfriadores do circuito a fim de estudar o efeito sobre a transferência de calor e a perda de carga do escoamento.

Referências Bibliográficas

- [1] SWAPNALEE, B. T., VIJAYAN, P. K., SHARMA, M., et al. “Steady state flow and static instability of supercritical natural circulation loops”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 245, pp. 99–112, 2012.
- [2] YADAV, A. K., RAM GOPAL, M., BHATTACHARYYA, S. “CO2 based natural circulation loops: New correlations for friction and heat transfer”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 55, n. 17-18, pp. 4621–4630, 2012.
- [3] CHATOORGOON, V., VOODI, A., UPADHYE, P. “The stability boundary for supercritical flow in natural-convection loops”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 235, n. 24, pp. 2581–2593, dec 2005.
- [4] CHEN, L., DENG, B.-L., JIANG, B., et al. “Thermal and hydrodynamic characteristics of supercritical CO2 natural circulation in closed loops”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 257, pp. 21–30, 2013.
- [5] CHEN, L., ZHANG, X.-R., JIANG, B. “Effects of Heater Orientations on the Natural Circulation and Heat Transfer in a Supercritical CO2 Rectangular Loop”, *Journal of Heat Transfer*, v. 136, n. 5, pp. 052501, 2014.
- [6] SARKAR, M. K., BASU, D. N. “Working regime identification for natural circulation loops by comparative thermalhydraulic analyses with three fluids under identical operating conditions”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 293, pp. 187–195, 2015.
- [7] GOLDBERG, S. M., ROSNER, R. *Nuclear Reactors: Generation to Generation*. Relatório técnico, American Academy of Arts & Sciences, 2011.
- [8] JOYCE, M. *Nuclear Engineering - A Conceptual Introduction to Nuclear Power*. Butterworth-Heinemann, 2018.
- [9] SCHULZ, T. “Westinghouse AP1000 advanced passive plant”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 236, n. 14-16, pp. 1547–1557, 2006.

- [10] AHN, Y., BAE, J., KIM, M., et al. “REVIEW OF SUPERCRITICAL CO₂ POWER CYCLE TECHNOLOGY AND CURRENT STATUS OF RESEARCH AND DEVELOPMENT”, *Nuclear Engineering and Technology*, v. 47, pp. 647–661, 2015.
- [11] JAIN, P. K., RIZWAN-UDDIN. “Numerical analysis of supercritical flow instabilities in a natural circulation loop”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 238, n. 8, pp. 1947–1957, 2008.
- [12] RAO, N. T., OUMER, A., JAMALUDIN, U. “State-of-the-art on flow and heat transfer characteristics of supercritical CO₂ in various channels”, *The Journal of Supercritical Fluids*, v. 116, pp. 132–147, 2016.
- [13] SARKAR, M. K., TILAK, A. K., BASU, D. N. “A state-of-the-art review of recent advances in supercritical natural circulation loops for nuclear applications”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 73, pp. 250–263, 2014.
- [14] ARCHANA, V., VAIDYA, A., VIJAYAN, P. “Numerical modeling of supercritical CO₂ natural circulation loop”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 293, pp. 330–345, 2015.
- [15] BAZARGAN, M., MOHSENI, M. “The significance of the buffer zone of boundary layer on convective heat transfer to a vertical turbulent flow of a supercritical fluid”, *The Journal of Supercritical Fluids*, v. 51, n. 2, pp. 221–229, 2009.
- [16] CHEN, L., DENG, B.-L., ZHANG, X.-R. “Experimental investigation of CO₂ thermosyphon flow and heat transfer in the supercritical region”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 64, pp. 202–211, 2013.
- [17] CHEN, L., DENG, B.-L., ZHANG, X.-R. “Experimental study of trans-critical and supercritical CO₂ natural circulation flow in a closed loop”, *Applied Thermal Engineering*, v. 59, n. 1-2, pp. 1–13, 2013.
- [18] CHEN, L., ZHANG, X.-R. “Simulation of Heat Transfer and System Behavior in a Supercritical CO₂ Based Thermosyphon: Effect of Pipe Diameter”, *Journal of Heat Transfer*, v. 133, n. 12, pp. 122505, 2011.
- [19] SARKAR, M. K., BASU, D. N. “Numerical appraisal on the suitability of supercritical condition in natural circulation loop with isothermal boundary conditions”, *International Journal of Thermal Sciences*, v. 111, pp. 30–40, 2017.

- [20] SARKAR, M. K., BASU, D. N. “Influence of geometric parameters on thermallyhydraulic characteristics of supercritical CO₂ in natural circulation loop”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 324, pp. 402–415, 2017.
- [21] ARCHANA, V., VAIDYA, A., VIJAYAN, P. “Flow Transients in Supercritical CO₂ Natural Circulation Loop”, *Procedia Engineering*, v. 127, pp. 1189–1196, 2015.
- [22] BASU, D. N., BHATTACHARYYA, S., DAS, P. “Dynamic response of a single-phase rectangular natural circulation loop to different excitations of input power”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 65, pp. 131–142, 2013.
- [23] CHEN, L., ZHANG, X.-R., CAO, S., et al. “Study of trans-critical CO₂ natural convective flow with unsteady heat input and its implications on system control”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 55, n. 23-24, pp. 7119–7132, 2012.
- [24] CHEN, L., ZHANG, X.-R., DENG, B.-L., et al. “Effects of inclination angle and operation parameters on supercritical CO₂ natural circulation loop”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 265, pp. 895–908, 2013.
- [25] KUMAR, K. K., GOPAL, M. R. “Effect of system pressure on the steady state performance of a CO₂ based natural circulation loop”, *Applied Thermal Engineering*, v. 29, n. 16, pp. 3346–3352, 2009.
- [26] KUMAR, K. K., GOPAL, M. R. “Experimental studies on CO₂ based single and two-phase natural circulation loops”, *Applied Thermal Engineering*, v. 31, n. 16, pp. 3437–3443, 2011.
- [27] SARKAR, M. K. S., BASU, D. N. “Numerical Comparison of Thermallyhydraulic Aspects of Supercritical Carbon Dioxide and Subcritical Water-Based Natural Circulation Loop”, *Nuclear Engineering and Technology*, v. 49, n. 1, pp. 103–112, 2017.
- [28] SHARMA, M., VIJAYAN, P., PILKHWAL, D., et al. “Steady state and stability characteristics of natural circulation loops operating with carbon dioxide at supercritical pressures for open and closed loop boundary conditions”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 265, pp. 737–754, 2013.
- [29] YADAV, A. K., RAM GOPAL, M., BHATTACHARYYA, S. “CFD analysis of a CO₂ based natural circulation loop with end heat exchangers”, *Applied Thermal Engineering*, v. 36, pp. 288–295, 2012.

- [30] YADAV, A. K., GOPAL, M. R., BHATTACHARYYA, S. “Effect of Tilt Angle on Subcritical/Supercritical Carbon Dioxide-Based Natural Circulation Loop With Isothermal Source and Sink”, *Journal of Thermal Science and Engineering Applications*, v. 8, n. 1, pp. 011007, 2015.
- [31] YADAV, A. K., BHATTACHARYYA, S., GOPAL, M. R. “Optimum Operating Conditions for Subcritical/Supercritical Fluid-Based Natural Circulation Loops”, *Journal of Heat Transfer*, v. 138, n. 11, pp. 112501, 2016.
- [32] ZHANG, X.-R., CHEN, L., YAMAGUCHI, H. “Natural convective flow and heat transfer of supercritical CO₂ in a rectangular circulation loop”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 53, n. 19-20, pp. 4112–4122, 2010.
- [33] TODREAS, N. E., KAZIMI, M. S. *Nuclear Systems I - Thermal Hydraulic Fundamentals*. 1990.
- [34] ANSYS. *ANSYS Fluent User’s Guide*. Canonsburg, PA, ANSYS, Inc., 2013.
- [35] LAUNDER, B., SPALDING, D. “The numerical computation of turbulent flows”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 3, n. 2, pp. 269–289, 1974.
- [36] SPAN, R., WAGNER, W. “A New Equation of State for Carbon Dioxide Covering the Fluid Region from the Triple-Point Temperature to 1100 K at Pressures up to 800 MPa”, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, v. 25, n. 6, pp. 1509–1596, 1996.
- [37] WANG, Z., SUN, B., YAN, L. “Improved Density Correlation for Supercritical CO₂”, *Chemical Engineering & Technology*, v. 38, 2015.
- [38] HERNANDEZ-PEREZ, V., ABDULKADIR, M., AZZOPARDI, B. J. “Grid Generation Issues in the CFD Modelling of Two-Phase Flow in a Pipe”, *Journal of Computational Multiphase Flows*, v. 3, n. 1, pp. 13–26, 2011.
- [39] ANSYS. *ANSYS Fluent Theory Guide*. Canonsburg, PA, ANSYS, Inc., 2013.
- [40] SPALART, P. R. “Philosophies and fallacies in turbulence modeling”, *Progress in Aerospace Sciences*, v. 74, pp. 1–15, 2015.
- [41] INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. LTC Editora, 2002.

- [42] CELIK, I. B., GHIA, U., ROACHE, P. J., et al. “Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications”, *Journal of Fluids Engineering*, v. 130, n. 7, pp. 078001, 2008.

Apêndice A

Método dos Volumes Finitos

Neste apêndice serão discutidos de maneira breve os principais fundamentos do método dos volumes finitos conforme apresentados por CELIK *et al.* [42] adaptados à notação descrita em ANSYS [39].

A equação da conservação de uma grandeza escalar arbitrária ϕ é definida por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \right) + S_\phi, \quad (\text{A.1})$$

onde Γ_{eff} e S_ϕ representam, respectivamente, o coeficiente de difusão e o termo fonte de ϕ .

Esta notação é muito útil pois além das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia — que podem ser obtidas pela substituição de ϕ por um dos termos expressos na tabela A.1 —, a avaliação de outras grandezas escalares pode ser necessária em determinadas aplicações em CFD.

Tabela A.1: Valor de ϕ de acordo com variável a ser considerada.

Variável	ϕ
Continuidade	1
Momento em x	u
Momento em y	v
Momento em z	w
Energia	h

Como mencionado no Capítulo 3, dentro da abordagem do MVF, as equações de conservação são integradas sobre os volumes de controle que consistem nos elementos da malha criada. A integração da Equação A.1 sobre um volume de controle genérico, considerando a aplicação do Teorema da Divergência de Gauss sobre o segundo e o último termo, é feita da seguinte maneira:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho u_j \phi dn_j = \int_S \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_V S_\phi dV, \quad (\text{A.2})$$

onde V é o volume e S é a superfície do volume de controle. dn_j é a i -ésima componente diferencial do vetor normal à superfície.

Ao serem integradas, as equações da conservação da massa, da quantidade de movimento e da grandeza escalar arbitrária ϕ assumem, respectivamente, as seguintes formas:

$$V \left(\frac{\rho - \rho^o}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} V \left(\frac{\rho u_i - \rho^o u_i^o}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} (u_i)_{ip} &= \sum_{ip} (p \Delta n_i)_{ip} \\ &+ \sum_{ip} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{ip} + \overline{S_{u_i}} V, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$V \left(\frac{\rho \phi - \rho^o \phi^o}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} \phi_{ip} = \sum_{ip} \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{ip} + \overline{S_\phi} V. \quad (\text{A.5})$$

Aqui, por convenção, o sentido adotado foi anti-horário. O índice ip representa o ponto de integração. O índice o indica o valor no tempo $t = 0$. Δt é o espaço de tempo e a seguinte relação é válida para a vazão mássica:

$$\dot{m}_{ip} = (\rho u_j \Delta n_j)_{ip}. \quad (\text{A.6})$$

Ainda, nas Equações A.4 e A.5, Δn_i é o vetor normal à superfície do volume de controle, em sua forma discreta, representado por:

$$n = \left(\frac{\Delta y}{\Delta S} \right) i - \left(\frac{\Delta x}{\Delta S} \right) j, \quad (\text{A.7})$$

onde ΔS é o comprimento de uma face do subvolume de controle.

A.1 Funções de Forma

No código do ANSYS Fluent, as soluções e propriedades ficam armazenadas nos nós. Entretanto, a interpolação e a avaliação dos campos de soluções e gradientes nos demais pontos de integração é necessária. Para este fim, o software utiliza funções de forma para promover aproximações para outros pontos do domínio de um determinado elemento. Para uma variável φ , a função de forma realiza a seguinte operação:

$$\varphi = \sum_{i=1}^{N_{\text{nó}}} N_i(\xi, \eta, \varsigma) \varphi_i, \quad (\text{A.8})$$

no qual N_i é o i -ésimo nó do elemento. ξ , η e ς são variáveis paramétricas quaisquer.

As funções de forma apresentam a seguinte propriedade:

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nó}}} N_i = 1, \quad \text{e no nó } j: \quad N_i(\xi, \eta, \varsigma) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

A.2 Termos Difusivos

As derivadas que aparecem nos termos difusivos das Equações A.4 e A.5 são avaliados por meio de funções de forma. Por exemplo, para a derivada de ϕ na direção x tomada no ponto de integração ip , temos:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ip} = \sum_n \left. \frac{\partial N_n}{\partial x} \right|_{ip} \phi_n. \quad (\text{A.9})$$

As derivadas parciais das funções de forma em função das coordenadas (x, y, z) podem ser obtidas por meio da seguinte transformação:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \varsigma} & \frac{\partial y}{\partial \varsigma} & \frac{\partial z}{\partial \varsigma} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N}{\partial \varsigma} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

A.3 Termo advectivo

Os termos advectivos que surgem nas Equações A.4 e A.5, por não serem lineares em suas coordenadas paramétricas, devem ser avaliados por meio da seguinte equação:

$$\phi_{pi} = \phi_{up} + \kappa \frac{\Delta \phi}{\Delta S} \cdot \Delta S, \quad (\text{A.11})$$

onde ϕ_{up} é o valor de ϕ no nó a montante, S é a coordenada direcional. κ e $\frac{\Delta \phi}{\Delta S}$ são escolhidos de acordo com o esquema de interpolação.

A.4 Estratégia de solução

Considerando as soluções calculadas para a variável arbitrária ϕ em cada elemento da malha, pode-se avaliar ϕ para um volume genérico, centrado em P , através do seguinte sistema de equações:

$$A_P \phi_P = \sum_{NB} A_{nb} \phi_{NB} + B_P, \quad (\text{A.12})$$

onde A_P é a matriz de coeficientes relativos ao volume centrado em P , o índice NB refere-se aos nós adjacentes à P , nb refere-se aos valores nas interfaces que conectam P aos seus vizinhos enquanto B_P contém os demais termos, incluindo o termo fonte.

Em geral, a maior dificuldade existente na Equação A.12 encontra-se na solução da quantidade de movimento, onde ϕ é uma grandeza vetorial (u_i) e as componentes do vetor velocidade e a pressão apresentam-se de maneira implícita em todos os coeficientes. Existem duas possibilidades para a solução deste problema: resolvê-lo de forma explícita, segregando os termos de velocidade e pressão, ou resolvê-lo de forma implícita, isto é, com o acoplamento da velocidade e da pressão.

Neste trabalho foi adotado o método acoplado de solução, cujo esquemático é apresentado na Figura A.1.

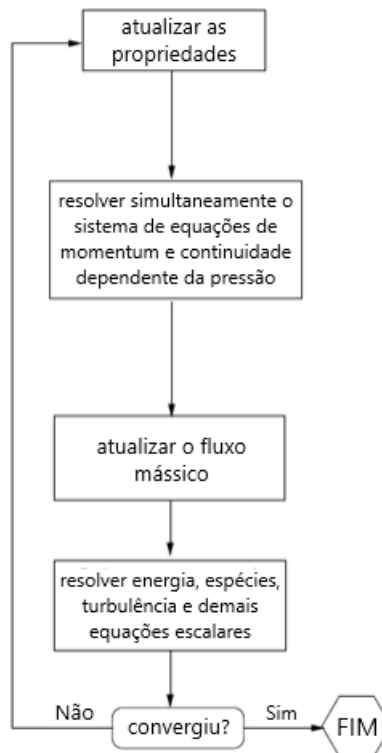


Figura A.1: Algoritmo de Solução Acoplada.