

EDVALDO ANGELO

ANÁLISE NUMÉRICA DA DINÂMICA DA EXPANSÃO DE
LÍQUIDOS SUPERAQUECIDOS EM EVAPORAÇÃO RÁPIDA

Tese apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do
Título de Doutor em Engenharia.

CONSULTA
FT-1983

São Paulo
2004

012

EDVALDO ANGELO

ANÁLISE NUMÉRICA DA DINÂMICA DA EXPANSÃO DE
LÍQUIDOS SUPERAQUECIDOS EM EVAPORAÇÃO RÁPIDA

Tese apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do
Título de Doutor em Engenharia.

Área de Concentração:
Engenharia Mecânica

Orientador:
Prof. Livre-Docente
José Roberto Simões Moreira

São Paulo
2004

Dedicado
aos meus pais Luiz e Geni.
Por seu amor, dedicação e doação,
e a minha esposa Alessandra
Por sua compreensão.

“E removerei o cativo de Judá e o cativo de Israel, e os edificarei como ao princípio. E os purificarei de toda a sua maldade com que pecaram contra mim: e perdoarei todas as suas iniqüidades, com que pecaram contra mim, e com que transgrediram contra mim. E esta cidade me servirá de nome de alegria, de louvor, e de glória, entre todas as nações da terra, que ouvirem todo o bem que eu lhe faço; e espantar-se-ão e perturbar-se-ão por causa de todo o bem, e por causa de toda a paz que eu lhe dou”.

(Jeremias 33:7-9)

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer Àquele cuja majestade, glória, soberania, fidelidade, benevolência e misericórdia são infinitas, Àquele sem o qual nada seria possível, Deus.

Aos meus pais, a quem amo muito, cujo incentivo e apoio foram decisivos para o prosseguimento.

À minha querida esposa Alessandra, sempre paciente e compreensiva.

Ao Prof. Simões, orientador desta tese, exemplo de pesquisador e professor, com o qual passei muitos momentos aprendendo, discutindo e crescendo profissionalmente.

Ao Prof. Marcos de Mattos Pimenta, um valioso colaborador, alguém de grande capacidade e visão, capaz de sugerir soluções inventivas e práticas, entre as quais, algumas das que foram aplicadas neste trabalho.

À Valéria Bom e a Alessandra pela correção da redação deste texto.

Ao meu amigo Fernando Dotta, sempre disposto a ajudar, a quem devo os incontáveis auxílios na administração do sistema UNIX e do programa TECPLOT.

Agradeço a Marcelo Mendes Vieira pelas informações fornecidas do seu trabalho experimental de doutoramento que contribuíram para desenvolvimento do presente estudo.

Agradeço à Fapesp pela bolsa de doutorado (proc. #00/05748-3) e pelo financiamento do projeto dos jatos evaporativos (proc. #00/08302-6).

São Paulo, maio de 2004.

RESUMO

Um jato de fluido em alta temperatura e pressão no estado líquido, quando injetado em uma câmara de pressão inferior a pressão de saturação correspondente à temperatura de injeção, pode atingir o estado superaquecido ou metaestável, o que significa dizer que permanece ainda no estado líquido quando já deveria ter dado curso ao processo de mudança de fase dentro do bocal ou orifício de injeção. Em seguida, este líquido superaquecido sofre uma mudança de fase súbita por meio de uma frente ou onda de evaporação. Esta mudança de fase conduz o líquido superaquecido a uma mistura bifásica de alta velocidade que, então, se expande em todas as direções. O presente trabalho analisa as equações de salto através da interface de mudança de fase, bem como a região de expansão da mistura bifásica que atinge velocidades supersônicas cada vez maiores e, geralmente, culmina na formação de uma estrutura de choque, como observado em experimentos realizados em laboratório. Assim, a resolução do escoamento é dividida em duas partes: (a) Na primeira parte, admite-se que o líquido superaquecido forma um núcleo à jusante da seção de saída do bocal e que a mudança de fase ocorre na superfície deste núcleo de líquido por uma onda de evaporação oblíqua. Essa teoria está de acordo com observações experimentais e é capaz de explicar fenômenos compressíveis, tais como a bloqueio do jato evaporativo, bem como a presença de ondas de choque; (b) Na segunda parte, utiliza-se o método clássico das diferenças finitas de MacCormack aplicado a um modelo bidimensional axissimétrico (2-D) em conjunto com um esquema de captura de onda de choque e uma equação de estado realista para determinar o escoamento bifásico supersônico à jusante da onda de evaporação. Há uma excelente concordância entre resultados do modelo e experimentos realizados no laboratório SISEA, bem como por alguns outros pesquisadores.

ABSTRACT

A high pressure and temperature fluid jet injected into a low-pressure chamber, whose pressure is lower than the corresponding saturation temperature, may remain in the liquid phase, which means that the liquid has reached the superheated or metastable state without any phase change within the injecting nozzle. Next, this superheated liquid undergoes a sudden phase change through a front or an evaporation wave process. This phase change takes the superheated liquid to a high-speed two-phase flow expanding in all directions. The present work solves the jump equations across the interface where the phase change is taking place, as well as the two-phase expansion region, which reaches increasing velocities and, usually, it involves the formation of a shock structure, as it has been observed in laboratory experiments. The problem solution is divided in two parts: (a) In the first part, it is considered that the superheated liquid exiting the nozzle comes to form a liquid core and the phase change process takes place on the surface of this core through an oblique evaporation wave. This approach is in accordance with experimental observations and it can explain some compressible phenomena present in experiments, such as shock waves and as well as flow choking; (b) In the second part, the classical numerical method of MacCormack is applied to solve the two-phase region along with a shock wave capturing scheme. It is assumed an axis-symmetric expansion (2-D) with a realistic equation-of-state to obtain the flow and properties region down the evaporation wave. There has been an excellent agreement between model and experiment results, whose data were compared to the ones obtained in the laboratory SISEA, as well as from other researchers'.

SUMÁRIO

| | |
|---|-------------|
| LISTA DE FIGURAS..... | viii |
| LISTA DE TABELAS..... | xiii |
| LISTA DE SÍMBOLOS..... | xiv |
| 1. INTRODUÇÃO..... | 1 |
| 1.1 Objetivos e a definição do problema..... | 3 |
| 1.2 Motivação..... | 4 |
| 1.2.1 <i>Acidentes industriais.....</i> | 5 |
| 1.2.2 <i>Injeção de combustível.....</i> | 5 |
| 1.2.3 <i>Dessalinização.....</i> | 6 |
| 1.2.4 <i>Válvulas e dispositivos de expansão.....</i> | 6 |
| 1.2.5 <i>Outras aplicações.....</i> | 8 |
| 1.3 Divisão da tese..... | 8 |
| 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA..... | 11 |
| 2.1 Fenômenos evaporativos e as ondas de evaporação..... | 11 |
| 2.2 Os padrões de escoamento para jatos evaporativos..... | 15 |
| 2.3 Jatos evaporativos altamente superaquecidos..... | 22 |
| 2.4 Arranjo experimental típico..... | 25 |
| 2.5 Escoamento através de singularidades..... | 27 |
| 2.6 Observações..... | 31 |
| 3. PROCESSOS TERMODINÂMICOS..... | 33 |
| 4. DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS PARA A SUBSTÂNCIA DE TESTES..... | 35 |
| 4.1 Determinação das propriedades termodinâmicas..... | 35 |
| 4.1.1 <i>Determinação do volume específico.....</i> | 36 |
| 4.1.2 <i>Determinação da entalpia específica e da entropia específica.....</i> | 39 |
| 4.2 Programa de determinação das propriedades termodinâmicas (PROP)..... | 43 |
| 4.3 Substância de teste..... | 46 |
| 4.3.1 <i>Algumas propriedades do iso-octano.....</i> | 49 |
| 4.4 Determinação do estado superaquecido (metaestável) para o núcleo de líquido do jato evaporativo..... | 51 |

| | |
|---|-----------|
| 5. DESCONTINUIDADES E O NÚCLEO DE LÍQUIDO | 60 |
| 5.1 Equações de salto..... | 60 |
| 5.1.1 Equação da conservação de massa | 62 |
| 5.1.2 Equação da conservação da quantidade de movimento..... | 63 |
| 5.1.3 Equação da conservação de energia..... | 65 |
| 5.2 Resumo das equações de conservação..... | 66 |
| 5.3 Relações trigonométricas..... | 67 |
| 5.4 Equações de Rayleigh e Rankine-Hugoniot | 72 |
| 5.5 Núcleo de líquido | 75 |
| 5.5.1 Núcleo de líquido de formato hemisférico..... | 76 |
| 5.5.2 Núcleo de líquido de formato cônico..... | 77 |
| | |
| 6. SEQUÊNCIA DE SOLUÇÃO PARA | |
| O JATO DE LÍQUIDO SUPERAQUECIDO | 81 |
| | |
| 7. MODELO BIDIMENSIONAL AXISSIMÉTRICO | 82 |
| 7.1 Aspectos gerais | 82 |
| 7.1.1 Hipóteses simplificadoras..... | 82 |
| 7.1.2 Programa ShoWPhasT2D | 83 |
| 7.2 Sistema de equações | 84 |
| 7.3 Forma conservativa e forma não conservativa das equações | 85 |
| 7.4 Comportamento matemático das equações de conservação | 88 |
| 7.4.1 Método dos autovalores..... | 88 |
| 7.4.2 Determinação da classificação do sistema de equações para o jato evaporativo..... | 90 |
| 7.4.3 Importância da classificação do sistema de equações no tipo de solução numérica empregada..... | 95 |
| 7.5 Malha..... | 96 |
| 7.5.1 Espaço físico verso espaço computacional..... | 97 |
| 7.5.2 Determinação da malha (geração numérica do sistema de coordenadas) por meio da solução de equações diferenciais parciais elípticas..... | 98 |
| 7.6 Transformação das equações de conservação..... | 102 |
| 7.7 Método numérico de MacCormack | 103 |
| 7.7.1 Etapa de predição..... | 105 |
| 7.7.2 Etapa de correção..... | 107 |
| 7.7.3 Cálculo da variável de fluxo definitiva para $i+1, j$ | 107 |
| 7.7.4 Viscosidade artificial | 108 |
| 7.7.5 Decodificação da variável de fluxo nas variáveis primitivas..... | 109 |
| 7.8 Condições de contorno | 113 |
| 7.9 Estabilidade do método numérico de solução verso densidade da malha..... | 116 |
| 7.10 Metodologia para determinação da posição da onda de choque..... | 118 |

| | |
|--|------------|
| 8. RESULTADOS | 121 |
| 8.1 Expansão no vácuo..... | 122 |
| 8.2 Influência da variação da pressão na câmara de injeção na posição da onda de choque | 133 |
| 8.3 Influência da variação da pressão de injeção na posição da onda de choque | 138 |
| 8.4 Influência da variação da temperatura de injeção na posição da onda de choque | 143 |
| 8.5 Análise dos resultados | 143 |
| 8.6 Comparação dos resultados do modelo bidimensional com os resultados do modelo unidimensional de Simões-Moreira (1999)..... | 149 |
| 8.7 Tabelas com os resultados das simulações | 151 |
| | |
| 9. CONCLUSÕES E CONTINUIDADE DO TRABALHO | 155 |
| 9.1 Conclusões..... | 155 |
| 9.2 Continuidade do trabalho | 156 |
| | |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 159 |
| | |
| APÊNDICE I. ROTINAS DO PROGRAMA DE DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES PROP | 166 |
| | |
| APÊNDICE II. MODELO UNIDIMENSIONAL (FALSO TRANSITÓRIO)..... | 171 |
| | |
| APÊNDICE III. MÁXIMA VAZÃO MÁSSICA ATRAVÉS DA ONDA DE EVAPORAÇÃO | 192 |
| | |
| APÊNDICE IV. TESTES DO PROGRAMA ShoWPhasT2D..... | 193 |
| | |
| APÊNDICE V. ESTUDO DA SENSIBILIDADE DO TAMANHO DA MALHA..... | 197 |

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.1** Jato evaporativo de iso-octano altamente superaquecido – Condições de injeção: pressão de injeção 500 kPa, temperatura de injeção 76°C e pressão na câmara de baixa pressão de 0,110 kPa (a) imagem obtida pela técnica “backlightening”; (b) imagem obtida pelo método “Schilieren” e tratamento matemático. (Vieira, 2004)..... 2
- Figura 1.2** Localização da onda de evaporação em (a) tubos capilares ou de orifício, (b) válvulas de expansão. (Simões-Moreira e Bullard, 2002)..... 7
- Figura 2.1** Resumo dos modos evaporação dos líquidos superaquecidos. (Simões-Moreira, 1994) 12
- Figura 2.2** (a) Fotografia de uma onda de evaporação em progresso em n-dodecano superaquecido no interior de um tubo de vidro. Condições: Temperatura do líquido 230°C, pressão abaixo da onda de evaporação 0,59bar, pressão acima da onda de evaporação 0,37bar e velocidade média (uniforme) da onda de evaporação 47,2 cm/s. Sentido de propagação da onda de evaporação de cima para baixo. Tubo de vidro com 15mm de diâmetro interno (Simões-Moreira, 1994); (b) Arranjo experimental típico para observar ondas de evaporação (Simões-Moreira et al, 1993)..... 13
- Figura 2.3** (a) onda de evaporação em microescala dentro de uma gota de líquido superaquecido; (b) evaporação na direção radial; (c) jatos evaporativos altamente superaquecidos; (d) onda de evaporação normal plana. (Simões-Moreira, 1999) 14
- Figura 2.4** Padrões de escoamento para jato evaporativo. (Wildgen e Straub, 1989 e Ramamurthi e Nandakumar, 1994)..... 16
- Figura 2.5** Padrões de escoamento para diversas condições iniciais para injeção de água. O bocal é de cantos vivos e diâmetro de saída de 0,5mm. Wildgen e Straub (1989) 18
- Figura 2.6** Padrões de escoamento obtidos por Kitamura et. al (1986) para injeção de água. Diâmetro do bocal de injeção igual a 0,54 mm. As condições de velocidade na saída do bocal de injeção, pressão de injeção, e diferença entre a temperatura de injeção do fluido e a temperatura de saturação (correspondente à pressão de injeção), são respectivamente: (a) 8,5 m/s, 760 mmHg, valor negativo ; (b) 8,65 m/s, 22 mmHg, 28,5 °C ; (c) 8,22 m/s, 23 mmHg, 45,4 °C ; (d) 8,22 m/s, 20 mmHg, 48 °C..... 19

| | |
|---|----|
| Figura 2.7 Jatos de diferentes geometrias, com crescentes graus de superaquecimento para o perfluor-n-hexano. (Kurschat et al., 1992)..... | 21 |
| Figura 2.8 Núcleo de líquido de um jato evaporativo altamente superaquecido. Fluido teste iso-octano (Athans, 1995) | 23 |
| Figura 2.9 Padrão esquemático do escoamento de um jato subexpandido na saída de um bocal convergente..... | 24 |
| Figura 2.10 (a) Arranjo experimental; (b) Sistemas ópticos (Vieira, 1999 e 2004)..... | 26 |
| Figura 2.11 Padrões de escoamento e relação qualitativa com a vazão mássica em função da diferença de pressão à montante e à jusante das singularidades observados por Pasqua (1953)..... | 28 |
| Figura 2.12 Escoamento de água para várias condições de injeção através um alargamento. As condições de temperatura e pressão à montante e pressão a vários diâmetros à jusante do alargamento são, respectivamente: (a) 120,8°C, 2,96bar, 1,35bar; (b) 150,5°C, 4,96bar, 1,35 bar; (c) Temperatura de saturação (título=0,02), 2,07bar, 1,06bar. Attou et al. (2000)..... | 30 |
| Figura 2.13 Vários estágios do desenvolvimento de um jato supersônico de óleo diesel através da injeção por um bocal de diâmetro de 1mm em uma câmara. Tempos de, respectivamente: (a) $\Delta t = 22\mu s$, (b) $\Delta t = 41\mu s$ e (c) $\Delta t = 64\mu s$. Pianthong et al. (2002) | 31 |
| Figura 3.1 Processos termodinâmicos nos jatos evaporativos altamente superaquecidos. (a) Fotografia de Simões-Moreira et al. (2002); (b) representação esquemática do modelo; (c) comportamento termodinâmico em gráfico (qualitativo) volume específico <i>versus</i> pressão..... | 34 |
| Figura 4.1 Diagrama entropia específica normalizada (ou reduzida) versus temperatura para três substâncias diferentes (Thompson e Sullivan, 1975) | 47 |
| Figura 4.2 (a), (b), (c), (d), (e) Diagramas para região de saturação – iso-octano e (f) fórmula estrutural condensada | 50 |
| Figura 4.3 Representação da região metaestável de um fluido em um diagrama pressão versus volume específico..... | 52 |

| | |
|--|-----|
| Figura 4.4 Variação do volume específico do líquido metaestável em função do aumento do grau de superaquecimento para o iso-octano | 56 |
| Figura 5.1 Plano tangente à onda de evaporação e grandezas correlatas | 61 |
| Figura 5.2 Relações trigonométricas fundamentais da (a) onda de evaporação, (b) onda de choque | 67 |
| Figura 5.3 Ângulo de giro como função do ângulo de onda parametrizado pela razão entre os volumes específicos à jusante e à montante relativos a onda de evaporação (Simões-Moreira, 1999) | 71 |
| Figura 5.4 Solução gráfica do estado à montante de uma onda de evaporação (Simões-Moreira, 1994) | 74 |
| Figura 5.5 Formatos do núcleo de líquido e cotas | 78 |
| Figura 6.1 Seqüência de solução do escoamento do jato evaporativo | 81 |
| Figura 7.1 Variação das propriedades de fluxo através de uma onda de choque normal | 86 |
| Figura 7.2 Regiões de influência e dependência relativas ao ponto P (respectivamente Região I e Região II) determinadas pelas linhas características. Em um sistema de equações diferenciais parciais do tipo hiperbólico modelando um problema bidimensional em regime permanente..... | 96 |
| Figura 7.3 Representação do espaço físico e computacional. (a) Pontos na extremidade da malha; Espaço físico discretizado – final; (c) Espaço computacional; (d) Indexação da malha e (d) Representação tridimensional..... | 99 |
| Figura 7.4 Condições de contorno para a expansão da mistura bifásica..... | 113 |
| Figura 7.5 Representação das linhas características..... | 117 |
| Figura 7.6 Esquema de captura de onda de choque | 120 |
| Figura 8.1 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 2329XXX (expansão no vácuo). (a) Distribuição de pressão; (b) Distribuição de temperatura | 125 |
| Figura 8.2 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 2329XXX (expansão no vácuo). (a) Distribuição de título; (b) | |

| | |
|--|-----|
| Distribuição de velocidade axial (Região I influência da parede, Região II grande aumento de velocidade axial)..... | 126 |
| Figura 8.3 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 2329XXX (expansão no vácuo). (a) Distribuição de velocidade radial; (b) Vetores velocidade | 129 |
| Figura 8.4 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 2329XXX (expansão no vácuo). (a) Linha de corrente; (b) Detalhe dos vetores velocidade nas proximidades do bocal de injeção | 128 |
| Figura 8.5 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 5329XXX (expansão no vácuo). (a) Distribuição de pressão e linhas de corrente; (b) Detalhe dos vetores velocidade nas proximidades do bocal de injeção | 130 |
| Figura 8.6 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso A6 (Athans, 1995) no vácuo. (a) Distribuição de pressão; (b) Distribuição de título – até mudança completa de fase..... | 132 |
| Figura 8.7 Localização da onda de choque para o caso 239XXX com pressão na câmara de 90 Pa. (a) Fotografia (Vieira, 2004), Distribuição de: (b) Pressão; (c) Temperatura; (d) Título e (d) Número de Mach (até a onda de choque)..... | 134 |
| Figura 8.8 Distribuição das propriedades e grandezas para duas linhas de corrente (caso 2329XXX para pressão da câmara de injeção de 90 Pa). Linhas de corrente (a) Lc1 e (b) Lc2 indicadas na Fig.8.7b..... | 135 |
| Figura 8.9 Localização da onda de choque para o caso 5329XXX com pressão na câmara de injeção de 500 Pa. (a) Distribuição de pressão; (b) Fotografia de Vieira (2004) | 137 |
| Figura 8.10 Dimensão máxima da onda de choque (caso 2329XXX) na direção: (a) radial e (b) axial em comparação aos resultados experimentais de Vieira (2004) e (c) Geometria das ondas de choque obtidas pelo modelo em função da pressão na câmara de injeção..... | 139 |
| Figura 8.11 Comparação dos resultados do modelo com os experimentos de Vieira (2004) para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão na câmara de injeção para os | |

| | |
|--|-----|
| casos: (a) e (b) 1329XXX e (c) e (d) 5329XXX e (e) e (f) 7329XXX cuja temperatura de injeção T_0 é igual a 56°C | 141 |
| Figura 8.12 Comparação dos resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão do reservatório de injeção para os casos (a) 2329XXX, (b) 5329XXX e (c) 7329XXX cuja temperatura de injeção é igual a 56°C | 142 |
| Figura 8.13 Comparação dos resultados do modelo com os experimentos de Vieira (2004) para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão na câmara de injeção para os casos (a) e (b) 7349XXX e (c) e (d) 7368XXX cuja pressão de injeção é igual a 750 kPa..... | 144 |
| Figura 8.14 Comparação dos resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão da câmara de injeção para os casos (a) 7329XXX, (b) 7349XXX e (c) 7368XXX cuja pressão de injeção é igual a 750 kPa..... | 145 |
| Figura 8.15 Comparação dos resultados do modelo para as pressões metaestável e pós-onda de evaporação em função das condições de injeção. (a) pressão metaestável; (b) pressão de Chapman-Jouguet..... | 147 |
| Figura 8.16 Comparação dos resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em função das condições de injeção. (a) dimensão máxima radial; (b) dimensão máxima axial | 148 |
| Figura 8.17 Comprimento do núcleo líquido em função das condições de injeção (Vieira, 2004)..... | 149 |
| Figura 8.18 Comparação dos resultados do modelo bidimensional com o modelo unidimensional de Simões-Moreira (1999) para o caso 239XXX | 150 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|-----|
| Tabela 4.1 Constantes da equação de Lee-Kesler | 39 |
| Tabela 4.2 (a) Dados de entrada da rotina PROP: Par de propriedades termodinâmicas para a determinação das demais propriedades e correspondente seletor; (b) Seletor que indica o estado termodinâmico da substância | 44 |
| Tabela 4.3 Propriedades do iso-octano (Reid, 1987) | 49 |
| Tabela 8.1 Diâmetro do bocal e fluido de testes para as simulações | 122 |
| Tabela 8.2 Dados de entrada e solução de Chapman-Jouguet para ensaios de Vieira (2004) para C_8H_{18} | 123 |
| Tabela 8.3 Dados de entrada e solução de Chapman-Jouguet para ensaios de Athans (1995) para C_8H_{18} e Kurschat (1992) para C_6F_{14} | 124 |
| Tabela 8.4 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 1329XXX | 152 |
| Tabela 8.5 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 2329XXX | 152 |
| Tabela 8.6 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 5329XXX | 153 |
| Tabela 8.7 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 7329XXX | 153 |
| Tabela 8.8 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 7349XXX | 154 |
| Tabela 8.9 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 7368XXX | 154 |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|-------------------------------|--|
| A_b | Área da seção de saída do bocal de injeção |
| B | Vetor coluna (equações de conservação) |
| c | Velocidade do som |
| C_D | Coefficiente de descarga do bocal de injeção |
| C_p | Calor específico à pressão constante |
| $\langle C_p \rangle_T$ | Calor específico à pressão constante médio |
| $\langle C_p \rangle_{\ln T}$ | Calor específico à pressão constante médio (média logarítmica) |
| c_v^0 | Calor específico a volume constante calculado para a temperatura crítica |
| e | Energia interna específica |
| F | Vetor coluna (equações de conservação) |
| g | Energia de gibbs específica |
| G | Vetor coluna (equações de conservação) |
| h | Entalpia específica |
| h_0 | Entalpia específica de estagnação |
| i | Contador |
| j | Contador |
| J | Fluxo de massa normal ou vazão em massa normal por unidade de área |
| Jac | Jacobiano |
| L | Comprimento do núcleo de líquido (total) |
| \dot{m} | Vazão em massa |
| \dot{m}_t | Vazão em massa teórica (isoentrópica) |
| M | Número de Mach |
| \vec{n} | Versor normal à descontinuidade |
| p | Pressão |
| \dot{Q} | Fluxo de calor |
| r | Coordenada radial |

| | |
|------------------|---|
| r_1 | Dimensão máxima da onda de choque na direção radial |
| r_2 | Dimensão máxima da onda de choque na direção axial |
| R | Constante da substância |
| \bar{R} | Constante universal dos gases |
| R_b | Raio do bocal de injeção |
| R_h | Raio do hemisfério |
| R_{OC} | Raio da onda de choque |
| s | Entropia específica |
| \vec{t} | Versor tangencial à descontinuidade |
| t | Tempo |
| T | Temperatura |
| T_{brd} | Temperatura de evaporação reduzida (à pressão de 1 atm) |
| v | Volume específico |
| \vec{V} | Velocidade |
| V | Módulo da velocidade |
| ∇ | Volume |
| V_r | Componente radial da velocidade |
| \vec{V}_t | Projeção tangencial da velocidade à descontinuidade |
| V_z | Componente axial da velocidade |
| x | Título |
| \vec{W} | Projeção normal da velocidade à descontinuidade |
| \dot{W}_{eixo} | Potência no eixo |
| \dot{W}_{visc} | Potência das forças viscosas |
| z | Coordenada axial |
| z_{ct} | Cota em relação a um plano horizontal de referência |
| z_D | Comprimento do núcleo de líquido até arredondamento |
| Z_{comp} | Fator de compressibilidade da substância |

Gregos

| | |
|----------------|--|
| β | Ângulo de onda |
| β_s | Fator de compressibilidade |
| γ | Relação entre os calores específicos |
| η | Coordenada no plano computacional |
| φ_{PM} | Função de Prandtl-Meyer |
| Π | Grau de superaquecimento |
| θ | Ângulo de giro |
| ρ | Densidade |
| Ξ | Ângulo para acerto das condições de contorno |
| ω | Fator de acentricidade |
| ξ | Coordenada no plano computacional |

Subscritos

| | |
|----------|-------------------------------------|
| c | Propriedade crítica |
| rd | Propriedade reduzida |
| 0 | Condição de injeção |
| 1 | Estado metaestável ou superaquecido |
| 2 | Jusante da onda de evaporação |
| 3 | Montante da onda de choque |
| 4 | Jusante da onda de choque |
| ∞ | Câmara de injeção |
| σ | Propriedade saturada |
| L | Líquido |
| v | Vapor |
| max | Máximo |
| cal | Valor calculado |
| $real$ | Propriedade corrigida |
| * | Estado de referência |

Sobrescritos

| | |
|--------------|--|
| * | Estado de referência |
| (0) | Fluido simples |
| (<i>r</i>) | Fluido de referência |
| <i>R</i> | Propriedade residual |
| ig | Propriedade para comportamento da substância de gás perfeito |

1. INTRODUÇÃO

Há uma série de aplicações industriais e tecnológicas cuja presença do fenômeno de evaporação é de fundamental importância. O conhecimento das características de tal fenômeno e o estabelecimento de correlações entre os parâmetros que o controlam são desejáveis, tanto do ponto de vista da otimização quanto da segurança do mesmo. Em algumas aplicações de engenharia há aspectos positivos da presença do fenômeno, como na dessalinização, porém em outras aplicações sua ocorrência pode causar efeitos desastrosos, por exemplo, potenciais acidentes em alguns tipos de usinas nucleares originados pela insuficiente refrigeração do reator nuclear.

Diversos pesquisadores, através de experimentos ou de análises teóricas, têm despendido esforços no intuito de conhecer e prever o comportamento dos fluidos durante o processo de mudança de fase de líquido para vapor. O aumento de temperatura ou a diminuição de pressão podem levar à uma mudança de fase. No presente trabalho apenas um padrão de mudança de fase (o qual está relacionado à exposição de um líquido à baixa pressão) tratado na literatura inglesa pelo termo “flashing” e aqui denominado evaporação rápida ou súbita será estudado, especificamente àquele apresentado nos jatos de líquido altamente superaquecidos ou altamente metaestáveis. Um exemplo de jato evaporativo altamente superaquecido pode ser visto na Fig.1.1 em que um fluido inicialmente no estado de líquido comprimido é injetado através de um bocal em uma câmara de baixa pressão. A Fig.1.1a é uma fotografia obtida por uma técnica conhecida como “back lightening”, o qual em uma tradução direta pode ser chamada de iluminação por trás. A Fig.1.1b é uma fotografia do mesmo jato evaporativo (mesmas condições experimentais) da fotografia da Fig.1.1a, obtida através de outro método e também uma escala diferente, chamado “schlieren”. Nesta última, a representação do bocal é esquemática e foi realizado um tratamento matemático de filtragem e troca da palheta de cores no intuito de realçar alguns detalhes da fotografia.

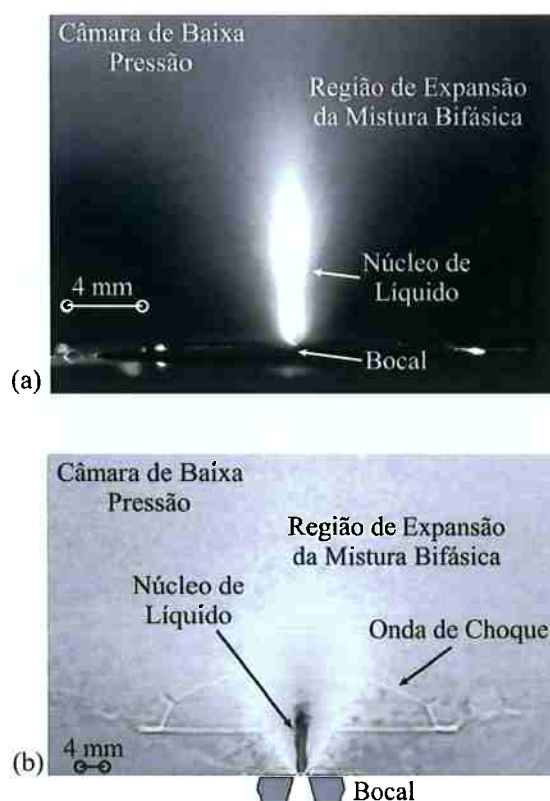


Figura 1.1 Jato evaporativo de iso-octano altamente superaquecido – Condições de injeção: pressão de injeção 500 kPa, temperatura de injeção 76°C e pressão na câmara de baixa pressão de 0,110 kPa (a) imagem obtida pela técnica “backlighting”; (b) imagem obtida pelo método “Schlieren” e tratamento matemático. (Vieira, 2004).

As características peculiares dos jatos altamente superaquecidos, têm historicamente levado à conclusões inapropriadas que apenas recentemente, através de registros fotográficos de alta velocidade e técnicas especiais de iluminação da seção de testes, foram reveladas. Processos de injeção de líquidos em câmaras de baixa pressão podem contrariar o senso comum de que a mudança de fase ocorre obrigatoriamente durante a passagem do fluido pelo bocal de injeção (na região dentro do bocal onde a pressão de saturação é alcançada). Experimentos têm mostrado que, sob determinadas condições, o líquido durante o processo de injeção; apesar de atingir pressões, as quais sob a análise da termodinâmica do equilíbrio, deveria iniciar mudança de fase, permanece líquido. Este líquido encontra-se em um estado denominado superaquecido ou metaestável. O núcleo de líquido metaestável pode ser facilmente identificado na Fig.1.1a como uma região clara, logo após o bocal de injeção (dentro da câmara de baixa pressão).

A mudança de fase se dará pela passagem do líquido metaestável por uma onda de evaporação na superfície do núcleo de líquido. Após a mudança de fase, ocorrida na superfície do núcleo de líquido, o fluido, agora como mistura bifásica, líquido e vapor, expande livremente no interior da câmara de baixa pressão. Durante o processo de expansão, sob determinadas condições e em alguns casos, o fluido alcança velocidades supersônicas, atingindo pressões mais baixas que a pressão da câmara de injeção (câmara de baixa pressão) ocasionando assim, a presença de ondas de choque para equilíbrio das mesmas. A onda de choque pode ser observada na Fig.1.1b. Nesta última figura o núcleo de líquido aparece como uma região escura e a onda de choque como uma linha clara.

1.1 Objetivos e a definição do problema

É objetivo do presente trabalho modelar matematicamente a expansão da mistura bifásica do jato evaporativo dentro da câmara de injeção, através de análise numérica do fenômeno e comparar algumas simulações computacionais selecionadas a dados experimentais, verificando o comportamento do escoamento do jato evaporativo. A expansão da mistura bifásica será analisada para o padrão de escoamento dos jatos evaporativos altamente superaquecidos correspondente aos processos termodinâmicos que serão detalhadamente descritos no Capítulo 3.

A solução das propriedades e grandezas à jusante da onda de evaporação, segue o procedimento de Simões-Moreira (1999) e Simões-Moreira et al. (2002), bem como o código computacional ShoWPHasTID. O estado metaestável atingido pelo líquido durante a injeção é determinado indiretamente através da vazão mássica e o comprimento do núcleo de líquido que são obtidos experimentalmente (retirados dos casos relatados na literatura).

O modelo desenvolvido para solução do escoamento da mistura bifásica utiliza o método de MacCormack, é bidimensional e leva em conta a simetria axial do escoamento (axissimetria), resolvendo o campo de escoamento por meio de marcha à jusante, este é combinado a um método de captura de onda de choque. Além disso, também foi desenvolvido pelo autor, um programa de apoio para

determinação das propriedades termodinâmicas que faz uso de uma equação de estado realista.

O modelo bidimensional desenvolvido é inovador, pois não é de conhecimento do autor a existência de modelos matemáticos para a solução do jato evaporativo altamente superaquecido; exceto os modelos unidimensionais desenvolvidos por Kurschat (1992) e Simões-Moreira (2000), incapazes pela concepção de simular condições de contorno mais complexas e obter com acuidade a posição da onda de choque.

Os dados de entrada para solução do problema são:

1. Pressão de injeção;
2. Temperatura de injeção;
3. Vazão em massa;
4. Diâmetro do bocal;
5. Coeficiente de descarga do bocal;
6. Comprimento do núcleo de líquido e
7. Pressão na câmara de injeção.

Os resultados são os campos de pressão, temperatura, título (e demais propriedades termodinâmicas), velocidade, número de Mach e posição da onda de choque para região de expansão pós-onda de evaporação.

1.2 Motivação

Nos próximos tópicos, são brevemente apresentadas algumas aplicações encontradas na literatura. São processos industriais, cujo controle depende muito do conhecimento do comportamento da evaporação rápida para que tenham eficiência e segurança.

1.2.1 Acidentes industriais

Muitos fluidos são mantidos à altas pressões no estado líquido, para armazenagem ou por necessidade dos processos aos quais serão submetidos. Não raramente são tóxicos e ou inflamáveis. A exposição súbita dos mesmos à pressão ambiente, tal qual o rompimento de uma linha ou tanque, pode causar acidentes industriais de grandes proporções (Reid, 1976), formando nuvens de poluentes que podem afetar grandes áreas, freqüentemente ocasionando perdas materiais e humanas (Deaves et al., 2001).

A falha de um tanque de armazenagem de amônia em uma indústria de fertilizantes na África do Sul ocorrido em 13 de julho de 1973 é um exemplo. Neste acidente, um de quatro tanques cilíndricos horizontais contendo amônia, mantida a alta pressão, se rompeu. A falha resultou em um vazamento de aproximadamente dezoito toneladas de amônia, produzindo imediatamente, uma nuvem de 150 metros de diâmetro e 20 metros de altura, a qual foi rapidamente levada pelo vento. A nuvem atingiu 300 metros de diâmetro e se movimentou por aproximadamente 450 metros do ponto de origem, causando a morte de dezoito pessoas (Deaves et al., 2001 apud Schmidli et al., 1975). Os modelos que analisam a dispersão dos poluentes na atmosfera para acidentes, como o mencionado, precisam ser alimentados por dados que devem ser obtidos por códigos computacionais (Fairuzov, 1998), como o apresentado nesta tese. Esses dados são conhecidos como termos de fonte.

A abrupta queda de pressão em uma linha de líquido, mantida a alta pressão devido à evaporação rápida, expõe a linha a uma substancial diminuição de temperatura, que pode atingir o limite de comportamento dúctil-frágil do material com o qual o tubo foi confeccionado, causando ruptura e conseqüentemente vazamentos (Fairuzov, 1998).

1.2.2 Injeção de combustível

No início da década de 70, pesquisadores como Lienhard e Day (1970), já destacavam o grande interesse no fenômeno da evaporação rápida na injeção de combustível para sistemas usados em foguetes e propulsores.

Alguns tipos de motores de combustão interna utilizam um sistema de alimentação de combustível conhecido como injeção direta. O comportamento de tais motores de combustão interna depende entre tantos outros fatores, de como o combustível é alimentado, ou seja, como adentra na câmara de combustão, pois a mistura combustível com o ar no interior da câmara de combustão é de grande importância no modo como a mesma irá se processar.

Alguns trabalhos destacam-se através do estudo de injetores que melhoram esse processo. Entre eles, Oza (1984) e Reitz (1990). Segundo eles, o fenômeno de evaporação rápida pode aumentar a eficiência do processo de mistura de ar combustível, oferecendo uma combustão mais homogênea, reduzindo o contato do combustível líquido com a parede da câmara de combustão, através da grande evaporação nas proximidades do injetor e melhorando, conseqüentemente, a atomização do jato. Essas características do escoamento incrementam, segundo os autores, o desempenho dos motores de combustão interna.

1.2.3 Dessalinização

De acordo com Xu et al. (2002), o processo de retirada de sal da água do mar (conhecido como dessalinização) mais usado atualmente é aquele onde a salmoura é submetida a sucessivos processos de evaporação, através da exposição à uma diferença de pressões, obtida pela passagem por orifícios, ou seja, através do fenômeno de evaporação rápida (“flashing”). O processo é conhecido como “Multi-stage flash”. Sendo que alguns trabalhos modelam matematicamente o fenômeno como os trabalhos de Ferro et al. (2002) e Shivayyanamath e Tewari (2002).

1.2.4 Válvulas e dispositivos de expansão

As válvulas de alívio e de segurança têm como finalidade a proteção de sistemas cuja integridade depende da manutenção rígida dos limites de pressão impostas aos mesmos pelas condições ou especificações dos projetos. Muitas delas são dimensionadas para em operação descarregarem vapor, contudo, sob

determinadas condições, isso pode eventualmente não ocorrer (Weisman et al., 1984, Bolle et al., 1996 e Morris, 1999). Assim, podem eliminar uma mistura bifásica ou líquido saturado. Essas válvulas são compostas de peças móveis que são mantidas fechadas, em geral, por molas. Quando o esforço excede um valor predeterminado devido ao aumento de pressão na linha, no tanque ou no sistema a ser protegido, a mola cede permitindo a passagem do fluido. Deste modo, essa passagem se assemelha fisicamente ao comportamento de um bocal ou de um orifício. Local em que pode ocorrer o fenômeno da evaporação rápida. Para as válvulas de controle de vazão as últimas observações também são válidas. O fenômeno da evaporação rápida também pode ocorrer em dispositivos de expansão de ciclos de refrigeração (tubos capilares, por exemplo – veja Fig.1.2).

Nesses casos um grande inconveniente é verificado, a geração de ruído (Simões-Moreira e Bullard, 2002), que é sempre indesejado e em muitas aplicações como: em geladeiras, aparelhos de ar condicionado, etc.; torna-se bastante inconveniente, pois chega a causar desconforto àqueles que porventura estejam no mesmo ambiente que esses aparelhos.

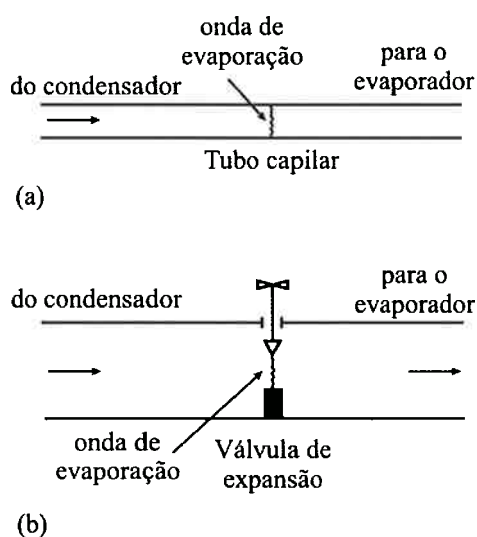


Figura 1.2 Localização da onda de evaporação em (a) tubos capilares ou de orifício, (b) válvulas de expansão. (Simões-Moreira e Bullard, 2003).

1.2.5 Outras aplicações

Ainda de acordo com informações da literatura, outros tipos de aplicações do fenômeno de “flashing” são encontrados em processos dos mais diversos, tais como: escoamento em vulcões, evaporadores e geradores de vapor (Elias e Chambré, 2000).

Nas décadas de 60 e 70, uma das grandes motivações para o estudo desse problema foi o que se convencionou chamar na literatura inglesa de “Loss of Cooling Accidents” (LOCA) nas usinas nucleares do tipo “Pressurized Water Reactor” (PWR), que se trata da perda de circulação ou da capacidade de circulação de água no circuito primário, que se dá por danos na linha de água pressurizada.

Um emprego dos jatos evaporativos em aplicações espaciais foi exemplificado por Fuchs e Legge (1979), que descreveram o sistema de eliminação do excesso de água para o espaço do “SPACELAB”, um laboratório reutilizável desenhado para permitir experimentos em microgravidade na órbita da Terra. Esse laboratório foi desenvolvido pela Agência Espacial Européia e era montado dentro do compartimento de cargas do ônibus espacial americano. Foi utilizado em numerosas missões do ônibus espacial entre 1983 e 1997. Fuchs e Legge estudaram em seus experimentos os jatos de água sendo lançados em uma atmosfera de pressão muito próxima do vácuo absoluto e concluíram que, durante o processo de evaporação do jato nesse ambiente, o resfriamento era tal que o líquido se congelava interrompendo o fluxo. A solução adotada foi o aquecimento do bocal de modo a evitar esse congelamento. Nos registros fotográficos é possível notar que o fluido permanece no estado líquido durante a injeção, evapora-se rapidamente e sublima.

1.3 Divisão da tese

O Capítulo 1 trata da apresentação do problema do jato evaporativo, os objetivos e a motivação do estudo.

No Capítulo 2 é feita a revisão bibliográfica. Neste capítulo é destacada a ocorrência da evaporação rápida dentre os processos de mudança de fase líquido-vapor (fenômenos evaporativos), e detalhada a ocorrência das ondas de evaporação em diversas condições. Ainda na revisão bibliográfica são descritos os padrões de

escoamento para os jatos de líquidos observados por diversos pesquisadores, e também o arranjo experimental típico para o estudo do fenômeno. É colocado em evidência o padrão de interesse do estudo dentre os padrões citados. Os escoamentos através de singularidades, como dispositivos de expansão, guardam importantes semelhanças com o jato evaporativo e também são brevemente apresentados. A justificativa da discussão de alguns dispositivos de expansão no texto, se deve ao fato de que nestes, em diversas circunstâncias, são observados claramente os fenômenos de evaporação rápida, fato comprovado pelo amplo registro fotográfico de inúmeros pesquisadores. As semelhanças entre os escoamentos citados e o jato evaporativo permitem a extrapolação de algumas conclusões, a partir da investigação deste, para tais dispositivos de expansão e ampliam o universo das aplicações do estudo.

O Capítulo 3 expõe os principais processos termodinâmicos nos jatos evaporativos altamente superaquecidos.

O Capítulo 4 é destinado a determinação das propriedades termodinâmicas da substância de trabalho. São destacados o comportamento termodinâmico, o estado metaestável, a equação de estado utilizada e o programa de cálculo de propriedades.

No Capítulo 5 são discutidas as descontinuidades, ou seja, é apresentado o modelamento matemático para as ondas de choque e ondas de evaporação e também o tratamento do formato do núcleo de líquido metaestável. Discute-se, ainda neste capítulo, a solução de Chapman-Jouguet (aplicada para ondas de deflagração em combustão) para obtenção das propriedades à jusante da onda de evaporação.

O Capítulo 6 apresenta um diagrama de blocos esquematizando a solução completa do jato evaporativo altamente superaquecido.

O Capítulo 7 expõe o modelo bidimensional axissimétrico, o tipo de malha utilizado, bem como o método de sua construção e o procedimento de resolução das equações de conservação.

O Capítulo 8 é o capítulo destinado à apresentação dos resultados e comparação com os experimentos, bem como à um modelo unidimensional.

O Capítulo 9 é destinado às conclusões e às propostas de continuidade do presente trabalho. No intuito de não quebrar a ordem do texto principal, sem deixar de complementar as informações citadas no mesmo, foram incluídos apêndices contendo informações sobre metodologias de obtenção de propriedades (diagrama de

blocos do programa PROP), teste com outro método de solução para a região à jusante da onda de evaporação, deduções complementares, validação do programa bidimensional através da comparação da solução numérica com resultados analíticos para escoamentos supersônicos de ar relatados na literatura e testes para determinação da densidade da malha.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Inicialmente serão apresentados os fenômenos evaporativos e situado o fenômeno das ondas evaporativas e sua ocorrência. Diversos padrões para jatos de líquido foram observados experimentalmente e são mencionados na literatura sendo apresentados a seguir, juntamente com a descrição de um arranjo experimental típico. Também é destacado o padrão de interesse do estudo dentre os padrões dos jatos de líquido, que é aquele apresentado pelos jatos evaporativos altamente superaquecidos. São reportados para comparação alguns experimentos de escoamentos, através de singularidades, como os que se desenvolvem nos dispositivos de expansão, os quais guardam importantes semelhanças com o jato evaporativo.

2.1 Fenômenos evaporativos e as ondas de evaporação

A mudança de fase de uma substância pode acontecer de diversas maneiras, através de processos distintos. Quando se trata de evaporação, ou seja, mudança do estado líquido para o vapor, esta pode apresentar os seguintes modos: evaporação explosiva, ondas de evaporação e evaporação superficial. O modo de evaporação depende do tipo de substância, seu grau de superaquecimento, o meio em que se encontra e como se inicia o processo de evaporação. Esses modos são esquematicamente apresentados na Fig.2.1.

Caso a substância apresente um estado termodinâmico próximo ao limite de estabilidade mecânica, traduzido pelo máximo grau de superaquecimento possível, a mudança de fase pode acontecer através de uma variação violenta e repentina das propriedades, culminando, em algumas situações, em explosões. À medida que diminuimos o grau de superaquecimento, outros fenômenos surgem como: as ondas de evaporação ou ainda a evaporação superficial.

Nos casos em que o superaquecimento é muito discreto ou inexistente, é observada a evaporação simples que se caracteriza por uma baixa ou nenhuma variação de pressão, caso amplamente discutido em livros textos por tratar-se de um problema clássico de termodinâmica de equilíbrio.

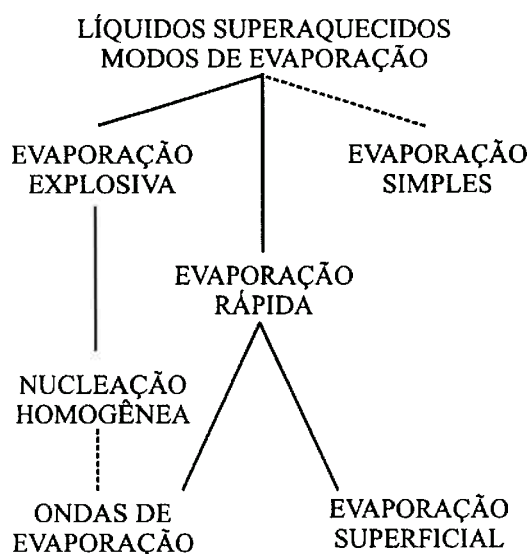


Figura 2.1 Resumo dos modos evaporação dos líquidos superaquecidos. (Simões-Moreira, 1994).

O fenômeno de interesse desse trabalho ocorrerá quando o líquido estiver no estado superaquecido ou metaestável. Assim, uma breve revisão do conceito é feita no Capítulo 4.

A evaporação rápida por sua vez é um fenômeno mais ameno e controlado em relação à evaporação explosiva, podendo como citado, ocorrer através de ondas de evaporação ou através de evaporação superficial. As ondas de evaporação são fenômenos de mudança de fase, caracterizados por uma súbita evaporação de líquidos superaquecidos dentro de uma interface discreta e observável. Elas serão utilizadas neste trabalho para modelar a mudança de fase nos jatos evaporativos. Experimentos unidimensionais realizados por Hill (1991) e Simões Moreira (1994) – veja Fig.2.2a – documentaram o fenômeno através de filme de alta velocidade. O experimento consistiu em preencher um pequeno tubo de vidro com o líquido desejado, sendo que um diafragma separava o líquido de uma câmara em baixa pressão (veja Fig.2.2b).

Atingida a condição de teste, o diafragma é rompido, expondo a superfície do líquido à baixa pressão, imediatamente (ordem de milisegundos) ondas acústicas se propagam no interior do líquido enviando a informação da queda abrupta de pressão, reverberando na base do tubo e retornando até à superfície livre, estabelecendo um estado metaestável no líquido.

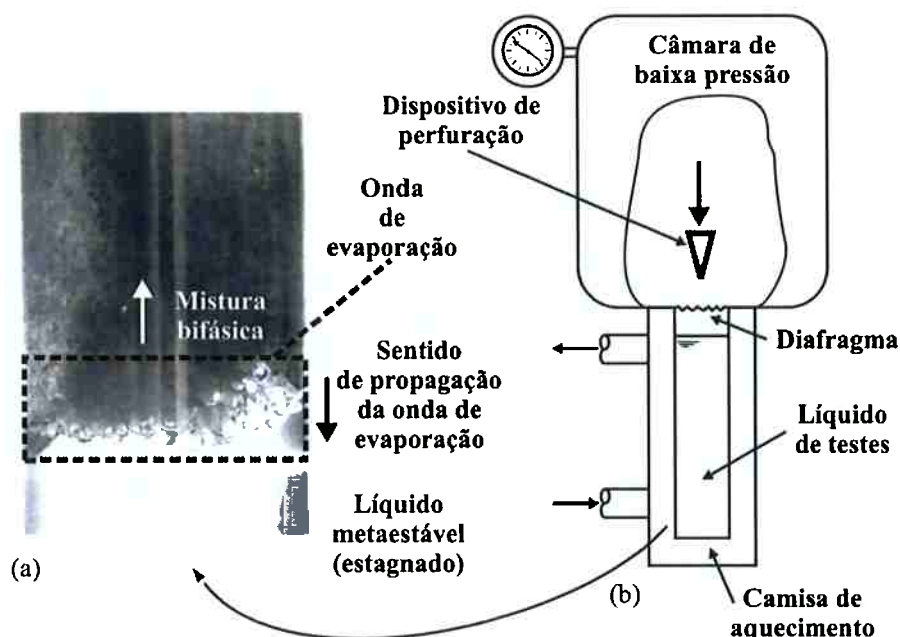


Figura 2.2 (a) Fotografia de uma onda de evaporação em progresso em n-dodecano superaquecido no interior de um tubo de vidro. Condições: Temperatura do líquido 230°C, pressão abaixo da onda de evaporação 0,59bar, pressão acima da onda de evaporação 0,37bar e velocidade média (uniforme) da onda de evaporação 47,2 cm/s. Sentido de propagação da onda de evaporação de cima para baixo. Tubo de vidro com 15mm de diâmetro interno (Simões-Moreira, 1994); (b) Arranjo experimental típico para observar ondas de evaporação (Simões-Moreira et al, 1993).

Essa queda abrupta de pressão é rápida o suficiente para inibir uma nucleação homogênea no interior do líquido e, além disso, as paredes de vidro são lisas e não permitem assim, pontos de nucleação. Dezenas de milisegundos depois, o fenômeno das ondas de evaporação é disparado, ou seja, é formada uma onda de evaporação a partir da superfície livre do líquido e se movimenta axialmente à direção da base do tubo. Nas observações realizadas, pode-se notar que a espessura da onda de evaporação é sempre menor que o diâmetro do tubo de vidro e a onda se propaga com uma velocidade média bem definida. A velocidade da mistura bifásica (verificada a condição de Chapman-Jouguet – veja detalhes no Capítulo 5) é sônica em relação à onda de evaporação.

Hahne e Barthau (2000) repetiram esses experimentos e obtiveram resultados idênticos. Utilizaram em seus experimentos o fluido refrigerante R11, em alguns desses experimentos inseriram dentro do tubo de vidro, insertos metálicos. Na superfície desses insertos, através dos registros fotográficos, é possível observar claramente a nucleação de bolhas.

Shepherd (1981), Shepherd e Sturtevant (1982) e Frost e Sturtevant (1986) verificaram através da documentação fotográfica do fenômeno a presença de ondas de evaporação em uma microescala dentro de gotas de butano quando submetidas ao limite de metaestabilidade, conforme esquematicamente representado na Fig.2.3a. Emrich (1985) analisou uma onda de evaporação circunferencial para CO₂ líquido superaquecido, cuja expansão é na direção radial (veja Fig.2.3b). Outras ocorrências do fenômeno das ondas de evaporação são os jatos evaporativos (Fig.2.3c) – detalhes na Seção 2.3 e dentro de tubos de orifícios (veja Seção 2.5 e também a Fig.1.2a).

Outros trabalhos investigaram a exposição súbita de um líquido à baixa pressão, Alamgir e Lienhard (1981) analisaram o fenômeno transitório da súbita depressurização da água, Peterson et al. (1984) estudaram o fenômeno usando em seu experimento técnicas fotográficas de alta velocidade associadas à interferometria. Seus experimentos foram capazes de capturar a evaporação rápida e comparar a evaporação simples, obtendo resultados de transferência de massa de dez a doze vezes maior quando o fenômeno de evaporação rápida ocorre.

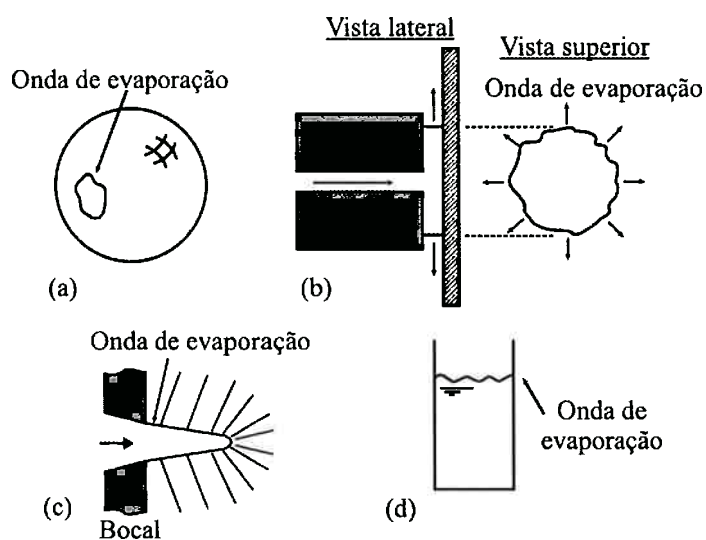


Figura 2.3 (a) onda de evaporação em microescala dentro de uma gota de líquido superaquecido; (b) evaporação na direção radial; (c) jatos evaporativos altamente superaquecidos; (d) onda de evaporação normal plana. (Simões-Moreira, 1999).

Saury et al. (2002) também examinaram o fenômeno de evaporação rápida, contudo concentraram-se no estudo de filmes de água de espessura de até 15 mm. Propuseram uma relação entre a massa final de líquido evaporada por “flashing” e o superaquecimento do meio líquido. E identificaram os parâmetros que influenciam a cinética de mudança de fase (para o caso em estudo), que segundo eles, são a temperatura inicial do filme de líquido e o grau de superaquecimento do mesmo.

Finalmente a evaporação superficial ou evaporação em piscina não se desenvolve como no caso das ondas de evaporação, ela depende de pontos de nucleação para que ocorra evaporação. Entre eles: paredes rugosas, superfícies com irregularidades, solda (como em tubulações com costura), impurezas presentes no interior do escoamento e partículas quaisquer.

2.2 Os padrões de escoamento para jatos evaporativos

Para esse tópico será feita uma análise dos padrões de escoamento através de descrições encontradas na literatura, as quais apresentam um vasto registro experimental. Segundo Bailey (1951), o escoamento de água saturada ou próxima da saturação, através de bocais e tubulações, tem sido objeto de estudo desde 1892. Muitos trabalhos restringiram-se a pequenas faixas de variação das condições experimentais e com isso obtiveram parcialmente as características dos escoamentos. Foram selecionados os trabalhos mais relevantes e neste item é discutido um panorama dos padrões de escoamento dos jatos evaporativos.

Nas observações feitas a seguir é admitido que o fluido, mantido a uma determinada pressão e temperatura, é injetado através de um bocal (orifício) em uma câmara de pressão controlada (câmara de injeção ou de baixa pressão). Os padrões de escoamento são válidos apenas se mantido o regime permanente.

Para os casos em que a pressão na câmara de injeção é maior que a pressão de saturação do líquido à temperatura de injeção, o jato permanece no estado líquido durante o processo de injeção (inclusive dentro da câmara de baixa pressão), seguindo as características do escoamento incompressível, características essas que são amplamente encontradas na literatura básica da mecânica dos fluidos (Fig.2.4a). Quando a temperatura inicial é incrementada, ou há uma diminuição na pressão na

câmara de injeção, sendo seu valor menor que a pressão de saturação para a temperatura de injeção, o líquido atinge o superaquecimento ou, como já mencionado, fica metaestável. Para esse grau de moderado superaquecimento, Wildgen e Straub (1989), realizaram análises usando como fluido teste água, inicialmente subresfriada. Alguns trabalhos precederam os estudos realizados por Wildgen e Straub, como por exemplo, o trabalho de Kitamura et al. (1986), contudo a descrição dos fenômenos de evaporação e a análise dos padrões de escoamento e sua ocorrência, não foram tão bem explorados quando no trabalho deles.

Wildgen e Straub encontraram três mecanismos distintos de mudança de fase para esses jatos: “wall boiling”, “particle boiling” e “surface boiling”, traduzidos neste texto como evaporação na parede, evaporação nucleada por partículas e evaporação localizada (ou na superfície do jato) (veja Fig.2.4b, Fig.2.4c e Fig.2.4d). Em todos esses experimentos a nucleação homogênea é descartada devido ao baixo grau de superaquecimento que a água atinge.

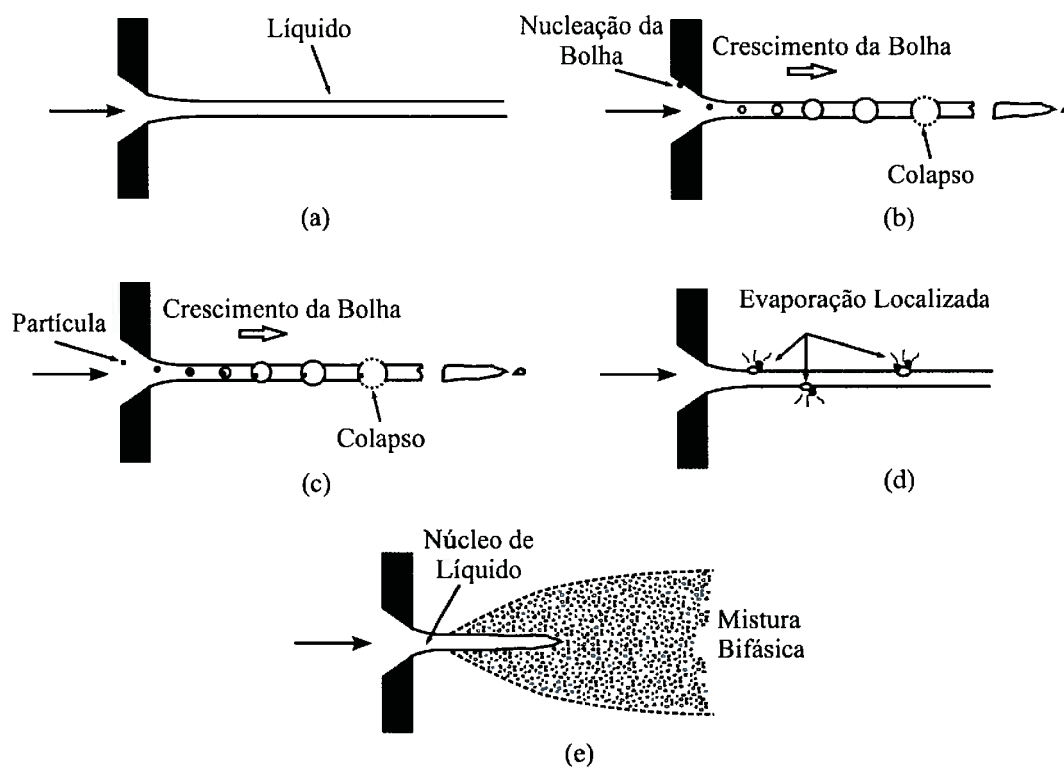


Figura 2.4 Padrões de escoamento para jato evaporativo. (Wildgen e Straub, 1989 e Ramamurthi e Nandakumar, 1994).

A evaporação na parede interna do bocal ocorre, entre outros motivos, pela presença de poros, cavidades e imperfeições que fazem parte da superfície do mesmo. Essas imperfeições geradas no processo de confecção do bocal nucleiam as bolhas que, por sua vez, são arrastadas pela corrente e durante o processo aumentam seu tamanho pela diminuição de pressão até o ponto de interromper a continuidade do jato, quando colapsam. Todavia, para os estudos mencionados, os bocais possuíam um comprimento insuficiente para que esse mecanismo de nucleação heterogênea fosse observado, e sendo assim, tinham comportamento semelhante a orifícios de cantos vivos.

Lienhard e Day (1970) desenvolveram correlações empíricas para prever a posição de colapso do filete de líquido para jatos de água e também de nitrogênio líquido nos casos onde não há superaquecimento do líquido, apresentados esquematicamente na Fig.2.4a como sendo contínuos, contudo, podem sofrer interrupções causadas por instabilidades hidrodinâmicas e aerodinâmicas (veja Fig.2.6a). Também foram propostas correlações para prever a distância de colapso nos casos onde há superaquecimento do líquido (representados na Fig.2.4b).

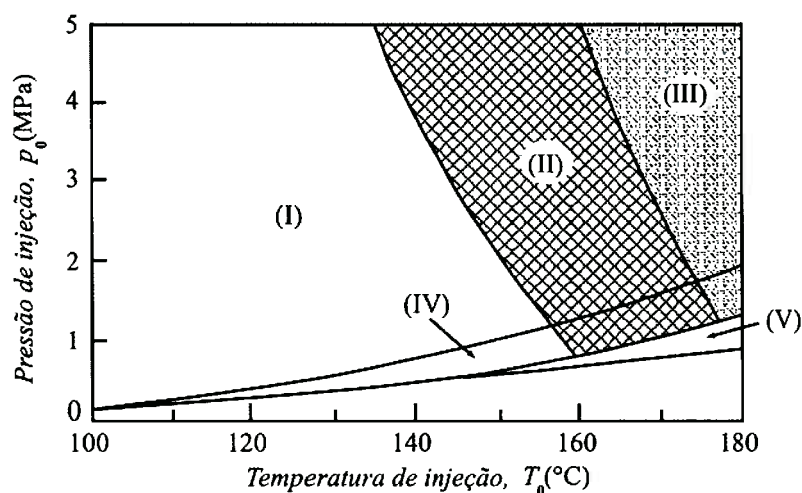
Para velocidades mais elevadas, um tipo de evaporação que ocorre apenas na superfície do jato foi verificado pelos pesquisadores (evaporação localizada). Segundo eles, esse mecanismo de mudança de fase ainda não foi completamente esclarecido e, uma das explicações apresentadas, foi que em bocais curtos há formação de uma fina camada limite que introduz gradientes de velocidade e flutuações de pressão na saída do bocal que tendem a se amplificar, causando nucleação de bolhas na superfície do jato. A quantidade de vapor gerada por esse mecanismo é extremamente baixa se comparada àquela gerada pelos outros fenômenos.

Por fim, a evaporação nucleada por partículas acontece como o próprio nome sugere, devido à presença no escoamento de partículas que nucleiam as bolhas. Como era de se imaginar, esse mecanismo depende do tamanho e da quantidade de partículas presentes no escoamento. As bolhas formam-se no interior do líquido e antes de entrarem em colapso, podem atingir, segundo os experimentos, tamanhos de até cinco vezes o diâmetro do jato. Ao contrário da evaporação localizada na

superfície do jato, a evaporação nucleada por partículas independe do tamanho ou formato do bocal.

Na literatura, por vezes, a evaporação na parede, localizada na superfície ou a evaporação nucleada são denominadas genericamente de nucleação heterogênea. A Fig.2.5 mostra a influência das condições de injeção (pressão p e temperatura T – apresentadas com o índice 0) nos padrões de escoamento.

Aumentando ainda mais o grau de superaquecimento do jato de líquido, observa-se que à certa distância do ponto de injeção, a nucleação e o crescimento das bolhas produzem flutuações de pressão que conduzem a desintegração do jato contínuo. A representação esquemática pode ser vista na Fig.2.4e, que foi retirada do trabalho de Ramamurthi e Nandakumar (1994) cuja estrutura já fora observada por Kitamura et al. (1986) usando água e também etanol como fluidos de teste. Kitamura e seus colaboradores também verificaram efeitos da presença de partículas sólidas e gases não condensáveis utilizando nos experimentos água para consumo residencial (“city water”). Os resultados foram comparados a amostras de água desionizada, amostras sem gases dissolvidos e amostras de água com a presença de ar. Não foram publicadas as quantidades de gases dissolvidos ou a concentração dos resíduos sólidos nas amostras.



- (I) Sem evaporação
- (II) Evaporação localizada na superfície do jato
- (III) Jato sofre colapso e há grande evaporação
- (IV) Nucleação por presença de partículas
- (V) Nucleação na parede do bocal

Figura 2.5 Padrões de escoamento para diversas condições iniciais para injeção de água. O bocal é de cantos vivos e diâmetro de saída de 0,5mm. Wildgen e Straub (1989).

Segundo os autores, as diferenças nas medições das vazões em massa não eram significativas para os diversos casos, mantidas as mesmas condições experimentais. Fato o qual leva à concluir que a concentração de gases dissolvidos e partículas deveria ser muito pequena, pois Gemci et al. (2001) estudaram a influência da presença de gases durante o processo de injeção de líquidos, especialmente nitrogênio em água ou nitrogênio em água mais acetona, e notaram grande dependência da atomização do jato como função das concentrações de gás. Uma das conclusões do trabalho de Gemci e seus colaboradores sobre essas misturas é que a atomização de um líquido, mesmo que possua pressão de saturação relativamente alta (por exemplo, água), pode ser bastante incrementada com a adição de líquidos com pressão de saturação baixa como a acetona.

A Fig.2.6 apresenta alguns resultados de Kitamura et. al. (1986) para injeção de água. A correspondência em relação às representações dos padrões já descritos na Fig.2.4 é seguinte: a Fig.2.4a corresponde à Fig.2.6a, a Fig.2.4b e a Fig.2.4c correspondem à Fig.2.6 b e finalmente a Fig.2.4e corresponde à Fig.2.6d. Peter et al. (1994) e Peter et al. (1995) também conseguiram obter os mesmos resultados para os casos mencionados.

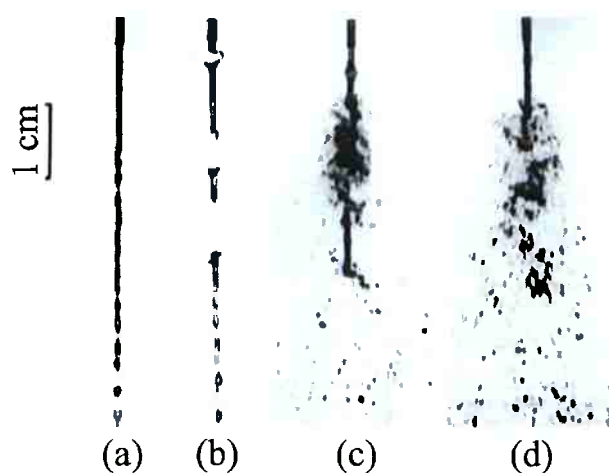


Figura 2.6 Padrões de escoamento obtidos por Kitamura et. al (1986) para injeção de água. Diâmetro do bocal de injeção igual a 0,54 mm. As condições de velocidade na saída do bocal de injeção, pressão de injeção, e diferença entre a temperatura de injeção do fluido e a temperatura de saturação (correspondente à pressão de injeção), são respectivamente: (a) 8,5 m/s, 760 mmHg, valor negativo ; (b) 8,65 m/s, 22 mmHg, 28,5 °C ; (c) 8,22 m/s, 23 mmHg, 45,4 °C ; (d) 8,22 m/s, 20 mmHg, 48 °C.

O intuito do presente trabalho não é estudar nenhum dos tipos de jatos apresentados anteriormente, cuja descrição tem finalidade de situar a pesquisa e caracterizar algumas particularidades. O padrão de escoamento de interesse é aquele obtido quando se atingem graus muito mais acentuados de metaestabilidade, os quais serão denominados jatos evaporativos altamente superaquecidos. Tais padrões foram originalmente estudados por Kurschat et al. (1992), Athans (1995), Simões-Moreira (1999), Vieira (1999), Angelo (2000), Simões-Moreira et al. (2002) e Vieira (2004). Nesses estudos é possível encontrar uma análise experimental e um importante trabalho de documentação fotográfica, bem como uma análise teórica através de abordagem numérica. Os trabalhos de Kurschat et al. (1992) e Simões-Moreira (1999) utilizaram o conceito das ondas de evaporação no modelamento matemático do jato evaporativo e também analisaram o problema da determinação da posição de uma onda de choque, associada com o jato evaporativo através de um modelo matemático unidimensional. Simões-Moreira (1999) empregou de modo pioneiro a teoria das ondas de evaporação oblíquas.

Algumas fotos retiradas do trabalho de Kurschat et al. (1992) são apresentadas na Fig.2.7. Na Fig.2.7 o índice 0 indica as propriedades iniciais antes da injeção (líquido) e o índice ∞ indica a pressão na câmara de injeção. Padrões de escoamento descritos anteriormente e esquematizados na Fig.2.4, foram observados.

A correspondência entre os padrões de escoamento e as fotografias é a seguinte: Fig.2.4a corresponde à Fig.2.7a, Fig.2.4b corresponde à Fig.2.7b e finalmente a Fig.2.4e corresponde à Fig.2.7c. Para obter tais registros fotográficos foi usada uma substância de complexidade molecular elevada (veja detalhes no Capítulo 4) o C_6F_{14} (perfluor-n-hexano).

Os padrões de escoamento de interesse são os das figuras: Fig.2.7d, Fig.2.7e e Fig.2.7f. Para esses casos, onde o grau de superaquecimento no bocal torna-se bem alto, a estrutura do jato é formada por um núcleo líquido no estado metaestável circundado por uma região de mistura bifásica que apresenta velocidade supersônica e uma onda de choque com formatos entre elipsóides e esferóides.

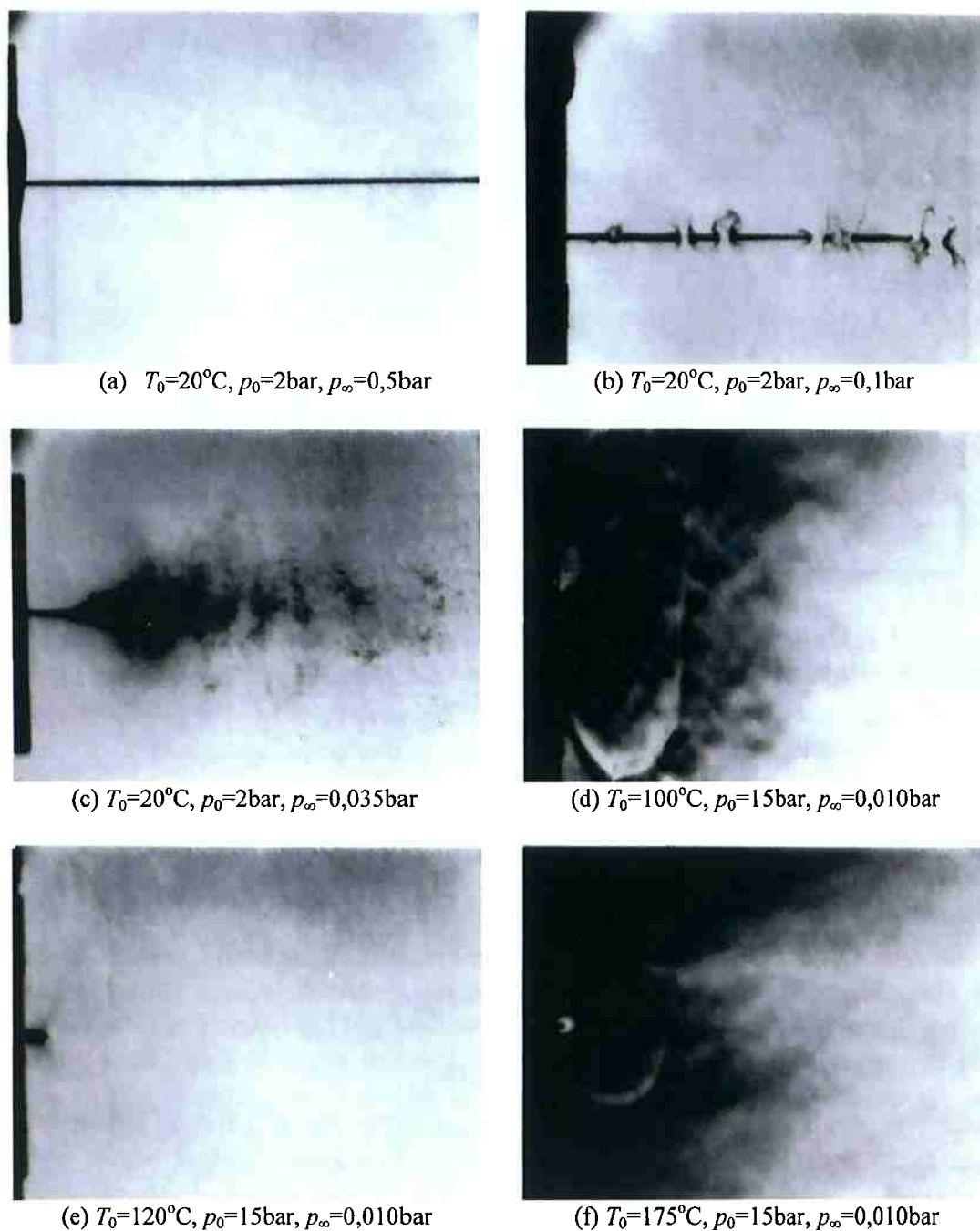


Figura 2.7 Jatos de diferentes geometrias, com crescentes graus de superaquecimento para o perfluor-n-hexano. (Kurschat et al., 1992).

2.3 Jatos evaporativos altamente superaquecidos

Esses tipos de jatos são provenientes da injeção de líquidos mantidos à alta temperatura e pressão em câmaras de baixa pressão (abaixo da pressão de saturação à temperatura de injeção). Nos experimentos os bocais têm razão entre o comprimento e o diâmetro, inferior a cinco e são do tipo convergente. Sua construção é tal que a rugosidade na superfície é bastante baixa, no intuito de diminuir o efeito da nucleação heterogênea. O líquido não contém gases dissolvidos ou partículas sólidas onde possam ocorrer pontos de nucleação.

Para os jatos evaporativos altamente superaquecidos, logo após a saída do bocal, há formação de uma pluma, em outras palavras, um acentuado espalhamento e uma grande nuvem de gotículas. Oza (1984) e Oza e Sinnamon (1983) tentaram explicar o motivo pelo qual o jato diverge imediatamente após a saída do bocal, quando se encontra altamente superaquecido. Eles admitiram que a evaporação e o rápido crescimento de bolhas ocorriam dentro do injetor, atingindo um escoamento bifásico e, portanto, já parcialmente atomizado na saída do convergente. Deste modo, ainda segundo estes autores, imediatamente após deixar a seção de saída do injetor o escoamento se assemelharia ao escoamento de um gás como um jato supersônico bloqueado (compressível) subexpandido. Reitz (1990) colocou em dúvida essas observações. Montou experimentos e registrou o fenômeno combinando técnicas de iluminação e fotografias de alta velocidade (tempos de exposição da ordem de nano segundos). Nestas fotografias era possível identificar claramente um núcleo líquido, ou seja, que o jato emergia do bocal e adentrava na câmara de injeção mantendo-se no estado líquido. Fato ignorado por Oza e Sinnamon, pois em suas fotografias que utilizaram iluminação convencional, o núcleo de líquido era completamente obscurecido pela nuvem bifásica que estava a sua volta.

Athans (1995) conduziu experimentos com jatos evaporativos superaquecidos e também percebeu que na saída do bocal, o jato ainda permanece no estado líquido. Em seus experimentos, ele mediu o comprimento de extinção de núcleo de líquido. Uma fotografia de um de seus experimentos pode ser vista na Fig.2.8.

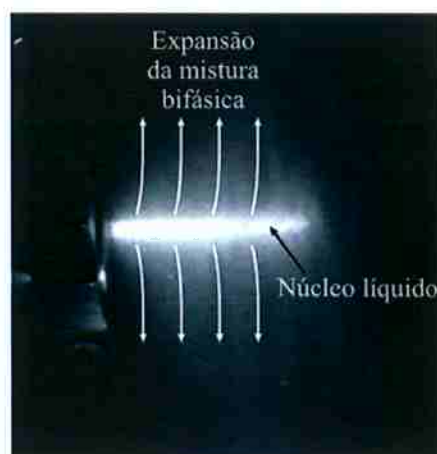


Figura 2.8 Núcleo de líquido de um jato evaporativo altamente superaquecido. Fluido teste iso-octano (Athans, 1995).

Um formato, que pode ser aproximado por um cone, é passível de ser observado em diversos casos, contudo, não foram apresentadas em seu trabalho correlações empíricas ou expressões analíticas genéricas para determinar estas dimensões frente às condições experimentais.

Na Fig. 2.8 a região clara é a região do núcleo de líquido. Na fotografia original de Athans são observadas linhas de corrente do escoamento da mistura bifásica. Essas linhas indicam uma expansão quase radial, mostrando que o fluido ao atravessar a superfície do núcleo líquido muda completamente a direção de sua velocidade, sofrendo um grande giro, quase atingindo o ângulo de noventa graus.

O núcleo de líquido pode ser observado em outros tipos de escoamentos semelhantes (veja Seção 2.5 deste capítulo).

A comparação do jato evaporativo altamente superaquecido ao jato supersônico subexpandido (em gases) revela grandes diferenças na estrutura dos escoamentos dos mesmos. Um gás em escoamento subsônico, acelerado em um bocal convergente atingirá número de Mach unitário na seção de saída se a pressão no ambiente de descarga for igual à menor pressão obtida por um processo de expansão isentrópico durante o escoamento no interior do dispositivo. Pressões menores a essa (no ambiente de descarga) não modificam a distribuição de pressões dentro do bocal, e por esse motivo a vazão mássica também fica inalterada, fato conhecido na literatura como bloqueio. Isso ocorre porque as variações das propriedades em uma região do escoamento são transmitidas a outras na velocidade local do som. Nos casos onde o fluido na saída do bocal tem velocidade igual à

velocidade do som (Número de Mach unitário), as informações de pressões do ambiente inferiores à pressão isoentrópica, não ultrapassam a seção de saída do bocal e desta forma não são sentidas no interior do convergente.

Nestes casos, a passagem de escoamento subsônico para supersônico ocorre fora do bocal, através de um leque de expansão; como pode ser visto esquematicamente na Fig.2.9. O leque de expansão origina-se na borda do convergente.

As ondas de expansão presentes nos jatos supersônicos bloqueados não são vistas nos jatos evaporativos altamente superaquecidos. E, como citado, o fluido adentra a câmara de baixa pressão nos jatos evaporativos no estado líquido.

Tratando-se de escoamento de líquido, a hipótese de fluido incompressível é razoável, e sendo assim, desprezando as perdas por atrito é possível o uso da equação de Bernoulli que indica, através da utilização da vazão mássica experimental, que o líquido na saída do bocal; obrigatoriamente, está altamente superaquecido ou metaestável. Entretanto, essa análise só é válida se a pressão na câmara de injeção estiver significativamente abaixo da pressão de saturação correspondente à temperatura de injeção do líquido.

De acordo com as vazões em massa obtidas experimentalmente (Vieira, 1999 e 2004), mantidas constantes as condições de injeção, realizando experimentos com pressões na câmara de injeção decrescentes, é observada a “blocagem” do bocal, ou seja, a partir de um certo valor de pressão na câmara não há incremento na vazão mássica. A blocagem também foi constatada em alguns experimentos de Attou et al. (2000).

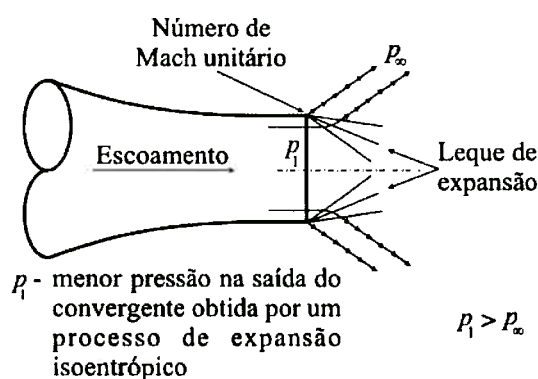


Figura 2.9 Padrão esquemático do escoamento de um jato subexpandido na saída de um bocal convergente.

Sabendo que a velocidade do som nos líquidos é relativamente alta em comparação às velocidades que o escoamento atinge durante a passagem pelo bocal (assim na seção de saída do bocal o escoamento é subsônico), a blocagem decididamente não deveria ocorrer, salvo nos casos onde a pressão de injeção fosse exageradamente alta, casos estes que não serão tratados nessa tese. A saída para esse aparente paradoxo foi apresentada por Kurschat et al. (1992) e Simões-Moreira (1999). Segundo esses autores, a evaporação ocorre na superfície do núcleo de líquido metaestável. Essa região pode ser concebida como uma onda de evaporação estacionária (em relação a um referencial fixo ao laboratório) tal qual uma onda de deflagração em gases em combustão. As ondas de deflagração obedecem à solução de Chapman-Jouguet (C-J) que impõe a condição sônica para a componente normal da velocidade à jusante da onda de evaporação, fato que justifica a blocagem do escoamento.

A onda de evaporação, como citado anteriormente, é uma descontinuidade no escoamento; o qual na prática submete o fluido à uma expansão não isoentrópica na superfície do núcleo de líquido, assim, a mudança de fase ocorre numa região pouco espessa se comparada às dimensões das maiores escalas do escoamento.

O Capítulo 3 descreve os principais processos termodinâmicos presentes nos jatos evaporativos altamente superaquecidos.

2.4 Arranjo experimental típico

O arranjo experimental apresentado a seguir é utilizado no trabalho de Vieira (1999 e 2004), mas também foi utilizado por outros pesquisadores, entre eles Kurschat et al. (1992) e Athans (1995), com algumas alterações, sendo bastante adequado ao estudo dos jatos evaporativos. Um esquema pode ser visto na Fig.2.10a.

O sistema é capaz de controlar simultaneamente a pressão e temperatura de injeção do líquido de teste, bem como a pressão na câmara de injeção. A câmara de injeção está ligada a um reservatório de 440 litros que pode ser considerado como de grandes dimensões, dada a pequena quantidade de fluido de teste injetada. O sistema para obtenção de vácuo na câmara de baixa pressão não está ilustrado na Fig.2.10, mas é composto de diversos equipamentos; entre os quais uma bomba de vácuo, um

condensador de vapores e instrumentação. O injetor é do tipo convergente de formato cônico, seu material de confecção é o aço carbono. O bocal é circundado externamente por uma região que é preenchida com óleo, cuja função é manter a temperatura do fluido de teste homogênea e no valor desejado. Inicialmente a haste do cilindro pneumático obstrui a passagem do fluido de teste para a câmara de injeção. A pressão na linha que alimenta a injeção é mantida constante através de um sistema de pressurização por gás nitrogênio. Um importante componente do sistema de pressurização é a câmara de expansão responsável pelo amortecimento de vibrações oriundas dos transientes de fechamento, e abertura da seção de testes pelo cilindro pneumático. Há monitoramento em pontos estratégicos do sistema cuja descrição e posicionamento foge do propósito dessa breve exposição.

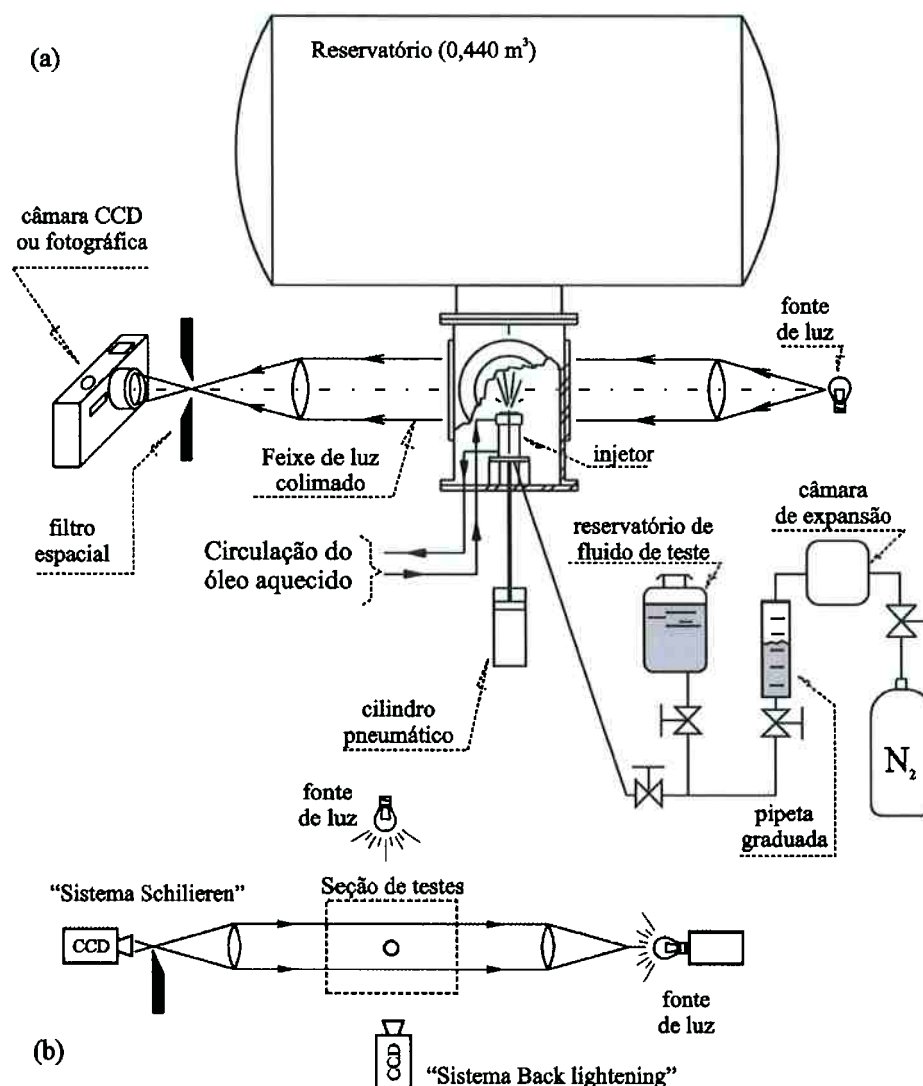


Figura 2.10 (a) Arranjo experimental; (b) Sistemas ópticos (Vieira, 1999 e 2004).

A vazão em massa é medida a partir de uma metodologia bastante precisa e os sinais de pressão de injeção e temperatura de injeção revelaram a capacidade do sistema de se manter em regime permanente por um período suficientemente grande para obtenção do registro fotográfico do fenômeno.

O registro fotográfico nos experimentos de Viera (2004) é feito através de dois métodos diferentes (veja Fig.2.10b). Um sistema óptico baseado no método clássico “schlieren” na configuração do tipo Z. Nesta configuração a aquisição da imagem é feita através de uma câmera CCD, e o sistema é capaz de obter fotografias de alta velocidade, cujos tempos de exposição são da ordem de 0,1 ms. Um segundo sistema, que faz uso de iluminação lateral da seção de testes, conhecido como “back lightening”, também é utilizado. Cada um dos sistemas ópticos é capaz de obter fotos que realçam características diferentes do escoamento dos jatos evaporativos. O sistema “schlieren” destaca a onda de choque, ao passo que o sistema de iluminação lateral evidencia o núcleo de líquido.

2.5 Escoamento através de singularidades

É possível, sob determinadas condições, que escoamentos através de orifícios, passagens de válvulas, tubos capilares, bocais, entre outros, atinjam a metaestabilidade. Bailey (1951) estudou o escoamento de água próxima do estado de saturação ou saturada através de orifícios, bocais e tubos curtos de diâmetros reduzidos, preocupando-se em determinar a vazão em massa através desses dispositivos, em função da diferença de pressões à jusante e à montante dos mesmos. Em seu trabalho são discutidos alguns conceitos fundamentais do comportamento de tais escoamentos e citados a ocorrência do superaquecimento do líquido e da blocagem do escoamento. Na formulação tradicional, que considera o início da mudança de fase ao se atingir nesses escoamentos a pressão de saturação correspondente à temperatura do mesmo, revelou, segundo esse último autor, uma discrepância em relação aos dados experimentais, quando comparadas às vazões mássicas em termos do coeficiente de descarga. Valores estes que estão entre 2 até 7,5. Uma das explicações é o retardamento da formação de bolhas, o que revela a condição de metaestabilidade de tais escoamentos. Pasqua (1953) obteve os mesmos

resultados usando o fluido refrigerante R12 escoando em tubos de orifício (tubos curtos). Pasqua relata que o estado metaestável não pode ser medido devido à dificuldades de natureza prática, contudo, a vazão mássica, que pode facilmente ser medida, expõe claramente que existe o estado metaestável no escoamento.

Os padrões de escoamento obtidos por Bailey (1951), Pasqua (1953) e Kim (1993) são representados na Fig.2.11 em tubos de orifício de sistemas de ar condicionado. Com relação à Fig.2.11, líquido na entrada do tubo de orifício como líquido subresfriado corresponde à linha OABCD e líquido saturado à linha OEF. O eixo das abscissas refere-se à diferença de pressões entre a entrada e a saída do tubo de orifício, e o eixo das ordenadas a vazão mássica. O segmento OA caracteriza o tubo completamente preenchido de líquido, AB a transição do escoamento que preenche completamente o tubo para o escoamento equivalente através de um orifício (de mesmo diâmetro do tubo de orifício), BC é o escoamento que ocorreria através de um orifício e CD um patamar indicando fluxo de massa constante.

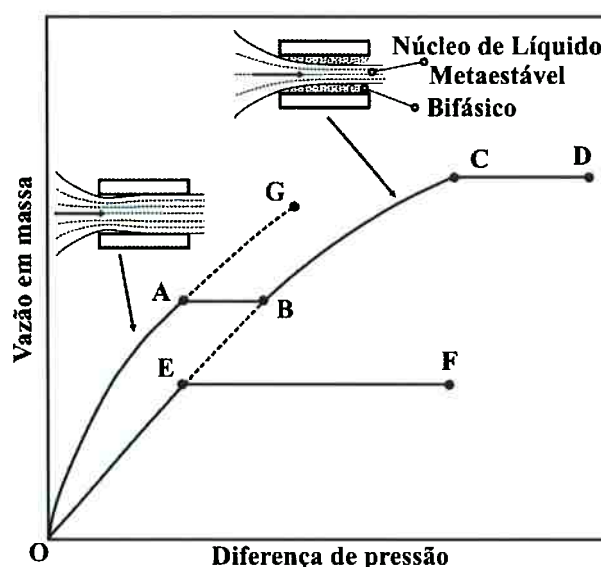


Figura 2.11 Padrões de escoamento e relação qualitativa com a vazão mássica em função da diferença de pressão à montante e à jusante das singularidades observados por Pasqua (1953).

O ponto A é função da temperatura e pressão iniciais. No ponto B o fluido está completamente separado da parede do tubo e a pressão de descarga corresponde a pressão de saturação à temperatura inicial (entrada) do fluido. Entre os pontos A e B, a vazão em massa se alterna à médias estatísticas entre as curvas AG e EB. Entre os pontos B e C a mudança de fase ocorre apenas na superfície do núcleo de líquido, que está metaestável, sendo que o espaço anular entre o tubo e o núcleo metaestável se encontra preenchido com vapor. Quanto menor for a pressão na saída do tubo de orifício maior será o grau de metaestabilidade alcançado, até o ponto C onde ocorre bloqueio do escoamento. A bloqueio do escoamento é caracterizada pelo não incremento da vazão mássica, apesar da diminuição da pressão à jusante do dispositivo.

O núcleo de líquido metaestável é um conceito que foi introduzido por Silver e Michell (1945). Eles afirmaram que a mudança de fase acontece apenas na superfície desse núcleo. Segundo Pasqua (1953) o núcleo de líquido pode ser perturbado, através de vibrações ou quaisquer influência externa nucleando a mudança de fase.

O abrupto aumento de área de seção transversal de uma tubulação foi objeto de estudo de Attou et al. (2000). Foram estudados escoamentos de água sob três condições experimentais à montante do alargamento: líquido altamente subresfriado, líquido próximo da saturação e mistura bifásica (com pequeno título). Três padrões distintos foram obtidos e podem ser vistos na Fig.2.12.

Para o caso de fluido altamente subresfriado na seção à montante ao alargamento, o início do fenômeno de evaporação rápida ocorre logo após o fluido deixar o mesmo. Há formação de um núcleo de líquido circundado por vapor. De acordo com os autores, o padrão observado não é influenciado pela pressão à jusante e, segundo medições, a pressão na base do alargamento (pressão na região de separação) mantém-se igual à pressão média, apenas um pouco atrás do mesmo. No caso do líquido próximo da região de saturação, na entrada da singularidade, os autores desse trabalho destacam que, as linhas de corrente do escoamento central nas vizinhanças do alargamento divergem fortemente do eixo do duto.

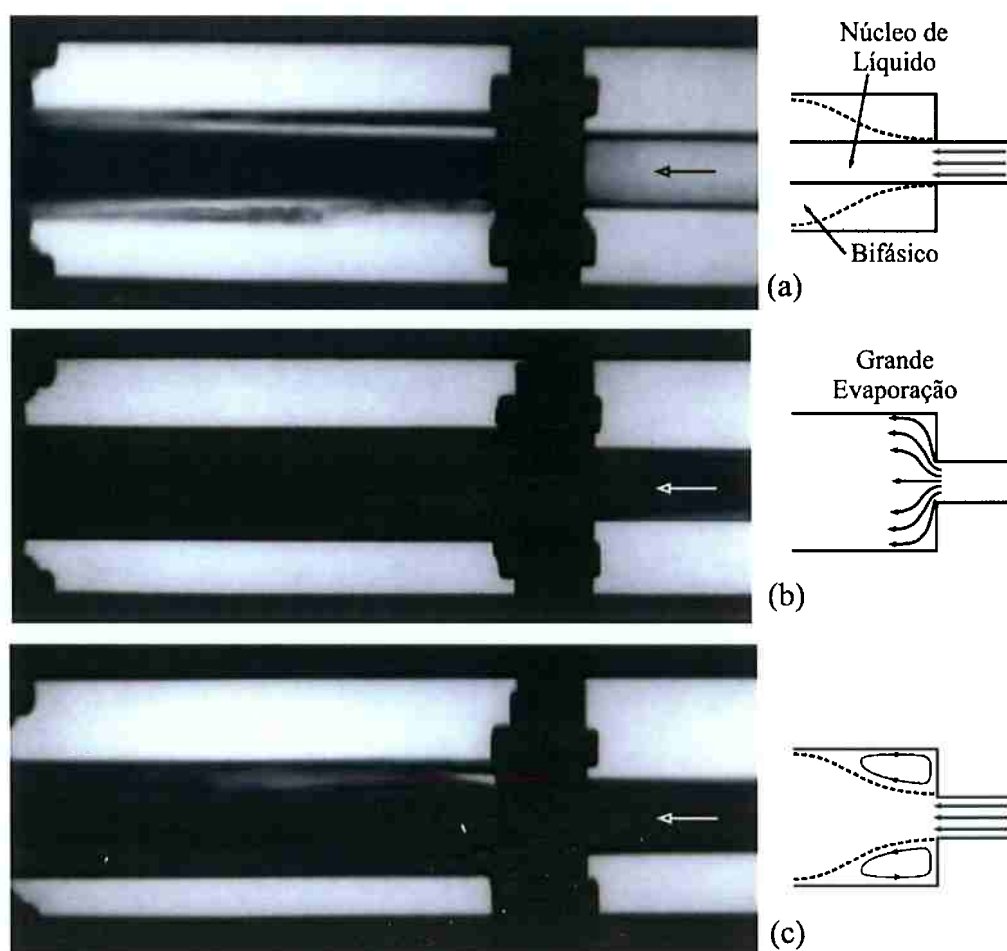


Figura 2.12 Escoamento de água para várias condições de injeção através um alargamento. As condições de temperatura e pressão à montante e pressão a vários diâmetros à jusante do alargamento são, respectivamente: (a) 120,8°C, 2,96bar, 1,35bar; (b) 150,5°C, 4,96bar, 1,35 bar; (c) Temperatura de saturação (título=0,02), 2,07bar, 1,06bar. Attou et al. (2000).

A pressão à jusante, para estas condições, tem grande influência sobre o padrão do jato expandido. Para o caso de escoamento bifásico à jusante do abrupto aumento de área, há formação de uma zona de recirculação semelhante à observada em escoamentos de líquidos sem mudança de fase. Durante as análises dos resultados do trabalho mencionado, os autores chegaram a conclusões semelhantes àquelas já apresentadas por outros trabalhos, entre elas, a observação de um núcleo de líquido no estado metaestável para alguns experimentos.

Outros autores estudaram o efeito do início do escoamento bifásico em tubulações, tal qual uma linha de água mantida à alta pressão e temperatura exposta, por exemplo, por ruptura à pressão atmosférica. A partir do ponto de ruptura, devido à exposição a uma pressão inferior à pressão de saturação à temperatura de

escoamento, o fluido torna-se metaestável e começa a mudar de fase. A localização do ponto de ruptura na tubulação determina, portanto, o início do escoamento bifásico no interior do tubo. Fraser e Abdelmessih (2002) realizaram estudos experimentais e numéricos para esse caso, colocando na tubulação um fino anel onde a evaporação rápida se iniciava e verificaram o relacionamento entre a vazão em massa crítica (blocagem) e a posição do anel no tubo (ponto de ruptura).

2.6 Observações

Os padrões de escoamentos citados foram obtidos para condições de regime permanente. Injeção de líquidos em altíssimas velocidades em regime transitório apresenta características completamente distintas das descritas. A onda de choque (que avança à frente do jato) possui nessas circunstâncias, um formato que não se assemelha a esferóides ou elipsóides, elas são chamadas normalmente de superfícies de contato. Pianthong et al. (2002) realizaram experimentos de jatos de líquidos em velocidades supersônicas em regime transitório injetando água e óleo diesel a velocidades que atingiam 2000 m/s. Obtiveram padrões como os que podem ser vistos na Fig.2.13.

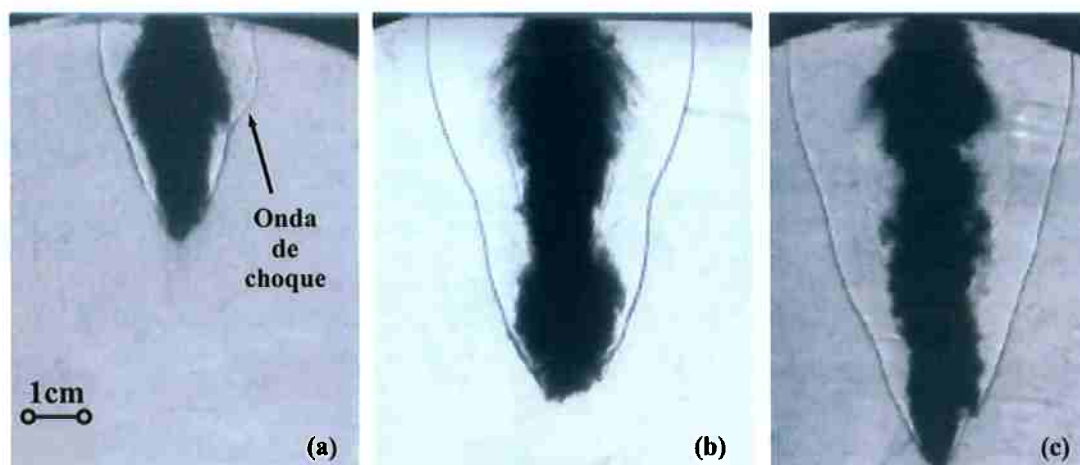


Figura 2.13 Vários estágios do desenvolvimento de um jato supersônico de óleo diesel através da injeção por um bocal de diâmetro de 1mm em uma câmara. Tempos de, respectivamente: (a) $\Delta t = 22\mu s$, (b) $\Delta t = 41\mu s$ e (c) $\Delta t = 64\mu s$. Pianthong et al. (2002).

Na Fig.2.13a, Fig.2.13b e Fig.2.13c é possível observar o desenvolvimento (movimentação) da onda de choque à medida que o líquido de injeção adentra à câmara e verificar que o formato da onda de choque é muito diferente daquele produzido pelos jatos evaporativos altamente superaquecidos como pode ser visto nas figuras Fig.2.7d., Fig.2.7e e Fig.2.7f.

3. PROCESSOS TERMODINÂMICOS

A Fig.3.1a apresenta uma fotografia de um jato de líquido altamente superaquecido (que foi descrito no Capítulo 2), no padrão de escoamento de interesse do estudo deste trabalho. Aqui, serão apresentados os principais processos termodinâmicos para esse tipo de padrão de escoamento. Essa figura é representativa, pois contém as principais características associadas a esse tipo de escoamento. Inicialmente, o fluido encontra-se à alta temperatura e pressão em um reservatório, correspondente ao estado (0). O primeiro processo de expansão (0 para 1) que o líquido experimenta ocorre no interior do bocal. No final desse processo, ou seja, na saída do bocal, o estado metaestável (1) é alcançado. Por hipótese, o estado metaestável (1) será considerado constante e uniforme na seção de saída do bocal e em todo o núcleo de líquido. Na superfície do núcleo de líquido, de acordo com observações experimentais, acontece a súbita mudança de fase (1 para 2) por uma onda de evaporação. As principais características dessa onda de evaporação são: a) a onda de evaporação é uma região bem determinada, estreita e envolve a frente de evaporação; b) após a onda de evaporação o líquido metaestável transforma-se em um escoamento bifásico de alta velocidade e c) para grandes diferenças de pressão, a componente normal da velocidade do escoamento bifásico é sônica em relação à onda de evaporação. A temperatura do fluido diminui após a passagem, através da onda de evaporação (bem como sua pressão). E essa mistura bifásica inicialmente à velocidade sônica (2) expande livremente dentro da câmara de injeção (2 para 3) por um processo quase isoentrópico. Em alguns casos, essa expansão é tamanha que pressões abaixo daquela da câmara de injeção são alcançadas, culminando em uma onda de choque para ajuste das mesmas (3 para 4) seguida de um processo de recuperação de pressão até as condições de reservatório (4 até ∞).

A Fig.3.1b apresenta um desenho esquemático do fenômeno e a Fig.3.1c a representação (qualitativa) em um diagrama, volume específico versus pressão dos processos termodinâmicos descritos no parágrafo anterior.

O escoamento do jato evaporativo altamente superaquecido pode ser dividido em duas partes: aquele que acontece desde o estado de estagnação (0) até a passagem

pela onda de evaporação (2) e a expansão desde o estado (2) até o estado denominado ao longe, passando pela onda de choque em um processo chamado neste trabalho de expansão da mistura bifásica. Por esse motivo o escoamento é resolvido em duas etapas separadas. O salto de propriedades através da onda de evaporação, como já mencionado, foi desenvolvido por Simões-Moreira (1999) e é utilizado para determinar o estado à jusante a essa onda de evaporação considerada do tipo oblíqua. A expansão da mistura bifásica, foco deste trabalho, é resolvida conforme o modelo matemático apresentado nos próximos capítulos.

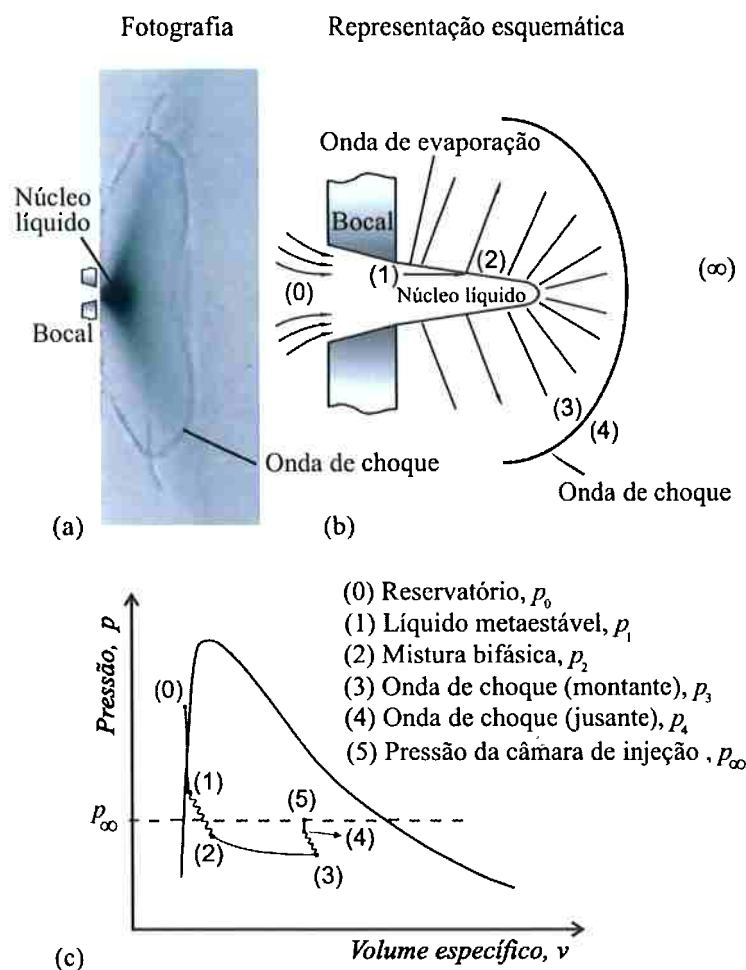


Figura 3.1 Processos termodinâmicos nos jatos evaporativos altamente superaquecidos. (a) Fotografia de Simões-Moreira et al. (2002); (b) representação esquemática do modelo; (c) comportamento termodinâmico em gráfico (qualitativo) volume específico *versus* pressão.

4. DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS PARA A SUBSTÂNCIA DE TESTES

Neste capítulo são apresentados: a equação de estado utilizada, os métodos de obtenção das outras propriedades termodinâmicas e o programa desenvolvido para cálculo das mesmas, as características termodinâmicas da substância de testes – o iso-octano e considerações sobre o superaquecimento ou metaestabilidade.

4.1 Determinação das propriedades termodinâmicas

A determinação das propriedades termodinâmicas se dá através da resolução de equações de estado. As equações de estado são expressões matemáticas que relacionam as propriedades pressão, volume específico e temperatura, com as quais e através de relações termodinâmicas, é possível determinar todas as demais propriedades. Entre elas a entalpia, a energia interna e a entropia. Contudo, não há uma equação de estado abrangente o suficiente para fornecer as propriedades desejadas para todos os tipos de fluidos e condições. Desta forma, é possível dizer que as equações de estado são especializadas para determinadas classes de substâncias e faixas de temperaturas e pressões. À medida que se deseja obter acuidade cada vez maior para as estimativas das propriedades, são necessárias equações de estado mais complexas, como por exemplo, a equação de Lee-Kesler (Lee e Kesler, 1975), todavia, a solução destas equações não é direta ou explícita, o que demanda o emprego de robustos métodos numéricos para solução de equações não lineares. O que se deve salientar é que, quando da determinação de um estado termodinâmico isolado, perfazendo apenas uma única condição, a resolução da equação de estado em si não representa um esforço computacional muito grande. Todavia, quando é necessária a determinação das propriedades termodinâmicas para uma dada região de um escoamento, por exemplo, onde as rotinas de cálculo de propriedades são chamadas centenas, em muitos casos milhares de vezes, como parte da solução completa em conjunto com as equações de conservação (conservação de massa, conservação da quantidade de movimento e conservação de energia) – como

nos métodos numéricos apresentados para solução do escoamento do jato evaporativo – o tempo computacional pode ser muito incrementado, até o ponto de tornar inviável a simulação numérica desse escoamento.

Nos problemas de aerodinâmica uma equação de estado bastante simples e de solução direta fornece bons resultados para a maioria dos problemas. É conhecida como equação dos gases perfeitos e para pressões de até 1% da pressão crítica da substância fornece bons resultados (no estado de vapor). Para o problema do jato evaporativo, onde estão presentes misturas bifásicas, é inviável sua utilização (nem mesmo para a fase de vapor superaquecido ou saturado) sob pena de incorrer em enormes e inaceitáveis erros quando da estimativa das propriedades.

As rotinas para determinação das propriedades termodinâmicas foram empregadas no modelo bidimensional axissimétrico.

4.1.1 Determinação do volume específico

A equação de estado de Lee-Kesler é uma variante de equação de estado de Benedict-Webb-Rubin (BWR) que por sua vez, é a mais complexa das equações de estado cúbicas. Ela acrescenta a última o conceito de fator de acentricidade, ω , originalmente proposto por Pitzer e seus associados (Reid et al., 1987). A equação de Lee-Kesler é uma equação baseada na correlação entre três parâmetros, são eles: o fator de acentricidade e a pressão e temperatura reduzidas.

Por definição, a pressão reduzida (p_{rd}) é a razão entre a pressão e a pressão crítica (p_c) e a temperatura reduzida (T_{rd}) é a razão entre a temperatura e a temperatura crítica (T_c), deste modo:

$$p_{rd} = \frac{P}{p_c}, \text{ e} \quad (4.1)$$

$$T_{rd} = \frac{T}{T_c}. \quad (4.2)$$

O fator de acentricidade está ligado a não esfericidade da molécula da substância. Para gases monoatômicos, segundo Reid et al. (1987), o fator de

acentricidade é nulo, para o metano tem valor muito pequeno, e para os hidrocarbonetos aumenta de valor com o peso molecular.

No caso do programa de estimativa de propriedades desenvolvido pelo autor, é possível montar uma rotina separada para o cálculo do fator de acentricidade ou fornecê-lo como uma constante (como é feito para as estimativas no caso do escoamento do jato evaporativo).

O fator de compressibilidade Z_{comp} , da substância em estudo, é relacionado com o fator de compressibilidade de um fluido simples e de um fluido de referência. Respectivamente denominados aqui com os índices (0) e (r), através da seguinte expressão:

$$Z_{comp} = Z_{comp}^{(0)} + \frac{\omega}{\omega^{(r)}} (Z_{comp}^{(r)} - Z_{comp}^{(0)}). \quad (4.3)$$

O fator de compressibilidade é:

$$Z_{comp} = \frac{p\nu}{RT}, \quad (4.4)$$

onde R é a constante da substância e ν o volume específico.

Através da substituição da pressão e da temperatura pelas definições apresentadas nas equações (4.1) e (4.2), na equação (4.4), temos:

$$Z_{comp} = \frac{p_{rd} p_c \nu}{RT_{rd} T_c} = \frac{p_{rd}}{T_{rd}} \frac{\nu}{R \frac{T_c}{p_c}}. \quad (4.5)$$

Usando na equação (4.5) a seguinte relação:

$$\nu'_{rd} = \frac{\nu}{R \frac{T_c}{p_c}}. \quad (4.6)$$

É possível escrever o fator de compressibilidade assim:

$$Z_{comp} = \frac{p_{rd} \nu'_{rd}}{T_{rd}}. \quad (4.7)$$

Vale lembrar que v'_{rd} não é o volume específico reduzido. Finalmente é possível apresentar a equação proposta por Lee-Kesler, equação que contém doze constantes empíricas:

$$Z_{comp} = \frac{p_{rd} v'_{rd}}{T_{rd}} = 1 + \frac{B_{LK}}{v'_{rd}} + \frac{C_{LK}}{v'^2_{rd}} + \frac{D_{LK}}{v'^5_{rd}} + \frac{c_4}{T_{rd}^3 v'^2_{rd}} \left(\beta_{LK} + \frac{\gamma_{LK}}{v'^2_{rd}} \right) \exp\left(-\frac{\gamma_{LK}}{v'^2_{rd}} \right), \quad (4.8)$$

$$B_{LK} = b_1 - \frac{b_2}{T_{rd}} - \frac{b_3}{T_{rd}^2} - \frac{b_4}{T_{rd}^3}, \quad (4.9)$$

$$C_{LK} = c_1 - \frac{c_2}{T_{rd}} + \frac{c_3}{T_{rd}^3}, \text{ e} \quad (4.10)$$

$$D_{LK} = d_1 + \frac{d_2}{T_{rd}}. \quad (4.11)$$

As constantes para da equação de Lee-Kesler estão listadas na Tabela 4.1.

O processo de obtenção do fator de compressibilidade para um dado fluido segue a seguinte seqüência (supondo como dados de entrada a pressão e a temperatura do fluido que se quer determinar o fator de compressibilidade):

- (1) Usando as propriedades críticas do fluido e as equações (4.1) e (4.2) é possível calcular a pressão e temperatura reduzida;
- (2) Para o fluido simples utilizando a equação (4.8) e os coeficientes calculados por (4.9), (4.10) e (4.11) encontra-se v'_{rd} , denominado $v'^{(0)}_{rd}$. Os doze parâmetros estão tabelados para as substâncias;
- (3) O fator de compressibilidade para o fluido simples pode ser determinado com

$$Z_{comp}^{(0)} = \frac{p_{rd} v'^{(0)}_{rd}}{T_{rd}}.$$

Com a mesma temperatura e pressão reduzidas, os passos (2) e (3) são repetidos para o fluido de referência.

Finalmente, de posse dos fatores de compressibilidade da substância simples e do fluido de referência é possível determinar o fator de compressibilidade para o fluido de estudo via equação (4.3).

Tabela 4.1 Constantes da equação de Lee-Kesler

| Constante | Fluido simples | Fluido de referência | Constante | Fluido Simples | Fluido de referência |
|-----------|----------------|----------------------|------------------|----------------|----------------------|
| b_1 | 0,1181193 | 0,2026579 | c_3 | 0,0 | 0,016901 |
| b_2 | 0,265728 | 0,331511 | c_4 | 0,042724 | 0,041577 |
| b_3 | 0,154790 | 0,027655 | $d_1 \cdot 10^4$ | 0,155488 | 0,48736 |
| b_4 | 0,030323 | 0,203488 | $d_2 \cdot 10^4$ | 0,623689 | 0,0740336 |
| c_1 | 0,0236744 | 0,0313385 | β_{LK} | 0,65392 | 1,226 |
| c_2 | 0,0186984 | 0,0503618 | γ_{LK} | 0,060167 | 0,03754 |

A equação de Lee-Kesler é uma equação não linear e requer o emprego de um método numérico de solução de equações não lineares para determinação dos volumes específicos. No presente trabalho é empregado o método da dicotomia combinado ao método de Newton-Raphson que pode ser encontrado descrito detalhadamente em Press et al. (1992).

4.1.2 Determinação da entalpia específica e da entropia específica

A determinação da entalpia (h) e da entropia (s) específicas será feita usando a teoria das propriedades residuais. As propriedades residuais são definidas pela seguinte equação genérica:

$$M^R = M - M^{ig}, \quad (4.12)$$

onde M representa o valor de uma propriedade termodinâmica extensiva qualquer, o índice (R) indica propriedade residual e o índice (ig) propriedade no estado de gás perfeito. É implícito que tanto a propriedade real M quanto a propriedade no estado de gás perfeito M^{ig} , referem-se às mesmas condições de temperatura e pressão (para o caso de misturas também deve-se manter a mesma composição – neste trabalho não estão sendo analisadas as misturas).

É necessário estabelecer uma ligação direta entre o fator de compressibilidade e as propriedades residuais, já que, se está fazendo uso de uma equação de estado do tipo pressão – volume específico – temperatura.

Usando as transformações de Legendre, que são transformações para sistemas com duas variáveis independentes podemos escrever:

$$dg = -s dT + v dp, \quad (4.13)$$

onde g é a energia de GIBBS e s a entropia (ambas propriedades específicas). Será útil, como artifício de cálculo, usar a seguinte identidade diferencial:

$$d\left(\frac{g}{RT}\right) = \frac{1}{RT} dg - \frac{g}{RT^2} dT. \quad (4.14)$$

Substituindo na equação (4.14) o diferencial da energia específica de GIBBS pela equação (4.13) e a energia de GIBBS pela definição $g = h - T s$, temos :

$$d\left(\frac{g}{RT}\right) = \frac{1}{RT} (-s dT + v dp) - \frac{(h - T s)}{RT^2} dT. \quad (4.14a)$$

Simplificando a equação (4.14a), obtemos:

$$d\left(\frac{g}{RT}\right) = \frac{v}{RT} dp - \frac{h}{RT^2} dT. \quad (4.15)$$

É possível escrever a equação (4.15) para os gases perfeitos (ig):

$$d\left(\frac{g^{ig}}{RT}\right) = \frac{v^{ig}}{RT} dp - \frac{h^{ig}}{RT^2} dT. \quad (4.16)$$

Subtraindo a equação (4.16) da equação (4.15) é obtida uma relação fundamental entre propriedades residuais de fluidos:

$$d\left(\frac{g^R}{RT}\right) = \frac{v^R}{RT} dp - \frac{h^R}{RT^2} dT. \quad (4.17)$$

Pode-se escrever a equação (4.17) da seguinte forma:

$$\frac{v^R}{RT} = \left[\frac{\partial (g^R / RT)}{\partial p} \right]_T, \text{ ou} \quad (4.18)$$

$$\frac{h^R}{RT} = -T \left[\frac{\partial (g^R / RT)}{\partial T} \right]_p. \quad (4.19)$$

Integrando a equação (4.18) entre a pressão zero (ou uma pressão muito baixa p^* , comparativamente à pressão crítica da substância) e uma pressão arbitrária p , é obtida a equação:

$$\frac{g^R}{RT} = \int_{p^*}^p \frac{v^R}{RT} dp, \text{ para } T \text{ constante.} \quad (4.20)$$

Da definição de fator de compressibilidade:

$$v^R = \frac{RT}{p} (Z_{comp} - 1). \quad (4.21)$$

Substituindo a equação (4.21) na equação (4.20):

$$\frac{g^R}{RT} = \int_{p^*}^p (Z_{comp} - 1) \frac{dp}{p}, \text{ para } T \text{ constante.} \quad (4.22)$$

Derivando com relação à temperatura e substituindo na equação (4.19):

$$\frac{h^R}{RT} = -T \int_{p^*}^p \left(\frac{\partial Z_{comp}}{\partial T} \right)_p dp, \text{ para } T \text{ constante.} \quad (4.23)$$

Para o cálculo da entropia específica residual, é usada a relação $g = h - Ts$ escrita para as propriedades residuais em conjunto com a equação (4.22) e também a equação (4.23), assim:

$$\frac{s^R}{R} = -T \int_{p^*}^p \left(\frac{\partial Z_{comp}}{\partial T} \right)_p \frac{dp}{p} - \int_{p^*}^p (Z_{comp} - 1) dp, \text{ para } T \text{ constante.} \quad (4.24)$$

Para o cálculo da entalpia específica e entropia específica dos gases perfeitos são usadas, respectivamente, as seguintes expressões:

$$h^{ig} = h_*^{ig} + \left\langle C_p^{ig} \right\rangle_T (T - T_*), \text{ e} \quad (4.25)$$

$$s^{ig} = s_*^{ig} + \left\langle C_p^{ig} \right\rangle_{\ln T} \ln \frac{T}{T_*} - R \ln \frac{p}{p_*}, \quad (4.26)$$

onde C_p é o calor específico à pressão constante e o índice (*) indica um estado de referência previamente estabelecido, T e $\ln T$ calor específico médio e médio logarítmico.

Integrando as equações (4.22) e (4.23) entre um estado de referência e o estado desejado, usando como equação de estado, a equação de Lee-Kesler, temos:

$$\frac{h^R - h^*}{RT_c} = T_{rd} \left[Z_{comp} - 1 - \frac{b_2 + 2b_3/T_{rd} + 3b_4/T_{rd}^2}{T_{rd}(\nu'_{rd})} - \frac{c_2 - 3c_3/T_{rd}^2}{2T_{rd}(\nu'_{rd})^2} + \frac{d_2}{5T_{rd}(\nu'_{rd})^5} + 3E_{LK} \right], \quad (4.27)$$

$$E_{LK} = \frac{c_4}{2T_{rd}^3 \gamma_{LK}} \left\{ \beta_{LK} + 1 - \left[\beta_{LK} + 1 + \frac{\gamma_{LK}}{(\nu'_{rd})^2} \right] \exp \left[-\frac{\gamma_{LK}}{(\nu'_{rd})^2} \right] \right\}, \quad (4.28)$$

$$\frac{s^R - s^*}{R} + \ln \left(\frac{p}{p^*} \right) = \ln(Z_{comp}) - \frac{b_1 + b_3/T_{rd}^2 + 2b_4/T_{rd}^4}{\nu'_{rd}} - \frac{c_1 - 2c_3/T_{rd}^3}{2(\nu'_{rd})^2} - \frac{d_1}{5(\nu'_{rd})^5} + 3E_{LK}. \quad (4.29)$$

O procedimento para obtenção da entalpia específica residual e da entropia específica residual é semelhante ao empregado para obtenção do volume específico. Após utilizar a seqüência de cálculo apresentada anteriormente, já estão calculadas as grandezas $\nu'_r{}^{(0)}$, $\nu'_r{}^{(r)}$, $Z_{comp}^{(0)}$ e $Z_{comp}^{(r)}$. O procedimento é o seguinte:

- (1) Calcular a diferença de entalpia em relação ao estado de referência para o fluido simples (0), usando a equação (4.27) e (4.28).
- (2) Calcular a diferença de entalpia de modo semelhante ao feito no item (1), agora para o fluido de referência (r).

Para a substância em estudo, são combinados os valores encontrados nos passos (1) e (2):

$$\left(\frac{h^R - h^*}{RT_c} \right) = \left(\frac{h - h^*}{RT_c} \right)^{(0)} + \frac{\varpi}{\varpi^{(r)}} \left[\left(\frac{h^R - h^*}{RT_c} \right)^{(r)} - \left(\frac{h^R - h^*}{RT_c} \right)^{(0)} \right]. \quad (4.30)$$

A obtenção da entalpia específica usa o mesmo procedimento descrito nos itens (1) e (2), contudo utilizando as equações (4.28) e (4.29). A combinação é realizada pela seguinte equação:

$$\frac{s^R - s^*}{R} = \left(\frac{s^R - s^*}{R} \right)^{(0)} + \frac{\varpi}{\varpi^{(r)}} \left[\left(\frac{s^R - s^*}{R} \right)^{(r)} - \left(\frac{s^R - s^*}{R} \right)^{(0)} \right]. \quad (4.31)$$

4.2 Programa de determinação das propriedades termodinâmicas (PROP)

O programa de determinação das propriedades termodinâmicas foi completamente construído pelo autor em linguagem FORTRAN77 e utiliza a equação de estado de Lee-Kesler e a teoria das propriedades residuais conforme descrito. As rotinas são apresentadas no Apêndice I bem como o diagrama de blocos para cada uma delas. A estrutura de chamada da sub-rotina de cálculo de propriedades é a seguinte:

CALL PROP (PROP1, PROP2, v , v_L , v_v , h , h_L , h_v , s , s_L , s_v , IE, ICHAV)
ENTRADAS: PROP1, PROP2 e ICHAV.

Onde PROP1 e PROP2 formam um par de propriedades termodinâmicas obrigatoriamente independentes e os índices (v) e (L) indicam respectivamente o vapor saturado e o líquido saturado. O procedimento descrito para determinação das propriedades termodinâmicas pressupõe que as propriedades temperatura e pressão sejam conhecidas para o cálculo das demais. Nem sempre o par de propriedades termodinâmicas independentes é temperatura-pressão. Por exemplo, em algumas situações estarão disponíveis outras duas propriedades termodinâmicas diferentes da temperatura e pressão, como a pressão e a entropia específica.

Uma equação de estado tão complexa quanto a equação de Lee-Kesler não pode ser colocada na forma canônica, o que impede calcular diretamente as outras propriedades se não for conhecido inicialmente o par temperatura-pressão. Para esses casos há necessidade de uma pesquisa iterativa em função da pressão e temperatura utilizando a equação de estado até a determinação do estado termodinâmico correspondente.

O algoritmo para determinação de propriedades do exemplo em questão (par pressão – entropia específica), inicialmente estima a temperatura que a substância deva estar e determina o estado e sua entropia específica correspondente, esta será comparada com a entropia específica real (valor de entrada). A pesquisa da temperatura continua iterativamente até que se atinja o valor da entropia específica real, dentro evidentemente de uma certa tolerância, ou seja, sempre obedecendo a um

critério de convergência adequado, evitando excessivas iterações e também erros associados à falta de precisão. Levando em consideração que em princípio é desconhecido o estado termodinâmico (líquido comprimido, bifásico ou vapor superaquecido) a eficiência desta procura pode ser muito baixa, ou seja, o tempo de determinação, dependendo do par de propriedades independentes pode ser relativamente alto.

A sub-rotina PROP foi concebida para atender as necessidades do cálculo do escoamento do jato evaporativo e os pares de propriedades termodinâmicas independentes, que podem ser informadas para determinação do estado termodinâmico, constam da Tabela 4.2a, bem como o seletor que distingue o par fornecido.

As demais combinações de pares de propriedades de entrada não foram desenvolvidas e seguem como sugestões do autor para trabalhos futuros para aplicações que as necessitem.

A sub-rotina de cálculo de propriedades retorna para IE um valor que indica o estado da substância conforme a Tabela 4.2b. Caso o estado seja bifásico, há o retorno das propriedades na saturação (v_L , v_v , h_L , h_v , s_L e s_v), do contrário as propriedades calculadas são v , h e s .

Tabela 4.2 (a) Dados de entrada da rotina PROP: Par de propriedades termodinâmicas para a determinação das demais propriedades e correspondente seletor; (b) Seletor que indica o estado termodinâmico da substância.

| Seletor ICHAV | PROPI | PROP2 |
|------------------|-------|--------|
| 1 | T | p |
| 2 | p | s |
| 3 | T | s |
| 4 | p | v |
| 5 | e | ρ |

(a)

| Seletor IE | Estado Termodinâmico |
|---------------|----------------------------|
| 1 | Líquido comprimido |
| 2 | Bifásico (Líquido e Vapor) |
| 3 | Vapor superaquecido |

(b)

A sub-rotina PROP deve ser alimentada por algumas constantes características de cada substância que são declaradas como variáveis globais. Uma sub-rotina denominada REID encontra a substância desejada em um banco de dados que contém as constantes necessárias. A procura da substância no banco de dados pode ser feita por nome ou pela sua fórmula estrutural simplificada. O banco de dados foi obtido de Reid et al. (1987). Contém nesta ordem, a fórmula estrutural simplificada, o nome da substância (em inglês), a massa molecular, a temperatura do ponto de fusão (a pressão de uma atmosfera), a temperatura de saturação (medida a uma atmosfera de pressão), a temperatura crítica, a pressão crítica, o volume crítico, o fator de acentricidade de Pitzer, constantes para cálculo do polinômio de determinação do calor específico à pressão constante, e também as constantes para o cálculo da pressão de saturação segundo as equações recomendadas pela referência.

As sub-rotinas para cálculo da pressão de saturação (PRESSAT – fornecida a temperatura calcula a pressão de saturação e PRESSAT2 – fornecida a pressão calcula a temperatura de saturação) fazem uma escolha automática da equação correta a utilizar, segundo um seletor que é obtido no banco de dados (ICHAVEP= 1, 2 ou 3 – dependendo da substância). As três opções para determinação da pressão de saturação são, respectivamente:

$$\ln(p_{\sigma} / p_c) = (1 - \varepsilon)^{-1} (VPA \cdot \varepsilon + VPB \cdot \varepsilon^{1.5} + VPC \cdot \varepsilon^3 + VPD \cdot \varepsilon^6), \quad (4.32)$$

$$\varepsilon = 1 - T/T_c,$$

$$\ln(p_{\sigma}) = VPA - VPB/T + VPC \cdot \ln(T) + VPD \cdot p_{\sigma}/T^2, \text{ e} \quad (4.33)$$

$$\ln(p_{\sigma}) = VPA - VPB/(T + VPC). \quad (4.34)$$

O índice (σ) indica a propriedade na saturação. O polinômio usado para cálculo do calor específico à pressão constante para os gases ideais para o C_p em J/mol K e a temperatura em kelvins é:

$$C_p = CPA \cdot A + CPB \cdot T + CPC \cdot T^2 + CPD \cdot T^3, \quad (4.35)$$

onde: *VPA*, *VPB*, *VPC*, *VPD*, *CPA*, *CPB*, *CPC* e *CPD* são constantes para cada substância, e como já citado, constam do banco de dados lido pela sub-rotina REID. Uma função chamada CALORESP retorna o valor do calor específico à pressão constante para uma dada temperatura.

4.3 Substância de teste

As simulações numéricas dos escoamentos utilizaram o iso-octano, que é da classe das substâncias orgânicas, conhecidas como alcanos ou hidrocarbonetos parafínicos. Tais substâncias possuem em sua composição química apenas os elementos carbono e hidrogênio, em cadeias abertas e ligações simples entre seus carbonos (acíclicos e saturados). O iso-octano também é designado como 2,2,4 trimetil pentano e sua escolha está ligada ao fato da maioria dos dados experimentais, especialmente os registros fotográficos, estarem disponíveis para tal substância, fornecendo uma quantidade de informações úteis na comparação com os resultados obtidos pelos modelos numéricos. Os códigos computacionais foram construídos de forma genérica e estão habilitados a simular quaisquer outras substâncias.

A utilização do iso-octano nos experimentos deve-se ao fato dele pertencer a uma classe de substâncias cujo comportamento termodinâmico se distingue de outras substâncias que podem ser consideradas simples. O iso-octano é considerado uma substância de complexidade molecular elevada (SCME), na literatura inglesa é designada pelo termo "retrograde". As SCME(s) são substâncias caracterizadas por uma baixa entalpia de evaporação. Para as simulações numéricas esse fato não é uma vantagem (de fato, é uma característica que aumenta o grau de complexidade das rotinas de cálculo – como será explicado adiante), contudo, tratando-se dos experimentos, produz fotografias mais nítidas, devido à menor quantidade de gotículas presentes nos escoamentos, oriundas da evaporação.

As SCME(s) foram amplamente estudadas e seu comportamento descrito detalhadamente por Thompson e Sullivan (1975) e Dettleff et al. (1979) entre outros. Simões Moreira (1997) apresentou importantes resultados experimentais para as SCME(s) que corroboravam as observações dos autores citados e ampliavam significativamente as análises sobre o comportamento termodinâmico das mesmas.

A Fig.4.1 mostra o diagrama entropia específica normalizada (resultado do quociente da entropia específica pela entropia específica no ponto crítico) *versus* temperatura reduzida (obtida pelo quociente entre a temperatura e a temperatura do ponto crítico) para três substâncias de complexidade molecular crescente, ou seja, a substância representada no diagrama da Fig.4.1c é mais complexa que o da Fig.4.1b que por sua vez tem maior complexidade que a da Fig.4.1a. Substâncias com maior grau de complexidade são aquelas que apresentam um maior número de átomos em sua molécula. É possível observar através da Fig.4.1 a crescente inclinação para direita no diagrama para as substâncias mais complexas. Essa inclinação é responsável pelas características incomuns das SCME, que serão descritas a seguir.

Segundo Thompson e Sullivan (1975), podem ser consideradas substâncias de complexidade molecular elevada todos as substâncias orgânicas da classe dos hidrocarbonetos parafínicos que possuem mais átomos de carbono que o propano. Ainda segundo os autores isso ocorrerá sempre que $\tilde{c}_v > 11,2$. Definindo:

$$\tilde{c}_v = c_v^0 / \bar{R}, \quad (4.36)$$

onde c_v^0 é o calor específico à volume constante, calculado para a temperatura crítica supondo comportamento de gás perfeito para a substância e \bar{R} é a constante universal dos gases. As SCME's possuem grande capacidade de armazenar energia interna traduzida pelo alto valor do calor específico.

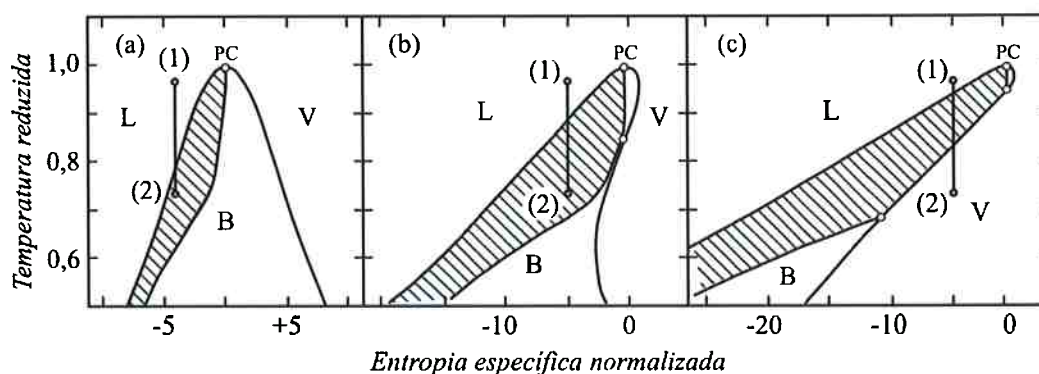


Figura 4.1 Diagrama entropia específica normalizada (ou reduzida) versus temperatura para três substâncias diferentes (Thompson e Sullivan, 1975).

Todas as análises serão feitas para regiões relativamente distantes do ponto crítico. Para o diagrama da Fig.4.1: (a) é água $\tilde{c}_v = 3,46$, (b) é um fluido com $\tilde{c}_v = 24,1$ e (c) é um fluido com $\tilde{c}_v = 51,6$.

Para explicar o comportamento das SCME(s) será utilizado um processo termodinâmico (genérico) de expansão isoentrópica ilustrado na Fig.4.1 (processo E1→E2) nos diagramas Fig.4.1a e Fig.4.1c, representando respectivamente, uma substância simples e uma SCME. Um processo de expansão isoentrópica para uma substância simples inicialmente no estado líquido subresfriado sempre terá como resultado uma mistura bifásica. Por outro lado, o mesmo processo para uma SCME pode resultar em mudança completa de fase, ou seja, é possível atingir o estado de vapor saturado ou superaquecido. As regiões de líquido, bifásico e vapor são representadas respectivamente pelas letras L, B e V e o ponto crítico por PC.

O iso-octano é uma SCME ($\tilde{c}_v = 36,8$) e desta forma, mantidas condições adequadas, poder atingir mudança de fase completa durante a expansão da mistura bifásica. A Fig.4.2 mostra a curva de saturação para o iso-octano em diversos gráficos. É possível, através do gráfico entropia específica versus temperatura, verificar a inclinação para a direita do diagrama. Os códigos computacionais que calculam a expansão da mistura bifásica tiveram que levar em consideração a hipótese de que a mistura bifásica pudesse, durante a expansão, sofrer evaporação completa e atingir o estado de vapor superaquecido. Tal ocorrência aumentou a complexidade do código computacional, exigindo correta identificação e tratamento distinto para os dois estados termodinâmicos durante a solução. Uma das razões do abandono da técnica do falso transitório para solução da expansão pós-onda de evaporação é o fato de tal esquema numérico sofrer muita influência desse comportamento termodinâmico, caracterizado pela possibilidade de mudança completa de fase (veja mais detalhes no Apêndice II). O tempo computacional exigido para atingir a solução de regime permanente pela técnica do falso transitório é muito grande, devido, entre outros motivos, às constantes trocas entre os estados termodinâmicos (mistura bifásica – vapor superaquecido) durante a solução, para um mesmo ponto da malha em instantes sucessivos.

4.3.1 Algumas propriedades do iso-octano

As propriedades para o iso-octano podem ser encontradas em Reid (1987) e foram utilizadas no programa de cálculo de propriedades termodinâmicas. Elas são apresentadas na Tabela 4.3.

O programa de cálculo de propriedades obtém como resultados, valores das propriedades muito semelhantes às tabelas publicadas por Vargaftik (1996).

A Fig.4.2 contém alguns gráficos obtidos pelo programa de propriedades. São reproduzidas algumas propriedades termodinâmicas para saturação, entre elas: Fig.4.2a - volume específico versus temperatura, Fig.4.2b - volume específico versus pressão, Fig.4.2c - temperatura de saturação versus pressão de saturação, Fig.4.2d - entropia específica versus temperatura e Fig.4.2d - entalpia específica versus temperatura. A Fig.4.2f ilustra a fórmula estrutural condensada do iso-octano.

O comportamento de substância de complexidade molecular elevada pode ser evidenciado na Fig.4.2d pela inclinação para a direita da curva de saturação.

Tabela 4.3 Propriedades do iso-octano (Reid, 1987).

| | |
|--|---------|
| Massa molecular (g/mol) | 114,232 |
| Temperatura crítica, T_c (K) | 544,0 |
| Pressão crítica, p_c (bar) | 25,7 |
| Fator de compressibilidade crítica | 0,266 |
| Fator de acentricidade de Pitzer, ω | 0,303 |

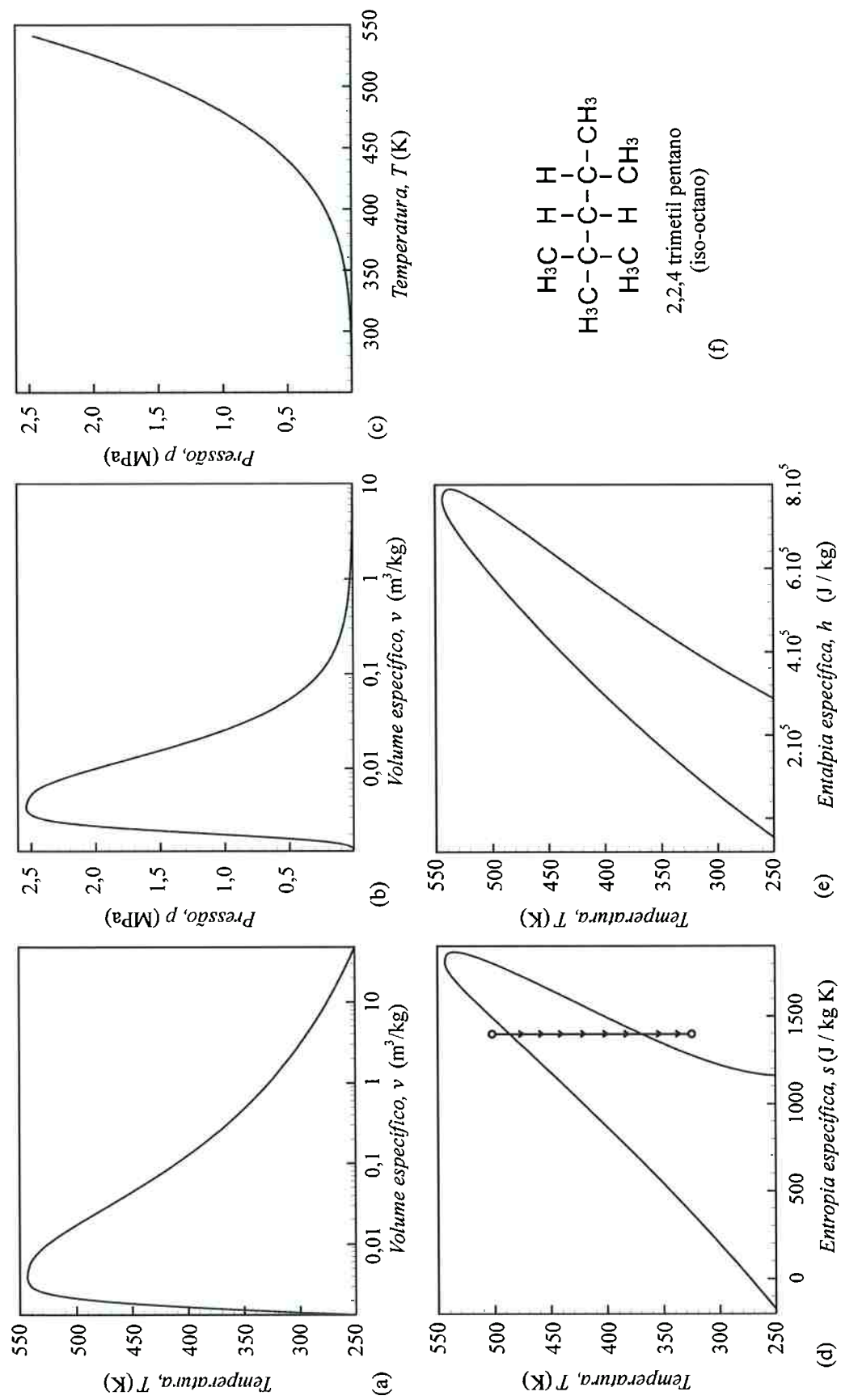


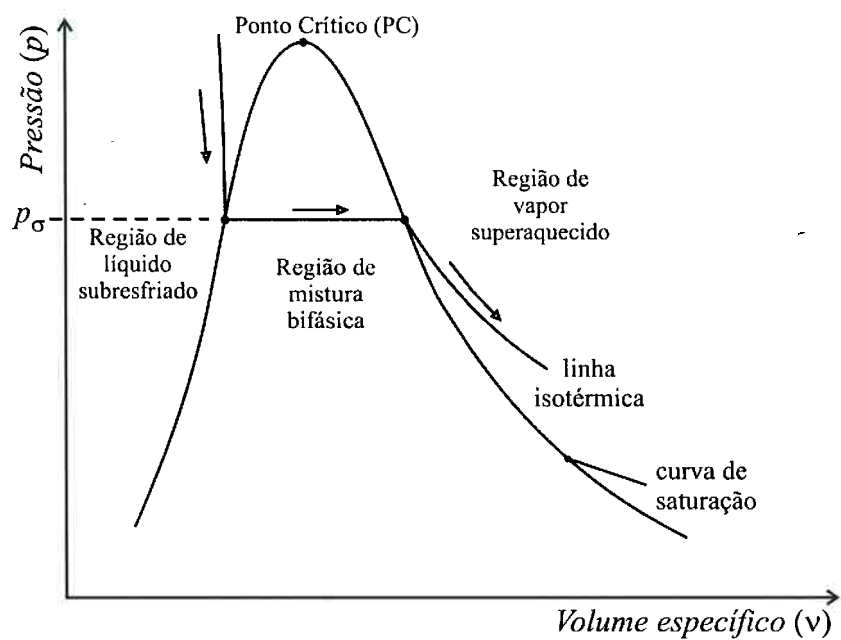
Figura 4.2 (a), (b), (c), (d), (e) Diagramas para região de saturação - iso-octano e (f) fórmula estrutural condensada

4.4 Determinação do estado superaquecido (metaestável) para o núcleo de líquido do jato evaporativo

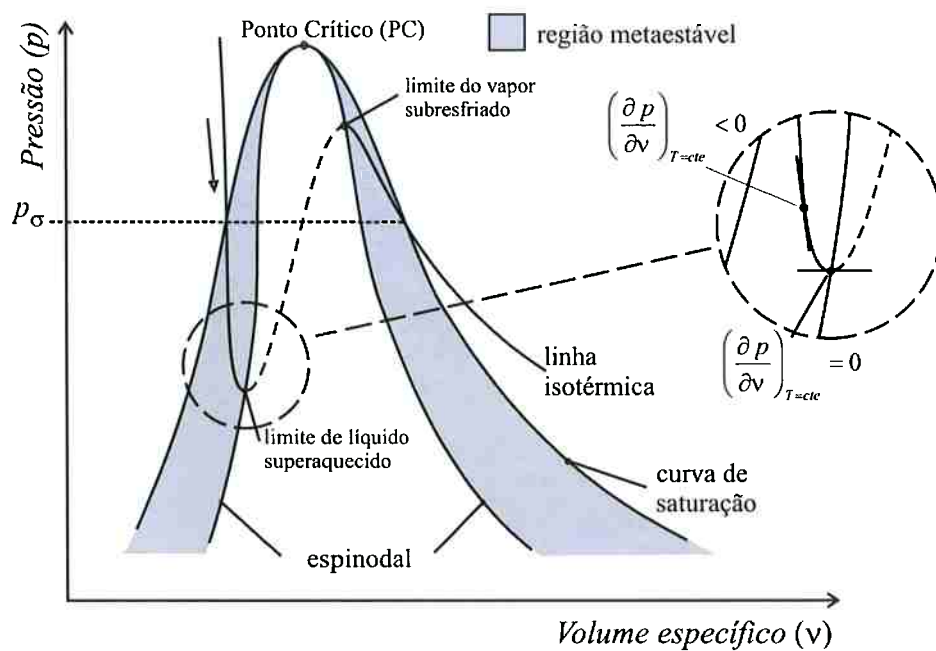
Uma breve revisão do conceito metaestabilidade é realizada a seguir.

Quando uma substância inicialmente no estado de líquido comprimido sofre uma diminuição em sua pressão através de um processo isotérmico (Fig.4.3a), é possível observar que para uma determinada pressão conhecida como pressão de saturação (p_s), há mudança de fase. Durante esse processo de mudança de fase a pressão se mantém constante enquanto a substância se encontra apenas na fase líquida (líquido saturado) ou apenas na fase de vapor (vapor saturado), ou ainda em combinação delas. O valor da pressão de saturação é função exclusiva da temperatura. A curva resultante da união de todos os estados de equilíbrio, para diversas temperaturas é denominada curva de saturação (veja Fig.4.3a). Sendo que, o comportamento citado é aquele previsto pela termodinâmica do equilíbrio estável. Entretanto, é possível que, sob determinadas condições, como em um processo isotérmico a pressão do líquido seja menor que a pressão de saturação, e ainda assim não tenha ocorrido a mudança de fase. A esse estado é dado o nome de estado superaquecido ou metaestável. A Fig.4.3b indica a extensão de uma linha isotérmica dentro da região de mudança de fase. A região enegrecida dessa figura indica que o fluido está na condição de metaestabilidade. A região enegrecida à esquerda é de líquido metaestável ou superaquecido, enquanto a da direita é de vapor metaestável ou subresfriado. Neste trabalho interessa apenas a região de líquido metaestável.

Graus crescentes de superaquecimento podem ser obtidos através da diminuição cada vez maior da pressão para uma dada temperatura, até um certo limite, chamado limite de metaestabilidade mecânica. A condição de estabilidade mecânica é dada pela seguinte relação termodinâmica $(\partial p / \partial v)_T < 0$. O limite de estabilidade mecânica é atingido quando $(\partial p / \partial v)_T = 0$, a partir daí a mudança de fase obrigatoriamente ocorrerá (veja Fig.4.3b). Essa mudança repentina ocorre no interior do meio fluido de um modo homogêneo.



(a)



(b)

Figura 4.3 Representação da região metaestável de um fluido em um diagrama pressão versus volume específico.

Como citado, a fase vapor também pode se tornar metaestável, sendo que neste caso o vapor se torna subresfriado estando a uma pressão maior do que a pressão de saturação. O vapor subresfriado está sujeito à mesma condição de estabilidade imposta ao líquido superaquecido.

Uma informação que deve acompanhar o grau de superaquecimento é o processo pelo qual o líquido atingiu tal estado, que pode ter sido isoentrópico ou isotérmico, por exemplo. Todos os comentários foram realizados para o caso isotérmico, porém no caso de líquidos superaquecidos verifica-se que os processos de expansão isotérmica e isoentrópica são muito próximos.

Reid (1976) destaca que os líquidos superaquecidos não são uma curiosidade laboratorial, ao contrário, ocorrem com grande frequência e podem levar a graves acidentes. Cita um experimento realizado na década de 50 por Moore e também por Wakeshima e Takata (1958). No experimento uma coluna de vidro (um tubo de vidro na posição vertical) é preenchida totalmente com um fluido hospedeiro no estado líquido. A parte superior da coluna está à uma temperatura mais elevada que a parte inferior; sendo que o fluido hospedeiro fica em repouso e, devido à diferença de densidades, não há convecção. Deste modo, a temperatura é função da altura na coluna de fluido. Na parte inferior da coluna é injetada uma gota de um segundo fluido imiscível no estado líquido (conhecido como fluido de teste). A temperatura do fluido que preenche a coluna deve ser menor que a temperatura de ebulição do fluido teste (na pressão local) para a posição de injeção, e a densidade do fluido de teste também deve ser ligeiramente menor que a densidade do fluido da coluna, de modo a permitir a lenta ascensão da gota líquida na coluna. O observado é que o líquido de teste se aquece localmente a temperaturas mais elevadas que sua temperatura de saturação sem, contudo, incorrer em mudança de fase. A conclusão é que a gota líquida se encontra em um estado superaquecido, mantendo-se assim até atingir o limite de estabilidade, quando então, subitamente explode. Ainda, segundo Reid (1976), Wakeshima e Takata (1958); bem como outros pesquisadores, que utilizando como fluido de teste o n-pentano imerso em ácido sulfúrico, obtiveram superaquecimento de mais de 100°C. Reid apresenta uma análise mais detalhada do ponto de vista cinético, evidencia que a probabilidade da formação de uma bolha de vapor no interior de um líquido ligeiramente superaquecido é baixa (salvo os casos

de elevados graus de superaquecimento). A bolha necessita de um local para nuclear, tal qual as paredes de um tanque ou qualquer outro tipo de superfície sólida que possua cavidades.

A determinação do estado metaestável será feita indiretamente através do valor da vazão em massa obtida experimentalmente. O procedimento é descrito a seguir.

A integração da equação de Euler ao longo de uma linha de corrente, tem como resultado a equação conhecida como equação de Bernoulli:

$$\frac{p}{\rho} + \frac{V^2}{2} + g z_{ct} = CB, \quad (4.37)$$

onde V é a velocidade, g a aceleração da gravidade, z_{ct} a cota em relação a um plano horizontal de referência e CB uma constante. Equação válida para escoamentos em regime permanente, sem atrito, ao longo de uma linha de corrente e fluido incompressível (hipótese que pode ser empregada nos casos de escoamentos de líquidos). A equação de Bernoulli é aplicada entre os estados (0) e (1) (veja Fig.3.1 – no Capítulo 3). A velocidade para o estado de estagnação, pela própria definição é nula, e os pontos (0) e (1) são escolhidos de tal forma a apresentarem a mesma posição em relação a um referencial qualquer. Para os modelos matemáticos empregados a hipótese de homogeneidade termodinâmica dentro do núcleo de líquido metaestável é admitida, ou seja, todas as condições como, por exemplo, pressão e temperatura, são uniformes dentro do núcleo de líquido desde a seção de saída do bocal. O estado (1) é então tomado como a seção de saída do bocal de injeção. Deste modo a equação (4.37) pode ser escrita como:

$$\frac{p_0}{\rho_1} = \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{V_1^2}{2}. \quad (4.38)$$

A velocidade é teórica, ou seja, é a velocidade que o fluido atingiria na saída do bocal se o escoamento fosse completamente incompressível e não sofresse perdas por atrito. A vazão em massa teórica \dot{m}_t que atravessa o bocal de área de seção transversal na saída A_b pode ser calculada como:

$$\dot{m}_t = \rho_1 V_1 A_b. \quad (4.39)$$

A vazão em massa teórica pode ser relacionada com a vazão em massa real \dot{m} através do coeficiente de descarga do bocal C_D :

$$C_D = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_t}. \quad (4.40)$$

Combinando as equações (4.39) e (4.40) e substituindo em (4.38) é obtida uma expressão que relaciona a pressão metaestável às condições de injeção e a vazão mássica real obtida experimentalmente:

$$p_1 = p_0 - \frac{\dot{m}^2}{2 \rho_1 A_b^2 C_D^2}. \quad (4.41)$$

A hipótese de fluido incompressível pode ser verificada através de alguns cálculos. É possível obter o volume específico do líquido metaestável a partir de uma expansão em série de Taylor, partindo da saturação (lembrando que o índice σ se refere à saturação e a entropia específica é representada pela letra s):

$$v_1 = v_\sigma + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(p - p_\sigma)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n v}{\partial p^n} \right)_{s, p=p_\sigma} \quad (4.42)$$

Os índices nas derivadas parciais são a representação matemática tradicional da manutenção da variável constante durante a obtenção das derivadas. Na expansão usando apenas o primeiro termo da série:

$$v_1 = v_\sigma + (p - p_\sigma) \left(\frac{\partial v}{\partial p} \right)_{s, p=p_\sigma}. \quad (4.42a)$$

Através de uma expansão isoentrópica, cujo valor da entropia inicial é o valor para as condições de estagnação (0), encontra-se a interseção da isoentrópica com a curva de saturação, determinando assim as condições designadas como de saturação (σ). Aproximando a derivada parcial da equação (4.42a) por diferenças finitas, o valor do volume específico é obtido para o estado superaquecido:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_{s, p=p_\sigma} = \left(\frac{\Delta v}{\Delta p}\right)_{s, p=p_\sigma} \quad (4.43)$$

Testes realizados pelo autor revelaram que o valor do volume específico superaquecido é muito próximo do valor do volume específico do líquido saturado de mesma entropia do estado de estagnação. Um exemplo é citado a seguir. Supondo iso-octano para uma pressão de estagnação de $p_0 = 251,5$ kPa e temperatura de estagnação de $T_0 = 76,7^\circ\text{C}$, tem-se como valor do volume específico de estagnação $v_0 = 0,00153837$ m³/kg e entropia específica de $s_0 = 540,32$ J/ kg K. Através de um processo isentrópico é possível encontrar a intersecção com a binodal em $p_\sigma = 51,06$ kPa, onde o valor do volume específico do líquido saturado vale $v_L = 0,00153913$ m³/kg. Resolvendo numericamente a equação (4.42b) para vários graus de superaquecimento, é possível notar que o valor do volume específico para o líquido metaestável varia muito pouco.

A Fig.4.4 mostra no eixo das abscissas o valor do volume específico para o estado superaquecido e o grau de superaquecimento no eixo das ordenadas, posicionado à esquerda. Para o segundo eixo das ordenadas, posicionado à direita, são representadas as diferenças relativas percentuais entre o valor do volume específico metaestável e o volume específico do líquido, calculado à mesma entropia do estado de estagnação.

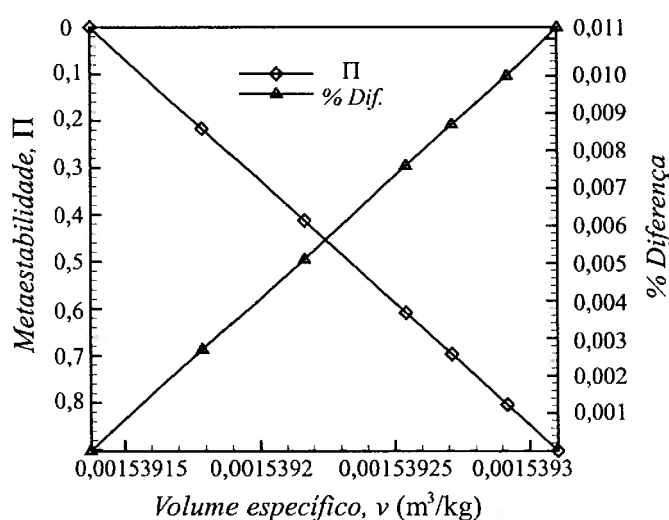


Figura 4.4 Variação do volume específico do líquido metaestável em função do aumento do grau de superaquecimento para o iso-octano.

Matematicamente:

$$\%Diferença = \frac{v_1 - v_\sigma}{v_\sigma}. \quad (4.44)$$

Deste modo, o volume do líquido metaestável pode ser admitido como aproximadamente igual ao volume do líquido saturado à mesma entropia do estado de estagnação e ainda mais, através dos testes realizados, pode ser considerado como próximo ao volume específico correspondente ao estado de estagnação. Para o exemplo citado a diferença percentual é da ordem de 0,05%.

O grau de superaquecimento de um líquido no estado metaestável pode ser definido como:

$$\Pi = \frac{p_\sigma - p_1}{p_\sigma}. \quad (4.45)$$

A avaliação da temperatura do estado metaestável será feita a seguir. A variação de temperatura em um processo de expansão isoentrópico de um líquido superaquecido é muito pequena. A abordagem descrita a seguir, inclusa neste capítulo para corroborar a afirmação anterior, foi adaptada de Simões-Moreira (1999).

Assim como para a obtenção do volume específico do líquido metaestável é realizada uma expansão em série de Taylor em torno da saturação para o calor específico à pressão constante (c_p):

$$c_p = c_{p\sigma} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(T - T_\sigma)^m}{m!} \left(\frac{\partial^m c_p}{\partial T^m} \right)_{s=cte, T=T_\sigma}, \quad (4.46)$$

introduzindo o fator de compressibilidade, definido como:

$$\beta_s = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial p} \right)_{s=cte}. \quad (4.47)$$

E também:

$$\frac{\partial^{n-1}(-\beta_s \nu)}{\partial p^{n-1}} = \left(\frac{\partial^n \nu}{\partial p^n} \right)_{s=cte} . \quad (4.48)$$

Substituindo as equações (4.47) e (4.48) na equação do volume específico metaestável (2.49) e organizando os termos:

$$\nu = \nu_\sigma [1 - \beta_{s,\sigma} (p - p_\sigma)] - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(p - p_\sigma)^n}{n!} \left(\frac{\partial^{n-1}(\nu \beta_s)}{\partial p^{n-1}} \right)_{s=cte, p=p_\sigma} . \quad (4.49)$$

Será necessário o uso da segunda lei da termodinâmica:

$$T ds = dh - \nu dp . \quad (4.50)$$

Para um processo isoentrópico, admitindo que é válida a aproximação $dh = c_p dT$:

$$c_p dT = \nu dp . \quad (4.51)$$

Substituindo as equações (4.46) e (4.48) em (4.51):

$$\left[c_{p\sigma} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(T - T_\sigma)^m}{m!} \left(\frac{\partial^m c_p}{\partial T^m} \right)_{s=cte, T=T_\sigma} \right] dT = \left[\nu_\sigma [1 - \beta_{s,\sigma} (p - p_\sigma)] - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(p - p_\sigma)^n}{n!} \left(\frac{\partial^{n-1}(\nu \beta_s)}{\partial p^{n-1}} \right)_{s=cte, p=p_\sigma} \right] dp . \quad (4.52)$$

Duas simplificações são necessárias para se alcançar uma expressão mais simples de trabalho. Primeiramente, assume-se que o calor específico do líquido saturado é função exclusiva da temperatura. A segunda simplificação diz respeito ao volume específico. Apenas a parte linear de variação com a pressão é mantida. À luz das últimas observações a equação (4.52), se torna:

$$\left[c_{p\sigma} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(T - T_{\sigma})^m}{m!} \left(\frac{\partial^m c_p}{\partial T^m} \right)_{s=cte, T=T_{\sigma}} \right] dT = v_{\sigma} [1 - \beta_{s,\sigma} (p - p_{\sigma})] dp. \quad (4.53)$$

Integrando a equação (4.53) entre o estado de saturação e o estado de líquido metaestável, tem-se:

$$c_{p\sigma} \Delta T + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\Delta T^{m+1}}{(m+1)!} \left(\frac{d^m c_p}{dT^m} \right)_{s=cte, T=T_{\sigma}} = v_{\sigma} \Delta p \left[1 - \beta_{s,\sigma} \frac{\Delta p}{2} \right]. \quad (4.54)$$

Assumindo a hipótese de calor específico constante e fluido incompressível, isto é, β_s nulo, será obtido o resultado simplificado elementar:

$$\Delta T \cong \frac{\bar{v}}{c_p} \Delta p. \quad (4.55)$$

Uma estimativa das ordens de grandeza dos valores é bastante esclarecedora. São assumidos os seguintes valores (para o iso-octano):

$$\bar{v} \cong 0,001 \text{ m}^3 / \text{kg}$$

$$c_p \cong 2,2 \text{ kJ / kg K}$$

$$\Delta p \cong -100 \text{ kPa}$$

Isto permite concluir que a variação de temperatura é da ordem de cinco centésimos negativos de grau ($\Delta T \cong -0,05 \text{ K}$), valor de ordem de grandeza desprezível para as situações estudadas neste trabalho. A aproximação por um processo isotérmico é, portanto, muito boa quando o grau de expansão não for exageradamente elevado, ou se o líquido estiver muito próximo do ponto crítico, região na qual o valor do volume específico aumenta consideravelmente. Na prática para o jato evaporativo será considerado que a temperatura do líquido superaquecido é igual a temperatura de injeção ($T_1 = T_0$).

5. Descontinuidades e o núcleo de líquido

O presente capítulo trata de dois tipos de descontinuidades em escoamentos, as ondas de choque e as ondas de evaporação, ambas presentes no jato evaporativo altamente superaquecido. São apresentados também o modo de obtenção do formato do núcleo de líquido e a solução de Chapman-Jouguet aplicada às ondas de evaporação para obtenção do estado à jusante.

Há grande variação das propriedades e grandezas através das descontinuidades. O tratamento das equações de conservação usado no modelamento é semelhante para ambas as formas de descontinuidade e por esse motivo será apresentado conjuntamente. No intuito de generalizar, as mesmas terão geometria oblíqua, ou seja, o ângulo formado entre a direção do escoamento e a descontinuidade não será normal. O caso particular de ângulo normal (onda de choque normal ou onda de evaporação normal), cujo equacionamento é mais simples, pode ser obtido através da simplificação da abordagem que será apresentada. Deste modo, o fluido ao atravessar a descontinuidade, ou mais precisamente, a onda de descontinuidade (de choque ou de evaporação), sofre um giro, mudando a direção do vetor velocidade. Conforme será esclarecido, dependendo da onda de descontinuidade, a velocidade sofre um giro se aproximando ou se afastando do vetor normal à onda de evaporação.

No escoamento do jato evaporativo altamente superaquecido a onda de evaporação situa-se entre os estados (1) e (2) e a onda de choque entre os estados (3) e (4) representados na Fig.3.1b do Capítulo 3.

5.1 Equações de salto

Em princípio será adotado o índice 1 para as propriedades ou grandezas à montante da onda de descontinuidade e o índice 2 à jusante. Fixo sobre a descontinuidade é colocado um volume de controle. A descontinuidade é representada na Fig.5.1 por uma onda de evaporação.

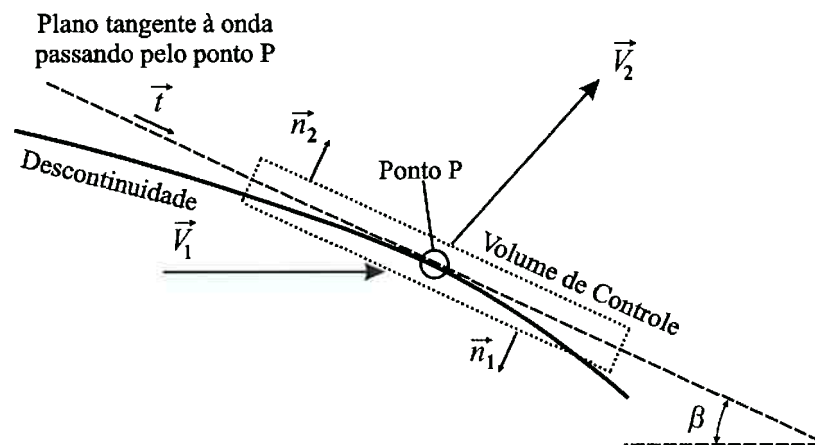


Figura 5.1 Plano tangente à onda de evaporação e grandezas correlatas.

Por um ponto qualquer da onda de descontinuidade é possível construir um plano imaginário tangente, sendo que, o ângulo formado entre o plano e a direção da velocidade do fluido à montante da onda é conhecido como ângulo de onda (representado pela letra grega β – veja Fig.5.1).

As hipóteses simplificadoras para a dedução das equações de conservação são:

- a) É sempre possível encontrar um volume de controle envolvendo a descontinuidade (onda) de forma que a taxa de acumulação de uma dada grandeza específica, é nula.
- b) As propriedades termodinâmicas são uniformes dentro de um domínio de fase.
- c) Os efeitos gravitacionais são desprezíveis.
- d) O volume de controle é adiabático.
- e) A transferência de calor através da onda é nula.
- f) Sempre que houver mistura bifásica, esta estará em equilíbrio termodinâmico (à jusante da onda de evaporação e à montante e à jusante da onda de choque).
- g) Os efeitos viscosos são desprezíveis fora do volume de controle.
- h) As oscilações temporais das propriedades e grandezas são desprezíveis.
- i) São desconsiderados efeitos de tensão superficial.

5.1.1 Equação da conservação de massa

A equação geral da conservação de massa na forma integral é escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\forall} \rho dV + \iint_A \rho \vec{V} \cdot \vec{n} dA = 0, \quad (5.1)$$

onde: \forall é o volume do volume de controle, A é a área da superfície do volume de controle (superfície de controle), \vec{V} a velocidade, \vec{n} é o vetor unitário (versor) normal à onda de descontinuidade (indicado na Fig. 5.1) e t é o tempo. O ponto (\cdot) na equação (5.1) indica produto escalar. A equação (5.1) é válida desde que todas as velocidades (\vec{V}) sejam medidas em relação ao volume de controle e todas as derivadas referidas ao tempo também sejam medidas em relação ao volume de controle. A equação (5.1) será nos próximos passos simplificada considerando as hipóteses simplificadoras de (a) a (i) da Seção 5.1. Em condições de regime permanente o primeiro termo da equação (5.1) é nulo. Deste modo:

$$\iint_{A_1} \rho_1 (\vec{V}_1) \cdot \vec{n}_1 dA_1 + \iint_{A_2} \rho_2 (\vec{V}_2) \cdot \vec{n}_2 dA_2 = 0. \quad (5.2)$$

As áreas podem ser escolhidas para que $A_1 = A_2 = A$, e pode ser observado na Fig.5.1 a seguinte relação entre os vetores normais $\vec{n} = \vec{n}_2 = -\vec{n}_1$. Disso resulta:

$$\iint_A [\rho_2 (\vec{V}_2) - \rho_1 (\vec{V}_1)] \cdot \vec{n} dA = 0. \quad (5.3)$$

A única forma de satisfazer a equação (5.3) é ter o integrando nulo, ou seja:

$$[\rho_2 (\vec{V}_2) - \rho_1 (\vec{V}_1)] \cdot \vec{n} = 0. \quad (5.4)$$

Definindo a velocidade normal do fluido como:

$$W_i = (\vec{V}_i) \cdot \vec{n}, \quad (5.5)$$

e voltando a equação (5.4), temos:

$$\rho_2 W_2 - \rho_1 W_1 = 0. \quad (5.6)$$

Será útil denominar o fluxo de massa (normal) por unidade de área como J :

$$J_i = \rho_i W_i. \quad (5.7)$$

Este último pode ser substituído na equação (5.6).

$$J_2 - J_1 = 0. \quad (5.8)$$

Como forma de simplificação da apresentação das equações será usada uma notação para indicar a diferença entre os estados à montante e à jusante da onda. A diferença é indicada do seguinte modo, para uma propriedade ou grandeza qualquer f , tem-se que a diferença ou salto através da descontinuidade é dado por:

$$[f] = f_2 - f_1 \quad \text{ou} \quad (5.9)$$

$$[f g] = f_2 g_2 - f_1 g_1. \quad (5.10)$$

Introduzindo a nova notação compacta para a equação (5.8):

$$[J] = 0. \quad (5.11)$$

5.1.2 Equação da conservação da quantidade de movimento

A equação geral da conservação da quantidade de movimento na forma integral é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \vec{v} dV + \iint_A (\rho \vec{v} \cdot d\vec{A}) \vec{v} = \iiint_V \rho \vec{f} dV - \iint_A p dA + \vec{F}_{vis}, \quad (5.12)$$

onde: \vec{f} são as forças de campo por unidade de massa e \vec{F}_{vis} são as forças viscosas. Usando as hipóteses simplificadoras de (a) a (i), citadas na Seção 5.1, é obtida a seguinte equação:

$$\oiint_A (\rho \vec{V} \cdot d\vec{A}) \vec{V} = - \oiint_A p dA. \quad (5.13)$$

O volume de controle é o mesmo usado para deduzir a equação de conservação de massa, portanto, são também iguais, as áreas e os vetores unitários normais às mesmas, sendo assim, a equação (5.13) pode ser escrita como:

$$\oiint_A [\rho(\vec{V}) \cdot \vec{n} \vec{V} + p \vec{n}] dA = 0. \quad (5.14)$$

Do mesmo modo que na equação da conservação de massa, pode-se escrever o salto através da descontinuidade como:

$$[\rho(\vec{V}) \cdot \vec{n} \vec{V} + p \vec{n}] = 0. \quad (5.15)$$

Multiplicando de modo escalar a equação (5.15) pelo versor normal \vec{n} , a fim de reter somente a parte normal à onda das grandezas:

$$\{[\rho(\vec{V}) \cdot \vec{n}(\vec{V})] \cdot \vec{n} + p \vec{n} \cdot \vec{n}\} = 0. \quad (5.16)$$

Usando a definição de velocidade normal e fluxo de massa por unidade de área, temos:

$$[p + JW] = p_2 - p_1 + \rho_2 W_2^2 - \rho_1 W_1^2 = 0. \quad (5.17)$$

Uma propriedade importante das descontinuidades desse tipo pode ser obtida multiplicando de modo escalar a equação (5.15) pelo vetor unitário tangente \vec{t} , que pode ser visto na Fig.5.1. Sendo assim:

$$\{[\rho(\vec{V}) \cdot \vec{n}(\vec{V})] \cdot \vec{t} + p \vec{n} \cdot \vec{t}\} = 0, \text{ e} \quad (5.18)$$

$$[J(\vec{V}) \cdot \vec{t}] = 0. \quad (5.19)$$

É possível definir a velocidade tangencial relativa do fluido como $Vt_i = (\vec{V}_i) \cdot \vec{t}$. A equação (5.19) leva à conclusão que as velocidades tangenciais, tanto à montante quanto à jusante, são iguais. Fisicamente é fácil de entender, significa dizer que o fluido não “escorrega” sobre a descontinuidade.

5.1.3 Equação da conservação da energia

A equação geral da conservação da energia escrita na forma integral é:

$$\begin{aligned} \dot{Q} + \dot{W}_{eixo} + \dot{W}_{vis} - \oint_A p \vec{V} \cdot d\vec{A} + \iiint_V \rho (\vec{f} \cdot \vec{V}) dV = \\ \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) dV + \oint_A \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \cdot d\vec{A}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

onde: e é a energia interna específica, \dot{Q} é o fluxo de calor, \dot{W}_{eixo} é a potência no eixo e \dot{W}_{vis} é a potência das forças viscosas. Usando as hipóteses simplificadoras citadas no início deste capítulo, é obtida a seguinte equação:

$$\oint_A \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \cdot d\vec{A} + \oint_A p \vec{V} \cdot d\vec{A} = 0. \quad (5.21)$$

As observações são idênticas às descritas na simplificação das equações de conservação de massa e da quantidade de movimento. Usando as simplificações:

$$\oint_A \left\{ \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) (\vec{V}) \cdot \vec{n} + p (\vec{V}) \cdot \vec{n} \right\} dA = 0. \quad (5.22)$$

Sabendo que o integrando deve ser nulo e usando a definição de velocidade normal e o volume de controle da Fig.5.1, tem-se:

$$\left[\rho W \left(e + \frac{V^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) \right] = 0. \quad (5.23)$$

Introduzindo a definição de entalpia específica $h = e + \frac{p}{\rho}$, e a equação da conservação de massa (5.11), vem:

$$\left[h + \frac{V^2}{2} \right] = 0. \quad (5.24)$$

A velocidade ao quadrado pode ser escrita na forma das suas componentes (normal e tangencial à descontinuidade):

$$V^2 = W^2 + Vt^2. \quad (5.25)$$

Substituindo a equação anterior em (5.24), temos:

$$h_2 - h_1 + \frac{W_1^2 + Vt_1^2}{2} - \frac{W_2^2 + Vt_2^2}{2} = 0. \quad (5.26)$$

Como já demonstrado, as velocidades tangenciais à jusante e à montante da onda de evaporação são iguais, o que reduz a equação (5.26) a:

$$\left[h + \frac{W^2}{2} \right] = 0. \quad (5.27)$$

5.2 Resumo das equações de conservação

Equação da conservação de massa:

$$[J] = 0. \quad (5.11)$$

Equação da conservação da quantidade de movimento:

$$[p + JW] = 0. \quad (5.17)$$

Equação da conservação da energia:

$$\left[h + \frac{W^2}{2} \right] = 0. \quad (5.27)$$

5.3 Relações trigonométricas

A mudança de direção do fluido é passível de ser encontrada através da relação de suas propriedades à montante e à jusante da descontinuidade (volumes específicos) e ângulo de onda (Simões-Moreira, 2000), determinando assim o ângulo de giro. O ângulo de giro é aquele formado entre a direção dos vetores velocidade à montante e à jusante da onda. A apresentação dos ângulos pode ser vista na Fig.5.2, para as ondas de evaporação (Fig.5.2a) e das ondas de choque (Fig.5.2b).

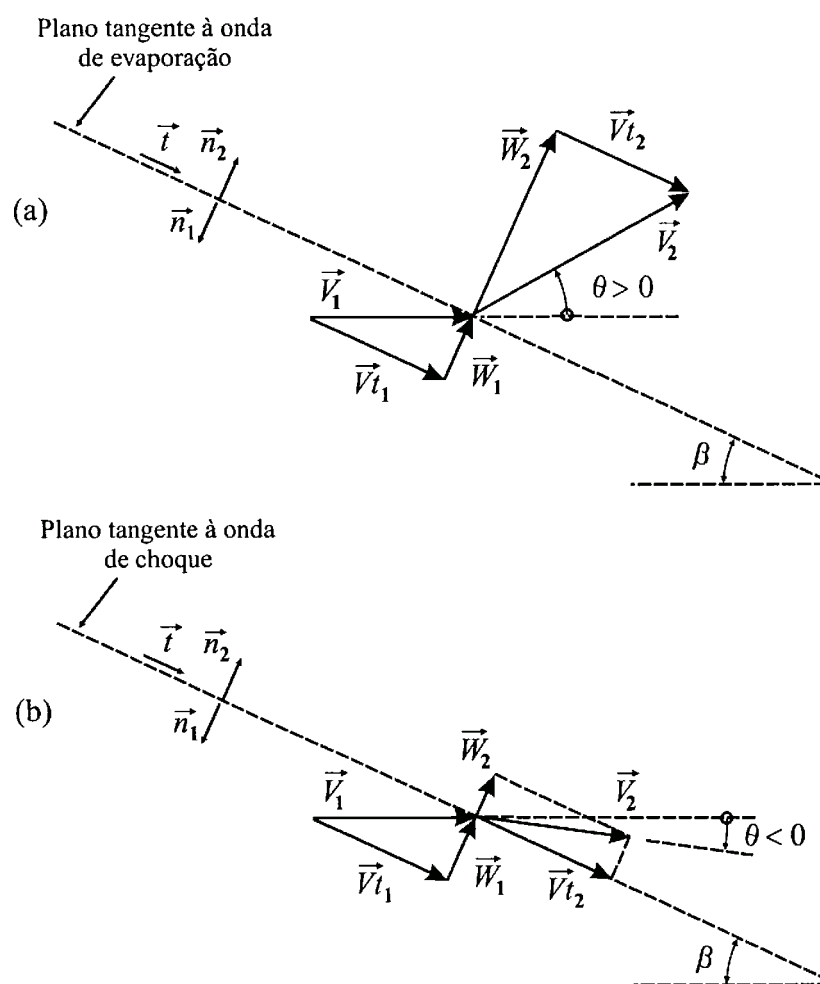


Figura 5.2 Relações trigonométricas fundamentais da (a) onda de evaporação, (b) onda de choque.

Com a ajuda da figura é possível escrever:

$$Vt_1 = Vt_2 = Vt = \frac{W_1}{\operatorname{tg}(\beta)} = \frac{W_2}{\operatorname{tg}(\beta + \theta)}. \quad (5.28)$$

Para a onda de evaporação o ângulo de giro é positivo, e para a onda de choque negativo. É conveniente introduzir a seguinte identidade: $W_2 = W_1 + [W]$, e expandir o termo da tangente da soma dos ângulos, usando:

$$\operatorname{tg}(\beta + \theta) = \frac{\operatorname{tg} \beta + \operatorname{tg} \theta}{1 - \operatorname{tg} \beta \operatorname{tg} \theta}. \quad (5.29)$$

É obtida:

$$\frac{\operatorname{tg} \theta + \operatorname{tg} \beta}{1 - \operatorname{tg} \theta \operatorname{tg} \beta} W_1 = (W_1 + [W]) \operatorname{tg} \beta. \quad (5.30)$$

Isolando a tangente do ângulo de giro:

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\frac{[W]}{W_1} \operatorname{tg}(\beta)}{1 + \left(1 + \frac{[W]}{W_1}\right) \operatorname{tg}^2 \beta}. \quad (5.31)$$

Para os próximos passos na dedução são usadas algumas identidades trigonométricas fundamentais. A seqüência para obtenção da forma desejada, partindo da equação (5.31), é a seguinte:

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\frac{[W]}{W_1} \frac{\operatorname{sen} \beta}{\cos \beta}}{1 + \left(1 + \frac{[W]}{W_1}\right) \frac{\operatorname{sen}^2 \beta}{\cos^2 \beta}}, \quad (5.32)$$

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\frac{[W]}{W_1} \operatorname{sen} \beta \cos \beta}{\cos^2 \beta + \operatorname{sen}^2 \beta + \frac{[W]}{W_1} \operatorname{sen}^2 \beta}, \text{ e} \quad (5.33)$$

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\operatorname{sen}(2\beta)}{2\left(\frac{W_1}{[W]} + \operatorname{sen}^2 \beta\right)}. \quad (5.34)$$

A expressão acima é trigonométrica, porém com o auxílio da equação da conservação de massa (5.11), é possível obter outra forma da relação trigonométrica fundamental:

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\operatorname{sen}(2\beta)}{2\left(\operatorname{sen}^2 \beta + \frac{1}{v_2/v_1 - 1}\right)}. \quad (5.35)$$

Para a onda de evaporação, a razão entre os volumes específicos à jusante v_2 , e à montante v_1 é sempre maior que a unidade, mantendo o ângulo de onda entre zero e noventa graus, o ângulo de giro deverá sempre ser positivo (ou nulo para o caso particular de ângulo de onda normal). O que leva a concluir pela Fig.5.2a que o fluido realiza um giro afastando-se da onda de evaporação. Variar o ângulo de onda entre noventa e cento e oitenta graus conduz à mesma conclusão. No caso da onda de choque, o comportamento é exatamente oposto, ou seja, devido ao processo de compressão que o fluido sofre ao atravessá-la, há aumento da densidade e, portanto, diminuição do volume específico. Deste modo, a razão entre os volumes específicos à jusante e à montante é sempre menor que a unidade. Sendo assim, o fluido realiza um giro aproximando-se da onda de choque. Finalmente, é possível observar, dado o comportamento descrito acima que a velocidade normal à onda de choque diminui se comparados os estados à jusante e à montante, exatamente o contrário do observado na onda de evaporação (veja Fig.5.2).

A análise a seguir será realizada apenas para uma onda de evaporação. Para uma determinada razão entre os volumes específicos, é possível verificar o comportamento ângulo de giro em função do ângulo de onda. Em um determinado ângulo de onda, o ângulo de giro é máximo. Do cálculo diferencial sabemos que o valor máximo de uma função pode ser encontrado quando o valor da sua primeira derivada, em relação a variável independente, tem valor nulo. Aplicando a equação

(5.35) é possível encontrar o valor do ângulo de giro máximo $\theta_{\text{máx}}$ para uma determinada razão entre os volumes específicos:

$$\operatorname{tg} \theta_{\text{máx}} = \frac{\nu_2/\nu_1 - 1}{2\sqrt{\nu_2/\nu_1}}. \quad (5.36)$$

O ângulo de onda $\beta_{\text{máx}}$ correspondente ao máximo ângulo de giro $\theta_{\text{máx}}$ é:

$$\operatorname{sen} \beta_{\text{máx}} = \frac{1}{\sqrt{\nu_2/\nu_1 + 1}}. \quad (5.37)$$

Combinando as equações (5.36) e (5.37), é obtida a relação entre os dois ângulos onde ocorre o efeito de máximo giro.

$$\theta_{\text{máx}} = 90^\circ - 2\beta_{\text{máx}}. \quad (5.38)$$

É importante notar na Fig.5.3 que o ângulo de giro é limitado superiormente pela linha reta $\theta = 90^\circ - \beta$.

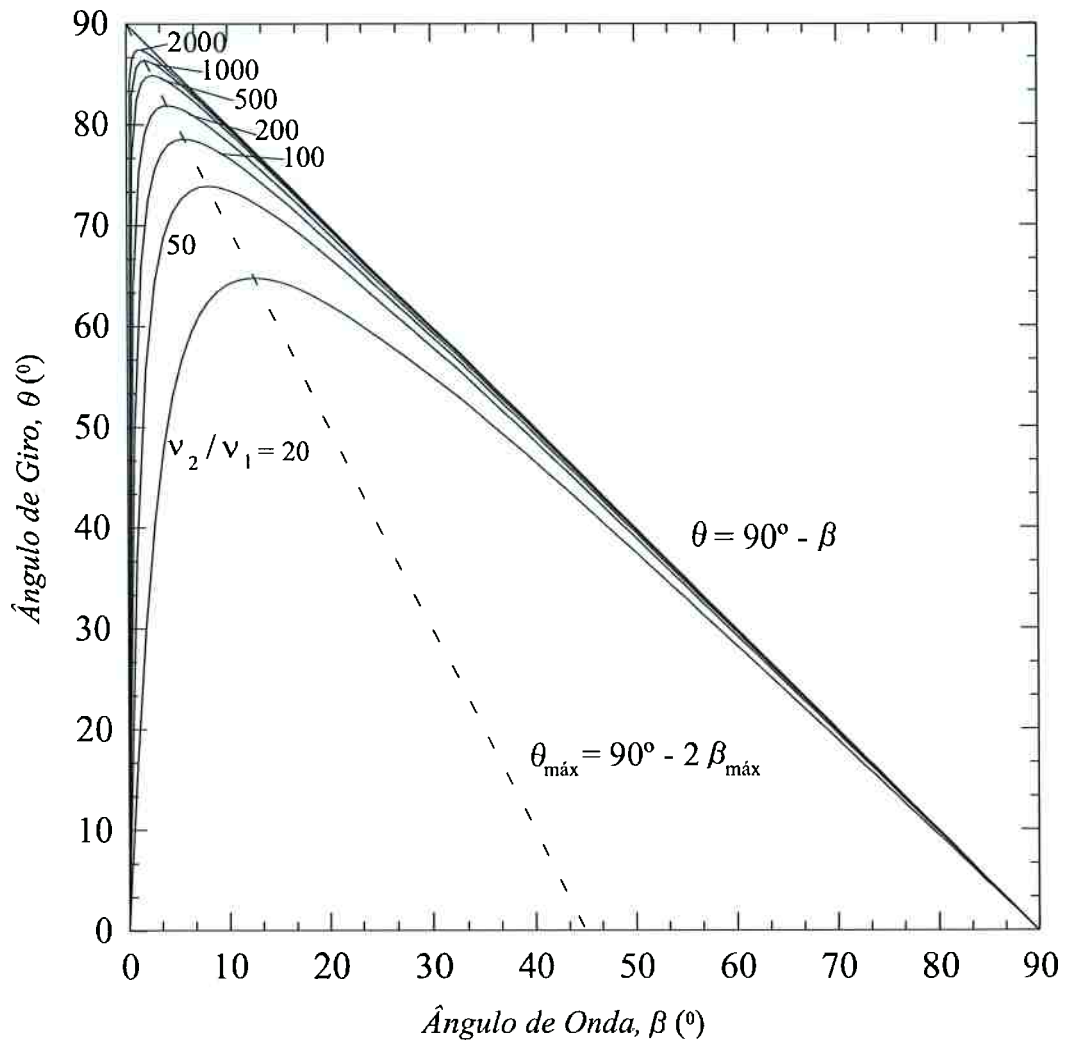


Figura 5.3 Ângulo de giro como função do ângulo de onda parametrizado pela razão entre os volumes específicos à jusante e à montante relativos à onda de evaporação (Simões-Moreira, 1999).

5.4 Equações de Rayleigh e Rankine-Hugoniot

O estado à jusante da onda de evaporação é obtido a partir da solução das equações de conservação apresentadas, ou seja, da solução das equações (5.11), (5.17) e (5.27). Tradicionalmente essas três equações são combinadas para obter apenas duas outras equações, conhecidas na literatura como equação de Rayleigh e equação de Rankine-Hugoniot (R-H). Essas equações só envolvem propriedades termodinâmicas o que permite uma análise gráfica no diagrama pressão *versus* volume específico. Esta análise favorece a compreensão dos processos termodinâmicos, facilitando o entendimento do fenômeno físico e da relação entre as propriedades à montante e à jusante da onda de evaporação.

A equação de Rayleigh é encontrada através da substituição da equação (5.7) na equação de conservação de quantidade de movimento (5.17) e a combinação com a equação de conservação de massa (5.11) resultando em:

$$J^2 = -\frac{[p]}{[\nu]}. \quad (5.39)$$

Para obtenção da equação de Rankine-Hugoniot, é isolado o valor da velocidade relativa da equação (5.7) e substituído na equação da energia (5.27):

$$h_2 - h_1 + \frac{1}{2}(\nu_2 J_2)^2 - \frac{1}{2}(\nu_1 J_1)^2 = 0. \quad (5.40)$$

Como pela equação da conservação de massa $J_2 = J_1 = J$, temos:

$$h_2 - h_1 + \frac{1}{2}J^2(\nu_2^2 - \nu_1^2) = 0. \quad (5.41)$$

É usado o quadrado do fluxo mássico por unidade de área presente na equação de Rayleigh, na equação (5.39), obtendo a equação de Rankine-Hugoniot:

$$[h] = [p] \frac{\nu_1 + \nu_2}{2}. \quad (5.42)$$

Partindo de um estado superaquecido à montante da onda de evaporação (1) obtido conforme descrito na Seção 4.4 do Capítulo 4, é determinado o estado à

jusante (2) através da solução simultânea das equações de Rayleigh e de R-H. No diagrama pressão *versus* volume específico, a equação de Rayleigh é representada por uma reta e a de R-H por uma curva de concavidade voltada para cima, o estado à jusante no diagrama é caracterizado pela intersecção das duas curvas, conforme indicado na Fig.5.4. Uma solução matemática qualquer se faz pela intersecção entre a curva de R-H e de Rayleigh, o que resulta dois pontos quaisquer, A e C, indicando duas possíveis soluções à jusante da onda de evaporação.

É importante frisar que o quadrado do fluxo mássico superficial é proporcional à inclinação das linhas de Rayleigh, conforme indicado pela equação (5.39). À medida que a vazão mássica é aumentada, a inclinação das linhas de Rayleigh aumentará proporcionalmente, aproximando cada vez mais as duas soluções genéricas A e C, até uma condição onde os pontos se tornem coincidentes, apresentando apenas uma solução para o estado à jusante, representado na Fig.5.4 pelo ponto B. A linha de Rayleigh nessa situação é tangente à curva de R-H. Na literatura de combustão o ponto B recebe o nome de ponto de Chapman-Jouguet, ou simplesmente, C-J. Uma das características das equações de Rayleigh e de R-H é que elas não dependem da natureza da substância de trabalho e podem ser aplicadas a qualquer descontinuidade que se assemelhe a uma onda de deflagração, determinando assim um comportamento absolutamente genérico.

As soluções à esquerda do ponto de C-J, soluções do tipo A, são subsônicas. E as soluções à direita do ponto de C-J, soluções do tipo C, são supersônicas. Em condições de regime permanente são descartadas as soluções supersônicas em experimentos unidimensionais. Pesquisadores como Hill (1991), Simões-Moreira (1994) e Simões-Moreira e Shepherd (1999) realizaram experimentos confirmando a existência do ramo subsônico e o ponto de C-J, também obtido por outros pesquisadores (Kurschat et al., 1992). O ponto de C-J indica que o escoamento à jusante é sônico, em relação à frente de evaporação, o que é também uma condição de blocagem mássica.

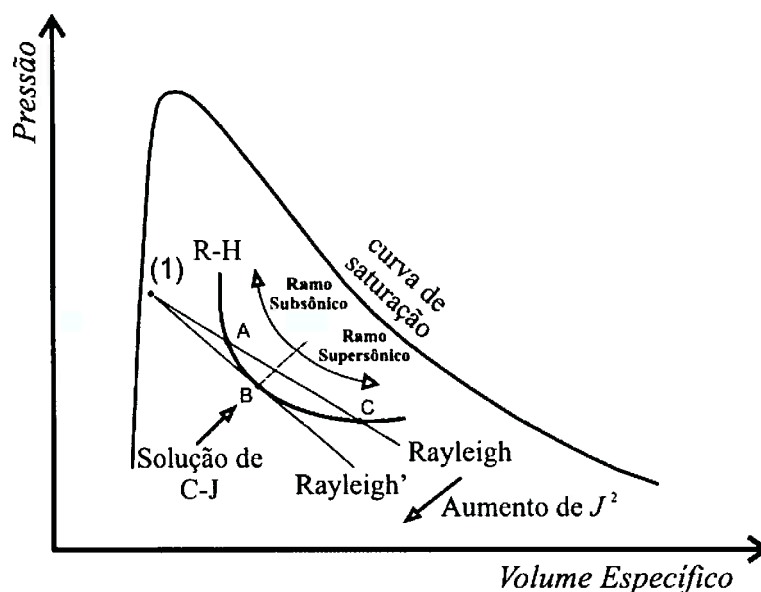


Figura 5.4 Solução gráfica do estado à montante de uma onda de evaporação (Simões-Moreira, 1994).

Em termos matemáticos, a condição de máxima vazão mássica pode ser expressa assim: $dJ^2 = 0$, que aplicada a equação de Rayleigh (5.39), (ver Apêndice III), resulta em:

$$dv_2 = -\frac{1}{J_{C-J}^2} dp_2 \quad \text{ou} \quad \frac{dv_2}{dT_2} = -\frac{1}{J_{C-J}^2} \frac{dp_2}{dT_2}. \quad (\text{III.6})$$

onde o índice “C-J” indica que o fluxo mássico se refere ao ponto de Chapman-Jouguet. As propriedades da fase líquida e vapor da mistura bifásica (estado 2) bem como a pressão, são funções apenas da temperatura, quando válida a hipótese de equilíbrio termodinâmico entre as fases. O que torna a equação (III.6) muito útil no cálculo do estado à jusante da onda de evaporação.

Uma determinada propriedade f pode ser expressa para a região bifásica através da lei elementar de mistura:

$$f = (1-x)f_L + xf_v \quad (\text{5.43})$$

onde: x é o título, definido como a fração mássica de vapor contido na mistura. Conforme mencionado anteriormente, os índices L e v são usados para designar o estado líquido saturado e vapor saturado respectivamente.

Para a entalpia específica e volume específico (estado 2), tem-se na ordem:

$$h_2 = (1 - x_2)h_{L2} + x_2 h_{v2}, \text{ e} \quad (5.44)$$

$$v_2 = (1 - x_2)v_{L2} + x_2 v_{v2}. \quad (5.45)$$

Substituindo as equações (5.44) e (5.45) na equação de Rankine-Hugoniot (5.42) e isolando o título, obtemos:

$$x_2 = \frac{2(h_1 - h_{L2}) + (p_2 - p_1)(v_1 + v_{L2})}{2(h_{v2} - h_{L2}) - (p_2 - p_1)(v_{v2} - v_{L2})}. \quad (5.46)$$

Através das equações (III.6), (5.46) e uma equação de estado válida para a saturação (ou uma tabela de propriedades termodinâmicas) é possível calcular o ponto de Chapman-Jouguet, dado um estado à montante (líquido metaestável).

A seqüência de cálculo numérico iterativo é a seguinte:

- a) O estado metaestável (1) já foi definido através do procedimento apresentado na Seção 4.4 do Capítulo 4.
- b) Uma temperatura à jusante T_2 é admitida (estimativa).
- c) As propriedades termodinâmicas para o estado 2 são calculadas (através do programa de determinação das propriedades termodinâmicas – veja Capítulo 4).
- d) A equação (ApIII.6) atualiza o valor da temperatura até a convergência.

5.5 Núcleo de líquido

O núcleo de líquido metaestável pode ser observado claramente nos registros fotográficos de diversos autores (Vieira, 1999 e 2004; Reitz, 1990; Athans, 1995; entre outros) que utilizaram técnicas fotográficas das mais variadas, o que comprova que não é uma aberração óptica. A Fig.3.1b (Capítulo 3) ilustra uma representação esquemática do núcleo de líquido ao lado de uma fotografia (Fig.3.1a) que mostra o formato real do mesmo.

Para o modelo bidimensional proposto no presente trabalho o formato do núcleo líquido admitido é o cônico.

É importante ressaltar a necessidade de um estudo aprofundado do formato do núcleo de líquido não realizado nesta tese, pois os objetivos (conforme citados no item 1.1 do Capítulo 1) concentraram-se no estudo da expansão da mistura bifásica e a determinação da posição da onda de choque, ou seja, do escoamento pós-onda de evaporação, imediatamente após o fluido deixar a superfície do núcleo de líquido.

São adotadas algumas hipóteses simplificadoras para o núcleo:

- a) O núcleo de líquido possui propriedades termodinâmicas uniformes, ou seja, temperatura, pressão, densidade, etc., são iguais em todos os seus pontos.
- b) A velocidade do líquido metaestável dentro do cone de evaporação é constante e uniforme, bem como paralela a seu eixo de simetria.
- c) A onda de evaporação é considerada estacionária e se localiza sobre a superfície do núcleo de líquido.

5.5.1 Núcleo de líquido de formato hemisférico

Com o objetivo de obter a solução unidimensional do problema, Simões-Moreira (1999) idealizou que o núcleo de líquido teria o formato hemisférico. Isto, porém, não tem nenhuma relação com a forma real do núcleo de líquido, sendo uma idealização útil para um modelo unidimensional simples. O formato hemisférico está ilustrado na Fig.5.5a. Essa hipótese impõe uma onda de evaporação hemisférica (superfície envolvente do núcleo). O tamanho desse núcleo de líquido, traduzido pelo seu raio, denominado aqui como R_h , é obtido através da equação da conservação de massa, lembrando que o regime analisado é o permanente. Desta forma, a vazão em massa que atravessa o bocal (obtida experimentalmente) deverá obrigatoriamente atravessar a superfície semi-esférica do núcleo de líquido, assim:

$$R_h = \sqrt{\frac{\dot{m} v_2}{2 \pi V_2}}. \quad (5.47)$$

O estado (2), bifásico já foi determinado do ponto de vista termodinâmico e a velocidade V_2 é a velocidade sônica à jusante da onda de evaporação. A onda de evaporação para este caso é considerada normal, caso onde o ângulo de onda é de 90°

e em consequência o ângulo de giro é nulo (veja Fig.5.3). Outros detalhes podem ser encontrados em Simões-Moreira (1999) e Simões-Moreira et al. (2002).

5.5.2 Núcleo de líquido de formato cônico

A discussão do núcleo de líquido de formato cônico toma por base a Fig.5.5. O fluxo de massa que entra pelo bocal é o mesmo que evapora na superfície do núcleo de líquido. O ângulo de onda é a metade do ângulo do vértice do cone. Devido ao formato cônico, a onda de evaporação pode ser tratada como onda de evaporação oblíqua, que guarda simetria axial em relação à linha de centro do bocal de injeção. O ângulo de onda é obtido através do balanço de massa:

$$\operatorname{sen} \beta = \frac{W_2 \pi R_b^2}{v_2 \dot{m}}, \quad (5.48)$$

onde W_2 é, como já definido, a velocidade normal à jusante da onda de choque e R_b o raio do bocal. O ângulo de giro é obtido através da equação (5.35). O formato cônico seria verdadeiro se a taxa de evaporação permanecesse constante ao longo do núcleo líquido. De certo, ao atingir o vértice não haveria mais líquido a evaporar e a velocidade deveria ser nula. Esse vértice (veja Fig.5.5b) introduziria no problema uma condição bastante complexa do ponto de vista numérico. A saída encontrada foi o arredondamento da ponta do cone através de uma superfície esférica (calota esférica). Essa solução, por sua vez, altera a área superficial do núcleo de líquido que se torna menor que a área superficial do cone. Alteração esta, sentida diretamente no fluxo de massa, se mantidos constantes todas as outras propriedades à jusante da onda de evaporação; tais como: velocidade normal, temperatura, pressão e título. Todas essas grandezas são resultantes da solução do salto de propriedades através da onda de evaporação, buscando a solução de Chapman-Jouguet. Visando não modificar a solução do estado à jusante e mantendo assim a solução de C-J, é proposta uma alternativa, o aumento do diâmetro da base do cone de líquido que originalmente possuía o diâmetro do bocal. Esse aumento depende da posição do início do arredondamento do vértice do cone e deve obedecer a equação da conservação de massa.

A área superficial da geometria proposta para o núcleo de líquido (veja Fig.5.5c) tem de ser calculada visando obter o tamanho da base, fixada uma dimensão do início do arredondamento (z_D). Um corte é realizado na geometria da Fig.5.5c e representado na Fig.5.5d. A linha BCE é a geratriz da superfície do núcleo de líquido (onda de evaporação), de modo que BC é a geratriz do tronco de cone e CE é a geratriz da calota esférica. A área do tronco de cone será denominada área lateral (A_L) e a área da calota esférica de A_C . Segundo teorema de Pappus-Guldin (da geometria) a área de uma superfície de revolução é igual ao comprimento da curva geratriz multiplicado pela distância percorrida pelo centróide da curva durante a geração da superfície. Aplicando o teorema para determinação da área lateral:

$$A_L = 2\pi \left(\frac{R'_b + d_{DC} \cos \beta}{2} \right) L_{BC}, \quad (5.49)$$

onde R'_b se refere ao novo raio do bocal, d_{DC} à distância entre os pontos D e C na Fig.5.5c e Fig.5.5d e L_{BC} o comprimento da linha BC calculada como:

$$L_{BC} = \sqrt{(z_D + d_{DC} \sen \beta)^2 + (R'_b - d_{DC} \cos \beta)^2}. \quad (5.50)$$

O termo entre parênteses da equação (5.49) representa a distância entre o centróide da linha BC e eixo z. Analogamente a área da calota esférica é

$$A_C = 2\pi \bar{r}' L_{CE}. \quad (5.51)$$

onde: \bar{r}' é a posição do centróide para a linha CE em relação ao eixo z. Por definição:

$$\bar{r}' = \frac{\int r' dC}{L_{CE}}, \quad (5.52)$$

definido r' como uma cota genérica em relação ao eixo z de um comprimento infinitesimal dC sobre a curva CE cuja dimensão linear é L_{CE} (veja Fig.5.5d onde estão representadas todas as dimensões citadas). Através da Fig.5.5d é possível obter as relações:

$$r' = d_{DC} \operatorname{sen} \alpha, \text{ e} \quad (5.53)$$

$$dC = d_{DC} d\alpha. \quad (5.54)$$

O ângulo α é um ângulo de posicionamento que varia entre o ângulo, cujo valor é zero e ψ (ângulo complementar ao ângulo de onda), que são respectivamente os limites inferior e superior de integração a equação (5.52), quando substituídas as relações (5.53) e (5.54). Finalmente:

$$A_C = 2\pi d_{DC}^2 (1 - \cos\psi), \text{ e} \quad (5.55)$$

$$A_C = 2\pi d_{DC}^2 [1 - \cos(90^\circ - \beta)]. \quad (5.55a)$$

A distância entre os pontos DC pode ser calculada através da equação:

$$d_{DC} = \operatorname{sen} \beta \left(\frac{R'_b}{\tan \beta} - z_D \right). \quad (5.56)$$

Utilizando o balanço de massa para a superfície do núcleo de líquido temos:

$$\dot{m} = \frac{W_2 (A_C + A_L)}{v_2}. \quad (5.57)$$

Supondo que seja admitida a cota z_D (por observação dos registros fotográficos), a equação (5.57) pode ser resolvida de modo a obter o novo raio da base R'_b , evidentemente maior que o raio do bocal original R_b .

6. SEQUÊNCIA DE SOLUÇÃO PARA O JATO DE LÍQUIDO SUPERAQUECIDO

A seqüência de solução para o jato de líquido superaquecido é ilustrada no diagrama de blocos da Fig. 6.1. Os dados de entrada são obtidos experimentalmente através de relatos na literatura.

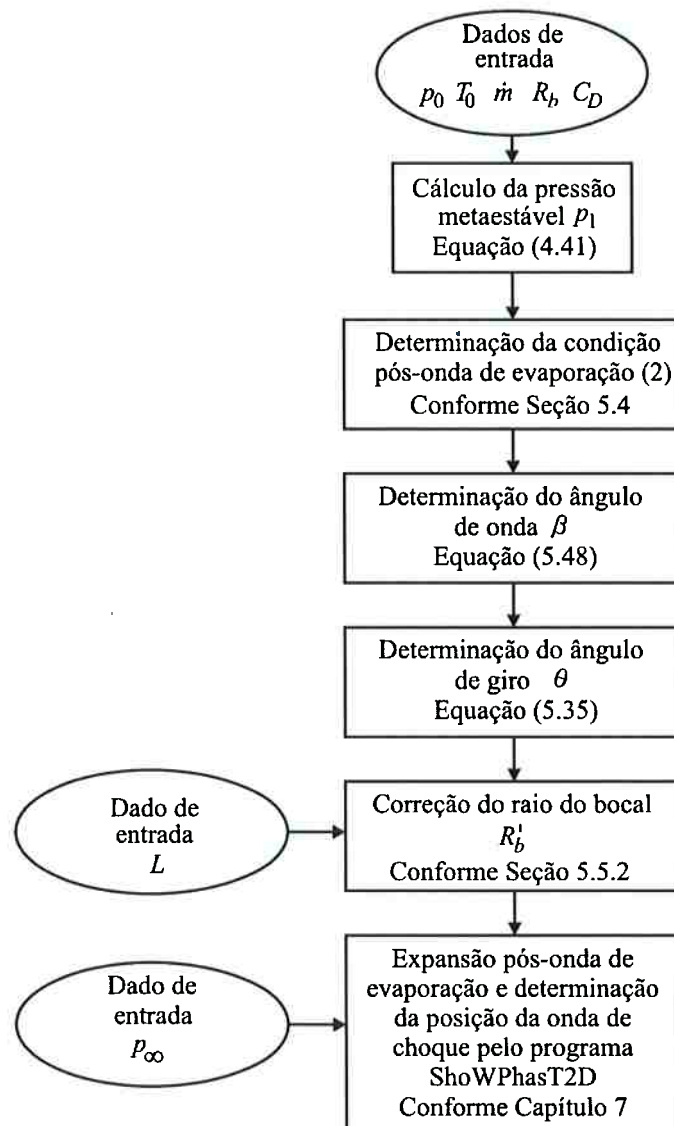


Figura 6.1 Seqüência de solução do escoamento do jato evaporativo.

7. MODELO BIDIMENSIONAL AXISSIMÉTRICO

Neste capítulo serão apresentadas as equações de conservação para a expansão da mistura bifásica (pós-onda de evaporação – estado (2), representado na Fig.3.1b do Capítulo 3) e discutidos aspectos do seu comportamento matemático, a malha que faz a discretização da região à jusante da onda de evaporação e como ela é obtida e, finalmente, o método numérico para solução das equações de conservação.

7.1 Aspectos gerais

7.1.1 Hipóteses simplificadoras

Em Angelo (2000) são deduzidas passo a passo as equações de conservação para coordenadas cilíndricas na forma conservativa para o problema do jato evaporativo. O eixo z é coincidente com a linha de axissimetria do escoamento (linha de centro do bocal convergente), e o eixo r é perpendicular ao eixo z .

Como já explicado, o fluido ao deixar a superfície de evaporação aumenta a velocidade durante o processo de expansão atingindo velocidades supersônicas, assim as forças de inércia sobre o escoamento são muito maiores que as forças viscosas, por esse motivo o escoamento pode ser aproximado pelo escoamento de um fluido invíscido.

É também adotado o modelo bifásico (homogêneo) de equilíbrio térmico e mecânico em que as temperaturas, pressões e velocidades são as mesmas para as duas fases (líquido e vapor). Sendo assim, a densidade e a entalpia específica podem ser escritas como função da temperatura e do título, enquanto a pressão é função exclusiva da temperatura de saturação.

O processo de expansão pode levar à uma mudança de fase completa, ou seja, durante a expansão é possível atingir o estado de vapor superaquecido. Somente uma SCME (veja Capítulo 4) pode sofrer uma evaporação completa através desse processo, o qual se aproxima muito de um processo isoentrópico (desde o estado à jusante da onda de evaporação até o estado à montante da onda de choque).

Não são contabilizados os efeitos de campo, como o gravitacional, elétrico ou magnético, nem efeitos de tensão superficial. O escoamento é estudado em regime permanente.

7.1.2 Programa ShoWPhasT2D

O código computacional desenvolvido "ShoWPhasT2D" ("Shock Waves with Phase Transition Two-Dimensional") gera automaticamente a malha e calcula o escoamento pós-onda de evaporação até a onda de choque. No Apêndice IV, o programa é testado para escoamento supersônico de gás perfeito para casos relatados na literatura, no intuito de validar o código.

O programa ShoWPhasT2D usa o método das diferenças finitas de MacCormack que é um método explícito e possui precisão de segunda ordem. Este foi adotado no presente trabalho devido sua grande utilização na área do escoamento compressível invíscido. A determinação das propriedades é feita pelo programa PROP (para detalhes veja Capítulo 4).

Estudos preliminares, realizados pelo autor de um modelo unidimensional para determinação do escoamento na região de expansão, eliminaram a hipótese do uso da técnica de solução conhecida como falso transitório para o método de MacCormack. A técnica do falso transitório e o modelo unidimensional são descritos no Apêndice II. Consiste em escrever as equações de conservação incluindo o termo dependente do tempo, estimar uma solução inicial para todos os pontos da malha e realizar uma marcha temporal até o estabelecimento do regime permanente. A quantidade de passos no tempo até o regime permanente revelou-se bastante elevada e as trocas de estado termodinâmico (entre o estado bifásico e o estado de vapor superaquecido) para um mesmo ponto da malha durante as iterações inviabilizaram o uso da técnica principalmente pelo exagerado tempo computacional exigido, mesmo tratando-se de um modelo unidimensional, que evidentemente utiliza uma quantidade muito menor de pontos na malha que um modelo bidimensional.

A técnica do falso transitório quando empregada em escoamentos em que a hipótese de gás perfeito é válida, tem solução direta e relativamente rápida, ao contrário dos casos onde há necessidade da utilização de uma equação de estado realista, como no escoamento do jato evaporativo que utiliza a equação de estado de

Lee-Kesler. Sendo assim, foi escolhida uma técnica de solução numérica mais antiga, porém, segundo observado pelo autor nas simulações realizadas, bastante estável para a aplicação no problema do jato evaporativo, conhecida como marcha à jusante.

7.2 Sistema de equações

As equações de conservação deduzidas para a região de expansão do jato evaporativo são:

Equação da conservação de massa:

$$\frac{\partial(\rho V_r)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho V_z)}{\partial z} = -\frac{\rho V_r}{r}. \quad (7.1a)$$

Equação da conservação da quantidade de movimento na direção z:

$$\frac{\partial(\rho V_r V_z)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho V_z^2 + p)}{\partial z} = -\frac{\rho V_r V_z}{r}. \quad (7.1b)$$

Equação da conservação da quantidade de movimento na direção r:

$$\frac{\partial(\rho V_r^2 + p)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho V_r V_z)}{\partial z} = -\frac{\rho V_r^2}{r}. \quad (7.1c)$$

Equação da conservação da energia:

$$\frac{\partial(\rho V_r h_0)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho V_z h_0)}{\partial z} = -\frac{\rho V_r h_0}{r}. \quad (7.1d)$$

A apresentação das equações da conservação de massa, da quantidade de movimento (em duas direções) e da energia segue um padrão semelhante, deste modo é possível escrever o sistema que representam de um modo genérico:

$$\frac{\partial F}{\partial z} + \frac{\partial G}{\partial r} = B. \quad (7.1)$$

As letras F , G e B são vetores do tipo coluna e têm quatro linhas. Cada qual representando um termo das equações que formam o sistema (conservação de massa, conservação da quantidade de movimento na direção z, conservação da quantidade de movimento na direção r e da conservação da energia). Deste modo F , G e B são:

$$F = \begin{Bmatrix} \rho V_z \\ \rho V_z^2 + p \\ \rho V_r V_z \\ \rho V_z h_0 \end{Bmatrix}, \quad (7.2)$$

$$G = \begin{Bmatrix} \rho V_r \\ \rho V_r V_z \\ \rho V_r^2 + p \\ \rho V_r h_0 \end{Bmatrix}, \text{ e} \quad (7.3)$$

$$B = - \begin{Bmatrix} \left(\frac{\rho V_r}{r} \right) \\ \left(\frac{\rho V_r V_z}{r} \right) \\ \left(\frac{\rho V_r^2}{r} \right) \\ \left(\frac{\rho V_r h_0}{r} \right) \end{Bmatrix}. \quad (7.4)$$

7.3 Forma conservativa e forma não conservativa das equações

Há duas formas de apresentação para as equações diferenciais: a forma conservativa e a forma não conservativa. A forma conservativa consiste em escrever as equações diferenciais em termos de fluxos das quantidades envolvidas, isto é, fluxo de massa, de quantidade de movimento e energia. Na forma não conservativa, as equações diferenciais são escritas em função das grandezas e propriedades primitivas envolvidas, isto é, pressão, componentes da velocidade e energia específica. A Seção 7.2 apresenta as equações na forma conservativa. Segundo Anderson (1995), a forma conservativa possui vantagens sobre a forma não conservativa do ponto de vista computacional como descrito a seguir.

É possível citar duas vantagens na utilização das equações na forma conservativa, a primeira refere-se ao modo em que se apresentam, podendo ser escritas de uma maneira única e homogênea, o que simplifica a implantação do método numérico, pois torna-se muito mais fácil escrever o código computacional. A

segunda e mais importante vantagem, reside no fato de que, utilizando as equações na forma conservativa, ao discretizá-las visando implantar um método de captura de onda de choque, estas trazem estabilidade ao esquema numérico (Anderson, 1990). Para ilustrar o comportamento citado, será usada uma onda de choque normal e estacionária, em um escoamento como ilustrado na Fig.7.1. O fluido ao atravessar a onda de choque passa das condições de pressão, temperatura, densidade e velocidade que se encontrava em (1) para novas condições das mesmas grandezas em (2). Duas grandezas ilustram bem a descontinuidade imposta pela onda de choque no escoamento. A pressão em (1) é menor que a pressão em (2), a densidade também tem o mesmo comportamento da pressão, sendo, portanto maior em (2) do que em (1). A velocidade (que para esse exemplo é designada pela letra u) tem um comportamento inverso, diminuindo na passagem de (1) para (2). As equações da conservação de massa, da quantidade de movimento e da energia podem ser aplicadas à onda de choque, adotando um volume de controle ilustrado também na Fig.7.1.

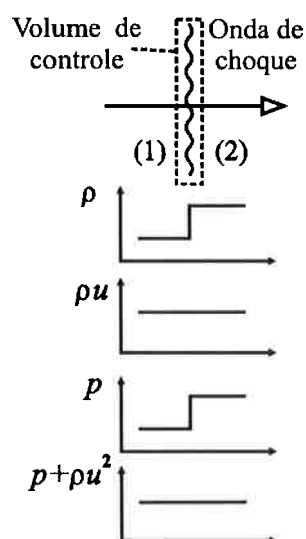


Figura 7.1 Variação das propriedades de fluxo através de uma onda de choque normal.

A equação da conservação de massa (para um problema unidimensional), se resume a:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial r} = 0, \text{ logo} \quad (7.5)$$

$$\rho u = cte, \text{ ou} \quad (7.6)$$

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2, \quad (7.7)$$

onde u é a velocidade normal à onda de choque e h_0 a entalpia específica de estagnação. A equação (7.7) traz a informação que o fluxo de massa através da onda de choque é constante.

A equação da quantidade de movimento para direção r pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial r} = 0, \text{ logo} \quad (7.8)$$

$$\rho u^2 + p = cte, \text{ ou} \quad (7.9)$$

$$\rho_1 u_1^2 + p_1 = \rho_2 u_2^2 + p_2. \quad (7.10)$$

A equação da conservação de energia:

$$\frac{\partial(\rho u h_0)}{\partial r} = 0, \text{ logo} \quad (7.11)$$

$$\rho u h_0 = cte, \text{ ou} \quad (7.12)$$

$$\rho_1 u_1 h_{01} = \rho_2 u_2 h_{02}. \quad (7.13)$$

Observando as equações (7.7), (7.10) e (7.13), é possível notar que as variáveis de fluxo ρu , $\rho u^2 + p$ e $\rho u h_0$ são constantes através da onda de choque, ao contrário das variáveis primitivas densidade, velocidade e pressão que sofrem uma mudança abrupta de valor quando o escoamento atravessa a onda. Um método numérico que calcule as variáveis de fluxo ao invés das variáveis primitivas, não iria

“enxergar” essa descontinuidade, que seria calculada em uma próxima etapa com a transformação das variáveis de fluxo em variáveis primitivas. Deste modo, as variações numéricas não iriam desestabilizar o método. Por esse motivo, as equações desenvolvidas nesse capítulo foram deduzidas na forma conservativa de modo a criar um método de captura de onda de choque mais estável.

7.4 Comportamento matemático das equações de conservação

A solução do sistema quase linear de equações presente na Seção 7.2 está intrinsecamente ligado ao comportamento matemático apresentado pelas equações que o compõe. O sistema é classificado como quase linear que, como citado, tem suas derivadas de primeira ordem, ausência de produtos entre elas, bem como os termos que as multiplicam são funções unicamente das variáveis dependentes.

As equações diferenciais parciais podem ser classificadas em quatro tipos: as hiperbólicas, as parabólicas, as elípticas e as mistas. As equações diferenciais parciais mistas apresentam características híbridas entre os três primeiros tipos, podem, por exemplo, se comportar como equações hiperbólicas - parabólicas. Essa classificação das equações está ligada ao conceito das superfícies características, que podem ser definidas como superfícies sobre as quais certas propriedades são constantes ou que possuem algumas derivadas descontínuas.

Fisicamente, as superfícies características determinam regiões de dependência e influência no escoamento, ou seja, localidades cuja solução depende ou influencia outras posições da região em estudo. Dois métodos são muito conhecidos para a classificação das equações diferenciais parciais, o método que usa a regra de Cramer e outro, mais geral, chamado de método dos autovalores. Informações adicionais sobre o método podem ser encontradas em Hirsch (1998) e Whitham (1974).

7.4.1 Método dos autovalores

Esse procedimento foi originalmente apresentado para as equações de conservação escritas para o modelo do jato evaporativo por Angelo (2000) baseado

nas informações de Hirsch (1998). O sistema de equações diferenciais parciais quase lineares pode ser escrito genericamente como:

$$\frac{\partial E_i^k}{\partial x^k} = Q_i, \quad (7.14)$$

com $k = 1, \dots, m$ e $i = 1, \dots, n$.

Podemos para esse sistema escrever o Jacobiano:

$$A_{i,j}^k = \frac{\partial E_i^k}{\partial t^j}. \quad (7.15)$$

Substituindo a equação (7.15) em (7.14):

$$A_{i,j}^k \frac{\partial t^j}{\partial x^k} = Q_i, \quad (7.16)$$

com $k = 1, \dots, m$ e $i, j = 1, \dots, n$.

Como uma maneira de diminuir os índices podemos reescrever na equação (7.16) usando a forma matricial:

$$A^k \frac{\partial Y}{\partial x^k} = Q, \quad (7.16a)$$

com $k = 1, \dots, m$.

Onde Y é um vetor coluna contendo os elementos t^j , e A é uma matriz quadrada contendo os elementos $A_{i,j}$. A cada superfície característica há um vetor normal \vec{n} . A seguinte identidade é válida caso existam as superfícies características em um dado problema:

$$[A^k n_k] \hat{Y} = 0, \text{ e} \quad (7.17)$$

$$\det |A^k n_k| = 0. \quad (7.18)$$

A partir da obtenção das normais é possível afirmar o tipo de sistema de equações. Caso todas as normais sejam reais e linearmente independentes o sistema é do tipo hiperbólico, se forem todas complexas o sistema é elíptico, caso possua solução real e complexa é dito misto. Finalmente, o sistema é dito parabólico se tiver normais coincidentes (não necessariamente todas).

7.4.2 Determinação da classificação do sistema de equações para o jato evaporativo

Usando o método dos autovalores, nesta seção é determinado o comportamento matemático do sistema de equações apresentadas na Seção 7.2. Serão reescritas as equações para apresentarem-se conforme a equação (7.14). Neste ponto será assumido escoamento isoentrópico, ou seja, a expansão do jato até a onda de choque, pois através da onda de choque o escoamento não pode mais ser considerado isoentrópico. Algumas relações termodinâmicas serão necessárias, relações apresentadas nas equações que se seguem. Elas têm por objetivo encontrar o valor da derivada da energia interna específica em relação à pressão, derivada que será posteriormente usada na manipulação da equação da energia.

Podemos escrever uma propriedade termodinâmica em função de outras duas propriedades independentes, assim a energia interna específica pode ser uma função da pressão e entropia específica:

$$e = e(p, s). \quad (7.19)$$

Deste modo, usando a regra de diferencial exata, tem-se:

$$de = \left. \frac{\partial e}{\partial p} \right|_s dp + \left. \frac{\partial e}{\partial s} \right|_p ds. \quad (7.20)$$

Como estamos estudando o trecho onde o escoamento é isoentrópico a variação de entropia é nula ($ds = 0$), resultando em:

$$de = \left. \frac{\partial e}{\partial p} \right|_s dp. \quad (7.21)$$

Usando a seguinte relação termodinâmica:

$$T ds = dh - \frac{dp}{\rho}, \quad (7.22)$$

e substituindo a definição de entalpia específica na equação (7.21), tem-se:

$$T ds = d \left(e + \frac{p}{\rho} \right) - \frac{dp}{\rho}. \quad (7.23)$$

Além disso, é possível escrever:

$$d\left(\frac{p}{\rho}\right) = \frac{1}{\rho} dp + p d\left(\frac{1}{\rho}\right). \quad (7.24)$$

Assim, substituindo a equação (7.24) na equação (7.23), tem-se:

$$T ds = de + p d\left(\frac{1}{\rho}\right) = dh - \frac{dp}{\rho} = 0. \quad (7.25)$$

Finalmente obtemos:

$$\left.\frac{\partial h}{\partial p}\right|_s = \frac{1}{\rho}. \quad (7.26)$$

É útil manipular o termo $d\left(\frac{1}{\rho}\right)$ da equação (7.25) da seguinte maneira:

$$d\left(\frac{1}{\rho}\right) = d\left(\frac{\rho}{\rho^2}\right) = \frac{1}{\rho^2} d(\rho) + \rho d\left(\frac{1}{\rho^2}\right) = \frac{1}{\rho^2} d(\rho) + 2d\left(\frac{1}{\rho}\right), \text{ ou} \quad (7.27)$$

$$d\left(\frac{1}{\rho}\right) = -\frac{1}{\rho^2} d(\rho). \quad (7.28)$$

Voltando a (7.25), já substituindo a equação acima, vem:

$$de = dh - \frac{dp}{\rho} + \frac{p}{\rho^2} d\rho. \quad (7.29)$$

A equação (7.29) é derivada em relação à pressão:

$$\left.\frac{\partial e}{\partial p}\right|_s = \left.\frac{\partial h}{\partial p}\right|_s - \frac{1}{\rho} + \frac{p}{\rho^2} \left.\frac{\partial \rho}{\partial p}\right|_s. \quad (7.30)$$

O último termo da equação (7.30) pode ser substituído pela definição da velocidade do som, c :

$$\left.\frac{\partial p}{\partial \rho}\right|_s = c^2. \quad (7.31)$$

A variação da entalpia específica com a pressão é obtida via equação (7.26) que, após sua substituição na equação (7.30), finalmente fornece a relação desejada entre a variação da energia interna com a pressão (mantida a entropia constante). Seu

valor é proporcional a pressão e inversamente proporcional ao quadrado do produto da densidade pela velocidade do som, ou matematicamente:

$$\left. \frac{\partial e}{\partial p} \right|_s = \frac{p}{\rho^2 c^2}. \quad (7.32)$$

A idéia é transformar a equação da energia, que possui como uma de suas variáveis a energia interna específica, em uma equação que em seu lugar apresente como variável a pressão. Para que tal equação seja obtida, é necessário o seguinte procedimento: da equação da conservação da energia se subtrai a equação da conservação da quantidade de movimento previamente multiplicada de modo escalar pela velocidade total, usando a definição apresentada por (7.32) é obtida a equação desejada. Conforme descrito neste parágrafo inicialmente com a equação da quantidade de movimento:

$$\frac{d\vec{V}}{dt} + \frac{\nabla p}{\rho} = 0. \quad (7.33)$$

Multiplicando de modo escalar pela velocidade, vem:

$$\vec{V} \cdot \frac{d\vec{V}}{dt} + \frac{\vec{V} \cdot \nabla p}{\rho} = 0, \text{ ou} \quad (7.34)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{V^2}{2} \right) + \frac{\vec{V} \cdot \nabla p}{\rho} = 0. \quad (7.35)$$

Usando a equação da energia (pode ser encontrada na forma apresentada em Anderson, 1990) simplificada (utilizando as hipóteses simplificadoras apresentadas na seção 7.1.1 – exceto a hipótese de regime permanente):

$$\frac{d}{dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) + \frac{\nabla \cdot (p\vec{V})}{\rho} = 0. \quad (7.1d')$$

A equação (7.35) é subtraída da equação (7.1d'):

$$\frac{de}{dt} + \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (p\vec{V}) - \vec{V} \cdot \nabla p] = 0, \text{ ou} \quad (7.36)$$

$$\frac{de}{dt} + \frac{p}{\rho} \nabla \cdot \vec{V} = 0. \quad (7.37)$$

Com o auxílio de (7.32) será substituída a energia interna específica pela pressão na equação (7.37). Reescrevendo (7.32) derivando em relação ao tempo:

$$\frac{de}{dt} = \frac{p}{\rho^2 c^2} \frac{dp}{dt}. \quad (7.38)$$

Substituindo em (7.37) é encontrada a equação desejada:

$$\frac{dp}{dt} + \rho c^2 \nabla \cdot \vec{V} = 0. \quad (7.39)$$

Voltando às coordenadas cilíndricas, pelo cálculo do divergente da velocidade, substituindo a derivada substantiva e eliminando a variação local da pressão com o tempo (regime permanente), bem como a variação na direção θ (axissimetria):

$$\rho c^2 \frac{\partial V_z}{\partial z} + \rho c^2 \frac{\partial V_r}{\partial r} + V_z \frac{\partial p}{\partial z} + V_r \frac{\partial p}{\partial r} = -\frac{\rho c^2 V_r}{r}. \quad (7.40)$$

O sistema de equações será formado pela equação (7.40) e as equações da quantidade de movimento escritas na forma não conservativa. Não é utilizada a equação da conservação de massa, pois a mesma já faz parte das equações (7.1b') e (7.1c').

$$V_r \frac{\partial V_z}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \text{ e} \quad (7.1b')$$

$$V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_r}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} = 0. \quad (7.1c')$$

Usando a mesma nomenclatura apresentada na Seção 7.4.1, para o sistema de equações em estudo $k = 1, 2$ e $i = 1, 2, 3$. Escrevendo na forma de (7.16a), usando as equações na seguinte ordem (7.1b'), (7.1c') e (7.40):

$$\begin{bmatrix} V_z & 0 & 1/\rho \\ 0 & V_z & 0 \\ \rho c^2 & 0 & V_z \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} V_z \\ V_r \\ p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} V_r & 0 & 0 \\ 0 & V_r & 1/\rho \\ 0 & \rho c^2 & V_r \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \begin{bmatrix} V_z \\ V_r \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{\rho c^2 V_r}{r} \end{bmatrix}, \quad (7.41)$$

$$\text{onde: } A^1 = \begin{bmatrix} V_z & 0 & 1/\rho \\ 0 & V_z & 0 \\ \rho c^2 & 0 & V_z \end{bmatrix} \text{ e } A^2 = \begin{bmatrix} V_r & 0 & 0 \\ 0 & V_r & 1/\rho \\ 0 & \rho c^2 & V_r \end{bmatrix}. \quad (7.42)$$

Usando a equação (7.18):

$$\det \left[\begin{bmatrix} V_z & 0 & 1/\rho \\ 0 & V_z & 0 \\ \rho c^2 & 0 & V_z \end{bmatrix} n_z + \begin{bmatrix} V_r & 0 & 0 \\ 0 & V_r & 1/\rho \\ 0 & \rho c^2 & V_r \end{bmatrix} n_r \right] = 0. \quad (7.43)$$

Dividindo e multiplicando pela normal na direção r e substituindo $\lambda = \frac{n_z}{n_r}$:

$$\det \left[\begin{bmatrix} V_z \lambda + V_r & 0 & \lambda/\rho \\ 0 & V_z \lambda + V_r & 1/\rho \\ \rho c^2 \lambda & \rho c^2 & V_z \lambda + V_r \end{bmatrix} \right] = 0. \quad (7.44)$$

Calculando o determinante:

$$(V_z \lambda + V_r)^3 - (c^2 \lambda)(V_z \lambda + V_r)\lambda - c^2 (V_z \lambda + V_r) = 0, \text{ ou} \quad (7.45)$$

$$(V_z \lambda + V_r) \left[(V_z \lambda + V_r)^2 - c^2 \lambda^2 - c^2 \right] = 0. \quad (7.45')$$

O primeiro autovalor é:

$$\lambda^1 = -\frac{V_r}{V_z}. \quad (7.46)$$

A superfície característica (neste caso é uma linha característica) associada ao primeiro autovalor é uma linha de corrente.

Os outros dois autovalores são:

$$\lambda^{2,3} = \frac{-V_z V_r \pm \sqrt{V_z^2 V_r^2 - (V_z^2 - c^2)(V_r^2 - c^2)}}{(V_z^2 - c^2)}. \quad (7.47)$$

O primeiro autovalor é real, os outros dois dependem dos valores das velocidades nas direções z e r . Caso o termo dentro do radical em (7.47) seja maior que zero, todos os autovalores serão reais e distintos, desta forma é possível concluir que o sistema é hiperbólico.

$$V_z^2 V_r^2 - (V_z^2 - c^2)(V_r^2 - c^2) > 0, \text{ ou} \quad (7.48)$$

$$V_z^2 + V_r^2 - c^2 > 0. \quad (7.49)$$

Partindo da definição do número de Mach: $M = \frac{V}{c} = \frac{(V_z^2 + V_r^2)^{1/2}}{c}$, a equação (7.49) só poderá ser satisfeita caso o número de Mach seja supersônico (maior que a unidade).

Um escoamento invíscido bidimensional em regime permanente que seja supersônico é modelado por um sistema de equações diferenciais parciais do tipo hiperbólico. E possui, segundo a análise anterior, duas linhas características que passam por um determinado ponto no escoamento. O jato evaporativo tem todas as características citadas neste parágrafo.

7.4.3 Importância da classificação do sistema de equações no tipo de solução numérica empregada

Uma das características mais importantes em um escoamento é o modo como as informações são transmitidas em seu interior, fato intimamente ligado a sua natureza e traduzido pelo tipo do sistema de equações. Um problema hiperbólico bidimensional, como provado, possui duas linhas características passando por um ponto P qualquer. Deste ponto em diante, seguindo a direção do escoamento, as linhas características delimitam uma região que receberá influência direta de qualquer perturbação que ocorra localmente em P. A região descrita é conhecida como região de influência do ponto P e está representada na Fig.7.2 como região I. Uma região anterior a P (também delimitada pelas duas linhas características) pode também ser vista na Fig.7.2 é denominada como região II. Sobre cada um dos pontos na região II, passam da mesma maneira que no ponto P, duas linhas características, criando para cada um deles uma região de influência.

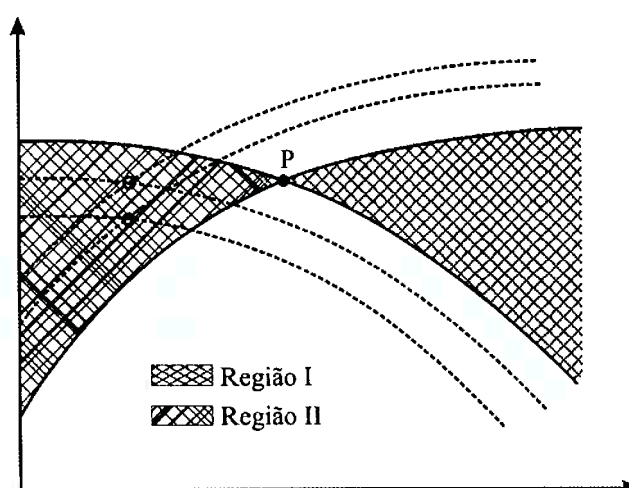


Figura 7.2 Regiões de influência e dependência relativas ao ponto P (respectivamente Região I e Região II) determinadas pelas linhas características. Em um sistema de equações diferenciais parciais do tipo hiperbólico modelando um problema bidimensional em regime permanente.

O ponto P está no interior da zona de influência de todos os pontos pertencentes à região II. O que nos leva a concluir, que a solução de P depende da região II. Essa região, então, é conhecida como região de dependência para o ponto P. As propriedades em P podem ser encontradas através das propriedades de pontos anteriores a ele, em uma solução denominada como marcha à jusante, que tem conhecida apenas uma linha inicial de dados e através de “passos” no espaço para uma direção, encontra a solução para todos os outros pontos no escoamento.

7.5 Malha

Quando é possível apresentar para um problema uma solução analítica, esta é contínua, o que em outras palavras significa dizer que para todo o campo em estudo os valores das grandezas podem ser determinados. Geralmente soluções analíticas são factíveis em casos em que são impostas condições simplificadoras, afastando na maioria das vezes a solução matemática do comportamento físico real. Utilizando uma solução numérica é possível resolver as equações de conservação com condições de contorno mais complexas, o que não pode ser feito por meio de soluções analíticas. Porém, uma desvantagem reside no fato das equações terem de ser resolvidas para um número discreto de pontos, onde são aplicados métodos

numéricos para aproximação das equações gerais de conservação. Entre eles podemos citar o método das diferenças finitas, dos volumes finitos ou dos elementos finitos. O arranjo desses pontos no espaço é chamado de malha, sua distribuição e densidade são extremamente importantes, sendo que a acuidade da solução depende em muito desses dois parâmetros. A malha deve ser suficientemente refinada, ou seja, conter um número adequado de pontos em certas regiões do escoamento, para capturar satisfatoriamente variações das propriedades ou grandezas. Contudo, um número exagerado de pontos computacionais pode levar a impossibilidade de resolução das equações devido a grande demanda computacional exigida neste caso.

Dois tipos de malhas são atualmente as mais empregadas na solução das equações diferenciais parciais: as estruturadas e as não estruturadas. O primeiro tipo obedece a uma distribuição regular dos pontos (ou elementos) que as compõe o que não acontece nas malhas não estruturadas. As malhas estruturadas possuem sistemas de coordenadas orientadas de acordo com as fronteiras do sistema o que facilita a imposição das condições de contorno. Meneguini (1989) apresenta com detalhes as malhas estruturadas, discute a solução de alguns escoamentos utilizando as mesmas e exemplifica metodologias para sua construção. Uma dessas técnicas é a geração numérica de sistemas de coordenadas por meio da solução de equações diferenciais elípticas. Esta última, foi escolhida para construir a malha sobre a região de expansão do jato evaporativo.

7.5.1 Espaço físico verso espaço computacional

O método das diferenças finitas é utilizado neste trabalho, limitando a geometria da malha a uma geometria de distribuição dos pontos retangular. Como a proposta de malha para a região não obedece a um padrão retangular há necessidade de transformá-la matematicamente para que atinja essa forma. O espaço inicial onde a malha é originalmente construída denomina-se espaço físico e o espaço obtido após a transformação é conhecido como espaço computacional ou espaço matemático transformado. Desta forma, a geração do sistema de coordenadas se resume na obtenção de uma relação bi-unívoca entre o espaço físico (z,r) e o espaço computacional (ξ,η) , ou seja, funções que relacionem $\xi(z,r)$ e $\eta(z,r)$. Mantida a

condição de relação biunívoca, o Jacobiano, deverá existir não se anulando em nenhum ponto dentro da região de interesse (Meneghini, 1989).

7.5.2 Determinação da Malha (geração numérica do sistema de coordenadas) por meio da solução de equações diferenciais parciais elípticas

Esse procedimento segundo Thompson (1999), produz a melhor malha possível quando se levam em conta a distribuição dos pontos e a suavidade das transições. A borda da malha, ou seja, sua parte externa é conhecida. Na Fig.7.3a os contornos da malha para o jato evaporativo são representados através dos segmentos AB, BC, CD e DA. Sobre a linha AB estão localizados os pontos imediatamente após a onda de evaporação, AD os pontos sobre a parede, BC é exatamente a linha de simetria axial e finalmente, DC os pontos cujas condições são ditas "ao longe". A distribuição e densidade dos pontos sobre as fronteiras podem, em princípio, ser quaisquer (fato que será discutido nas próximas seções).

É sabido que o Jacobiano não pode ser nulo. Uma maneira de garantir que isso ocorra é obrigar que as funções $\xi(z,r)$ e $\eta(z,r)$ satisfaçam a equação de Laplace:

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial r^2} = 0, \text{ e} \quad (7.50)$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} = 0. \quad (7.51)$$

Como já citado, todos os pontos sobre o contorno ABCD têm suas coordenadas (z,r) conhecidas e as correspondentes (ξ,η) no plano computacional sobre a linha A'B'C'D' (veja Fig.7.3c). O conhecimento dos contornos é indispensável na solução do sistema de equações formado pelas equações (7.50) e (7.51), pois tratam-se de equações diferenciais parciais elípticas.

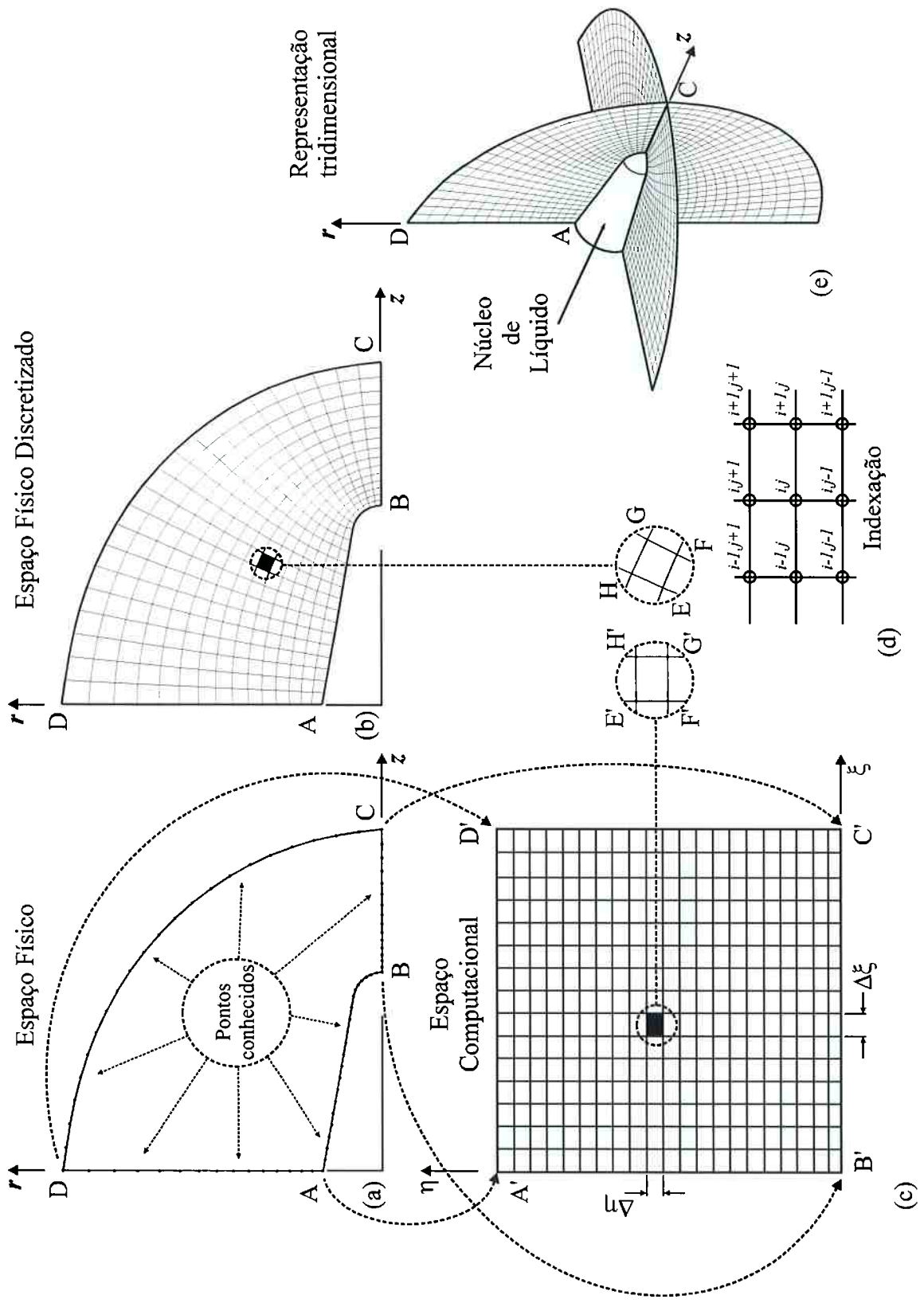


Figura 7.3 Representação do espaço físico e computacional. (a) Pontos na extremidade da malha; (b) Espaço físico discretizado - final; (c) Espaço computacional; (d) Indexação da malha e (e) Representação tridimensional.

Contudo, para a solução, um artifício adotado é de inverter as variáveis dependentes e independentes, de forma que não mais se deseja encontrar $\xi(z,r)$ e $\eta(z,r)$ mas, $z(\xi,\eta)$ e $r(\xi,\eta)$. O resultado da inversão é o seguinte (mais detalhes, veja Meneghini, 1989):

$$g_{22} \frac{\partial^2 z}{\partial \xi^2} - 2g_{12} \frac{\partial^2 z}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11} \frac{\partial^2 z}{\partial \eta^2} = 0, \text{ e} \quad (7.52)$$

$$g_{22} \frac{\partial^2 r}{\partial \xi^2} - 2g_{12} \frac{\partial^2 r}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11} \frac{\partial^2 r}{\partial \eta^2} = 0, \quad (7.53)$$

onde:

$$g_{22} = \left(\frac{\partial z}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \eta} \right)^2, \quad (7.54)$$

$$g_{12} = \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} + \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial r}{\partial \eta}, \text{ e} \quad (7.55)$$

$$g_{11} = \left(\frac{\partial z}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \xi} \right)^2. \quad (7.56)$$

A inversão, faz com que o sistema formado pelas equações (7.52) e (7.53) tenha solução mais fácil que o sistema original, sabendo que é resolvido no espaço computacional no qual as condições de contorno são muito simples de serem tratadas haja vista a regularidade geométrica do mesmo.

Método numérico de solução do sistema de equações diferenciais parciais elípticas para construção da malha no espaço físico

O método de Gauss-Seidel de sobre-relaxações sucessivas é usado para resolução numérica das equações (7.52) e (7.53). A indexação dos pontos na malha seguirá o padrão convencional bidimensional, usado na maioria dos livros texto quando se referem a células computacionais. Esse padrão está representado na Fig.7.3d, é assumido que o contador inteiro i recebe valores constantes quando a variável ξ também permanece inalterada, o mesmo ocorrendo com o contador j em relação a variável η . O problema consiste em encontrar os valores para os pontos

internos aos contornos ABCD para o espaço computacional, sendo assim, todos os pontos no espaço físico que possuam indexação $i = 1, i = i_{\text{máximo}}, j = 1$ ou $j = j_{\text{máximo}}$ são especificados como dados de entrada restando calcular os pontos internos da malha.

Para aproximação das derivadas das equações utiliza-se o método das diferenças finitas centradas, quais sejam:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} z(i, j) \cong \frac{z(i+1, j) - z(i-1, j)}{2 \Delta \xi}, \quad (7.57)$$

$$\frac{\partial}{\partial \eta} z(i, j) \cong \frac{z(i, j+1) - z(i, j-1)}{2 \Delta \eta}, \quad (7.58)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} z(i, j) \cong \frac{z(i+1, j) - 2z(i, j) + z(i-1, j)}{\Delta \xi^2}, \quad (7.59)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} z(i, j) \cong \frac{z(i, j+1) - 2z(i, j) + z(i, j-1)}{\Delta \eta^2}, \quad (7.60)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} z(i, j) \cong \frac{z(i+1, j+1) - z(i+1, j-1) - z(i-1, j+1) + z(i-1, j-1)}{4 \Delta \xi \Delta \eta}, \quad (7.61)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} r(i, j) \cong \frac{r(i+1, j) - r(i-1, j)}{2 \Delta \xi}, \quad (7.62)$$

$$\frac{\partial}{\partial \eta} r(i, j) \cong \frac{r(i, j+1) - r(i, j-1)}{2 \Delta \eta}, \quad (7.63)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} r(i, j) \cong \frac{r(i+1, j) - 2r(i, j) + r(i-1, j)}{\Delta \xi^2}, \quad (7.64)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} r(i, j) \cong \frac{r(i, j+1) - 2r(i, j) + r(i, j-1)}{\Delta \eta^2}, \quad (7.65)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} r(i, j) \cong \frac{r(i+1, j+1) - r(i+1, j-1) - r(i-1, j+1) + r(i-1, j-1)}{4 \Delta \xi \Delta \eta}. \quad (7.66)$$

O método das sub-relaxações sucessivas consiste em calcular os seguintes resíduos:

$$\zeta^\Psi z(i, j) = g_{22}^e \frac{\partial^2 z}{\partial \xi^2} - 2g_{12}^e \frac{\partial^2 z}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11}^e \frac{\partial^2 z}{\partial \eta^2}, \quad (7.67)$$

$$\zeta^\Psi r(i, j) = g_{22}^e \frac{\partial^2 r}{\partial \xi^2} - 2g_{12}^e \frac{\partial^2 r}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11}^e \frac{\partial^2 r}{\partial \eta^2}. \quad (7.68)$$

Partindo inicialmente de uma estimativa de distribuição dos pontos internos aos contornos no espaço físico (para uma iteração Ψ), das equações (7.59), (7.60), (7.61), (7.64), (7.65) e (7.66), avaliando g_{22}^e , g_{12}^e e g_{11}^e através das equações (7.54), (7.55) e (7.56) em conjunto com (7.57), (7.58), (7.62) e (7.63). As coordenadas dos pontos vão sendo corrigidas para cada iteração por meio das expressões:

$$z^{\Psi+1}(i, j) = z^\Psi(i, j) + \frac{csr}{(2g_{22}^e + 2g_{11}^e)} \zeta^\Psi z(i, j), \text{ e} \quad (7.69)$$

$$r^{\Psi+1}(i, j) = r^\Psi(i, j) + \frac{csr}{(2g_{22}^e + 2g_{11}^e)} \zeta^\Psi r(i, j). \quad (7.70)$$

onde csr é o coeficiente de sobre-relaxação. O processo é realizado diversas vezes, atualizando sempre os valores das coordenadas dos pontos no espaço físico até os valores dos resíduos tornarem-se poucos significativos (dada uma certa tolerância previamente estabelecida), obtendo assim o espaço físico discretizado conforme ilustrado na Fig.7.3b em uma representação bidimensional, e na Fig.7.3e em uma representação tridimensional simplificada (que ressalta a axissimetria em torno do eixo z).

7.6 Transformação das equações de conservação

Para a solução do problema da expansão pós-onda de evaporação do jato evaporativo, no espaço computacional, as equações originalmente escritas para as coordenadas z e r devem ser reescritas para ξ e η . Retomando a forma genérica apresentada na Seção 7.2:

$$\frac{\partial F}{\partial z} + \frac{\partial G}{\partial r} = B. \quad (7.1)$$

Utilizando a regra da cadeia do cálculo:

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z}, \text{ e} \quad (7.71)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r}. \quad (7.72)$$

Aplicando as equações (7.71) e (7.72) a (7.1), vem:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial G}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} + \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} = B. \quad (7.73)$$

Os termos $\frac{\partial \xi}{\partial z}$, $\frac{\partial \eta}{\partial z}$, $\frac{\partial \xi}{\partial r}$, $\frac{\partial \eta}{\partial r}$ são chamados de métricas e obtidos

numericamente da malha já gerada, através do método das diferenças finitas. Uma outra abordagem para o cálculo das métricas seria encontrar o Jacobiano da transformação. Escrito da seguinte forma:

$$Jac = \begin{vmatrix} \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial r}{\partial \xi} \\ \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial r}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial r}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial r}{\partial \xi}. \quad (7.74)$$

E finalmente calcular as métricas através das equações:

$$\frac{\partial \xi}{\partial z} = \frac{1}{Jac} \frac{\partial r}{\partial \eta}, \quad (7.75)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial z} = -\frac{1}{Jac} \frac{\partial r}{\partial \xi}, \quad (7.76)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial r} = -\frac{1}{Jac} \frac{\partial z}{\partial \eta}, \text{ e} \quad (7.77)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial r} = \frac{1}{Jac} \frac{\partial z}{\partial \xi}. \quad (7.78)$$

7.7 Método numérico de MacCormack

Como citado, para solução do sistema de equações do modelo bidimensional axissimétrico, é utilizado o método de diferenças finitas de MacCormack (marcha à jusante). O método consiste em duas etapas, uma etapa de predição e outra de

correção (“predictor - corrector”). Conforme discutido nas Seções 7.4.2 e 7.4.3, o problema do jato evaporativo admite uma solução do tipo marcha à jusante, ou seja, dado uma linha inicial de dados, que é representada pela geratriz da superfície de evaporação (cone de líquido ou núcleo de líquido), onde são conhecidas todas as propriedades, através de uma marcha espacial é possível determinar as propriedades para todos os outros pontos. Devido à mudança do espaço físico para o espaço computacional a marcha se dará na direção ξ , partindo de $\xi = 0$ que é a linha de dados inicial. Nesta linha são conhecidas todas as propriedades e grandezas, determinadas pela solução da onda de evaporação através das equações e método apresentados no Capítulo 5.

A equação geral (7.73) deve ser reescrita para se adequar à marcha. No lado esquerdo do sinal de igualdade permanecerão as derivadas parciais em relação a direção ξ e os outros termos serão posicionados à direita, como segue:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial G}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} = B - \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} - \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z}. \quad (7.73a)$$

Através de algumas manipulações é possível provar que:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(F \frac{\partial \xi}{\partial z} \right). \quad (7.79)$$

Deste modo, usando (7.79) na equação (7.73a):

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(F \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) + \frac{\partial G}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} = B - \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} - \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z}. \quad (7.80)$$

Agrupando os termos:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(F \frac{\partial \xi}{\partial z} + G \frac{\partial \xi}{\partial r} \right) = B - \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} - \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z}. \quad (7.80a)$$

É possível substituir:

$$\left(F \frac{\partial \xi}{\partial z} + G \frac{\partial \xi}{\partial r} \right) = \Phi. \quad (7.81)$$

Usando a definição de entalpia específica de estagnação e a definição de entalpia específica:

$$\Phi = \left\{ \begin{array}{l} \rho \left(V_z \frac{\partial \xi}{\partial z} + V_r \frac{\partial \xi}{\partial r} \right) \\ (\rho V_z^2 + p) \frac{\partial \xi}{\partial z} + (\rho V_r V_z) \frac{\partial \xi}{\partial r} \\ (\rho V_z V_r) \frac{\partial \xi}{\partial z} + (\rho V_r^2 + p) \frac{\partial \xi}{\partial r} \\ \left[\rho V_z \left(e + \frac{V^2}{2} \right) + p V_z \right] \frac{\partial \xi}{\partial z} + \left[\rho V_r \left(e + \frac{V^2}{2} \right) + p V_r \right] \frac{\partial \xi}{\partial r} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{array} \right\}. \quad (7.82)$$

A equação (7.80a) está apresentada na forma desejada para implantação do método numérico. Como são conhecidas as propriedades para $\xi = 0$, usando uma expansão em série de Taylor truncada é possível calcular o valor da variável de fluxo Φ no próximo passo $(i+1, j)$, ou seja, caminhando $\Delta \xi$ à jusante da posição inicial:

$$\Phi_{i+1,j} = \Phi_{i,j} + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)_m \Delta \xi + \overline{SF}_{i+1,j}. \quad (7.83)$$

A derivada parcial de Φ em relação a ξ é uma média (m) conveniente que será calculada em duas etapas. O termo designado SF será explicado no item viscosidade artificial.

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)_m = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)_{i,j} + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)_{i+1,j} \right]. \quad (7.84)$$

7.7.1 Etapa de predição

Na etapa de predição contamos apenas com os valores na posição i , portanto usamos diferenças finitas para frente ao avaliar $\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)_{i,j}$. Discretizando a equação

(7.80a):

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)_{i,j} = B_{i,j} - \frac{F_{i,j+1} - F_{i,j}}{\eta_{i,j+1} - \eta_{i,j}} \left(\frac{\partial \eta}{\partial r} \right)_{i,j} - \frac{G_{i,j+1} - G_{i,j}}{\eta_{i,j+1} - \eta_{i,j}} \left(\frac{\partial \eta}{\partial z} \right)_{i,j}. \quad (7.85)$$

A variável de fluxo Φ pode ser estimada em $(i+1, j)$ a partir do resultado obtido em (7.85), será designada por um traço indicando tratar-se de um valor intermediário. Também usando uma expansão em série de Taylor truncada:

$$\bar{\Phi}_{i+1,j} = \Phi_{i,j} + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)_{i,j} \Delta \xi + SF_{i,j}. \quad (7.86)$$

Obtido o valor de cada um dos termos do vetor variável de fluxo intermediário calculados pela equação (7.86), há necessidade de encontrar as variáveis primitivas intermediárias (velocidade nas direções r e z , pressão, temperatura, título, entalpia específica, densidade,...). Esta operação é conhecida como decodificação.

$$\bar{\Phi}_{i+1,j} = \left\{ \begin{array}{l} \left[\rho \left(V_z \frac{\partial \xi}{\partial z} + V_r \frac{\partial \xi}{\partial r} \right) \right]_{i+1,j} \\ \left[(\rho V_z^2 + p) \frac{\partial \xi}{\partial z} + (\rho V_r V_z) \frac{\partial \xi}{\partial r} \right]_{i+1,j} \\ \left[(\rho V_z V_r) \frac{\partial \xi}{\partial z} + (\rho V_r^2 + p) \frac{\partial \xi}{\partial r} \right]_{i+1,j} \\ \left\{ \left[\rho V_z \left(e + \frac{V^2}{2} \right) + p V_z \right] \frac{\partial \xi}{\partial z} + \left[\rho V_r \left(e + \frac{V^2}{2} \right) + p V_r \right] \frac{\partial \xi}{\partial r} \right\}_{i+1,j} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \bar{\Phi}_1 \\ \bar{\Phi}_2 \\ \bar{\Phi}_3 \\ \bar{\Phi}_4 \end{array} \right\}_{i+1,j}. \quad (7.87)$$

A equação (7.87) é na verdade um sistema não linear de equações. Este sistema possui cinco incógnitas e quatro equações, ou seja, tem grau de indeterminação um. A operação de decodificação será descrita em detalhes mais a frente. Por enquanto digamos que é possível eliminar esse grau de indeterminação através da introdução da equação de estado de Lee-Kesler. Decodificadas as variáveis são obtidas as grandezas preditas:

$$\left(\bar{V}_r \right)_{i+1,j}, \left(\bar{V}_z \right)_{i+1,j}, \left(\bar{\rho} \right)_{i+1,j}, \left(\bar{p} \right)_{i+1,j} \text{ e } \left(\bar{e} \right)_{i+1,j}. \quad (7.88)$$

Para todas as linhas $i, i + 1, \dots, i + npassos$ há o mesmo número de pontos $npontos$. Fica evidente que quando o contador j atinge o valor $j = npontos$, será

necessário para cálculo de $\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right)_{i,j}$ ter um valor para as variáveis de fluxo F e G em um ponto inexistente, que é o ponto $(i+1, npontos+1)$. Uma solução para esse problema é no cálculo de $\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right)_{i,j}$, quando $j = npontos$ ($\eta = 1$), utilizar diferenças finitas para trás ao invés de diferenças finitas para frente. É importante ressaltar que essa saída resolve o problema, mas, prejudica a acuidade de segunda ordem do método para estes pontos.

7.7.2 Etapa de correção

Partindo das variáveis primitivas calculadas no passo de predição para $i+1$ são calculados os valores das variáveis de fluxo $\bar{F}_{i+1,j}$, $\bar{G}_{i+1,j}$ e $\bar{B}_{i+1,j}$. Voltando a equação (7.80a) agora usando diferenças finitas para trás é obtido o valor da derivada corrigida de Φ em relação a ξ :

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right)_{i+1,j} = \bar{B}_{i,j} - \frac{\bar{F}_{i+1,j} - \bar{F}_{i+1,j-1}}{\eta_{i+1,j} - \eta_{i+1,j-1}} \left(\frac{\partial \eta}{\partial r}\right)_{i,j} - \frac{\bar{G}_{i+1,j} - \bar{G}_{i+1,j-1}}{\eta_{i+1,j} - \eta_{i+1,j-1}} \left(\frac{\partial \eta}{\partial z}\right)_{i,j}. \quad (7.89)$$

Quando $\eta = 0$, exatamente sobre a linha de simetria, no cálculo de $\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right)_{i+1,j}$ via equação (7.9) será necessário ter um valor para as variáveis de fluxo no ponto $(i+1, -1)$ que obviamente não existe. Novamente o método de diferenças finitas é trocado, agora de diferenças finitas para trás para diferenças finitas para frente, valendo aqui também as observações sobre a perda da precisão de segunda ordem para esses pontos.

7.7.3 Cálculo da variável de fluxo definitiva para $i + 1, j$

Retornando a equação (7.84) e usando os valores obtidos nos itens de predição e correção via equações (7.85) e (7.89) é calculado o valor de $\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right)_m$.

Substituindo o valor da derivada parcial de Φ em relação a ξ média na equação (7.86) é obtido o valor definitivo de $\Phi_{i+1,j}$. As variáveis primitivas definitivas novamente são encontradas pela decodificação da variável de fluxo Φ . O procedimento anterior é realizado para todos os pontos na linha $i+1$, variando j de modo a varrer a linha completamente.

7.7.4 Viscosidade Artificial

O escoamento é tratado como o escoamento de um fluido invíscido, o que em outras palavras, quer dizer que os efeitos devido à viscosidade são desconsiderados, ou seja, que sua influência é nula. Aproximação que, dadas às características do escoamento, não acarreta prejuízo nos resultados e, por conseguinte às conclusões oriundas das análises das respostas obtidas pela solução numérica dos mesmos.

Segundo Anderson (1990), todas as solução que utilizam técnicas de marcha (espacial ou temporal) através do esquema de diferenças finitas podem tornar-se imprecisas pelo fato de pequenas flutuações numéricas, introduzidas na solução através das condições de contorno, serem em alguns casos amplificadas tornando instável a solução numérica. Nos escoamentos viscosos, as instabilidades numéricas tendem a ser amortecidas e as flutuações em geração são, devido a esse fato, dissipadas.

Os efeitos das instabilidades numéricas, podem ser minimizados através do uso nas equações de conservação discretizadas de termos dissipativos, cujo significado físico é inexistente, ou seja, tem caráter apenas matemático. Esses termos adicionados às equações de conservação guardam semelhanças em sua formulação aos termos dissipativos das equações, por exemplo, de Navier-Stokes para fluidos viscosos. Por seu efeito dissipativo e pela formulação matemática são conhecidos como termos de viscosidade artificial.

A utilização explícita da viscosidade artificial contribui para a piora dos resultados obtidos pelos métodos numéricos. Contudo, em alguns tipos de escoamentos, entre os quais pode-se incluir o escoamento de jato evaporativo, em

que há gradientes elevados das propriedades (salto das propriedades através da onda de choque) particularmente para o método numérico proposto, há necessidade do uso da viscosidade artificial e, em alguns casos, sua inexistência inviabiliza a solução (conforme observado em testes realizados).

Segundo Anderson (1995), estudos para diversos tipos de escoamentos revelaram que, em combinação, quando da utilização da técnica de MacCormack a seguinte expressão obtém bons resultados:

$$(SF_\lambda)_{i,j} = \frac{C_x |p_{i,j+1} - 2p_{i,j} + p_{i,j-1}|}{p_{i,j+1} + 2p_{i,j} + p_{i,j-1}} [(\Phi_\lambda)_{i,j+1} - 2(\Phi_\lambda)_{i,j} + (\Phi_\lambda)_{i,j-1}], \quad (7.90)$$

onde λ é um contador que varia de 1 até 4 e C_x um adimensional que controla a influência da viscosidade artificial no escoamento. Para a etapa anterior a decodificação final:

$$(\overline{SF}_\lambda)_{i,j} = \frac{C_x |\bar{p}_{i,j+1} - 2\bar{p}_{i,j} + \bar{p}_{i,j-1}|}{\bar{p}_{i,j+1} + 2\bar{p}_{i,j} + \bar{p}_{i,j-1}} [(\overline{\Phi}_\lambda)_{i,j+1} - 2(\overline{\Phi}_\lambda)_{i,j} + (\overline{\Phi}_\lambda)_{i,j-1}]. \quad (7.91)$$

7.7.5 Decodificação da variável de fluxo nas variáveis primitivas

A decodificação é uma operação que está presente na etapa de predição e na etapa final do método numérico de MacCormack. Em primeiro lugar, são obtidas relações das velocidades em função das variáveis de fluxo usando a equação (7.82):

$$V_z = \frac{\Phi_2 - p \frac{\partial \xi}{\partial z}}{\Phi_1}, \text{ e} \quad (7.92)$$

$$V_r = \frac{\Phi_3 - p \frac{\partial \xi}{\partial r}}{\Phi_1}. \quad (7.93)$$

Da primeira linha de (7.82) temos $\Phi_1 = \rho \left(V_z \frac{\partial \xi}{\partial z} + V_r \frac{\partial \xi}{\partial r} \right)$, substituindo as velocidades dadas pelas equações (7.92) e (7.93) e isolando a densidade chegamos a:

$$\rho = \frac{\Phi_1^2}{\left(\Phi_2 - p \frac{\partial \xi}{\partial z}\right) \frac{\partial \xi}{\partial z} + \left(\Phi_3 - p \frac{\partial \xi}{\partial r}\right) \frac{\partial \xi}{\partial r}}. \quad (7.94)$$

Do quarto elemento, correspondente a quarta linha da equação (7.82) temos

$$\Phi_4 = \left[\rho V_z \left(e + \frac{V^2}{2} \right) + p V_z \right] \frac{\partial \xi}{\partial z} + \left[\rho V_r \left(e + \frac{V^2}{2} \right) + p V_r \right] \frac{\partial \xi}{\partial r}.$$

Usando a definição de entalpia específica de estagnação:

$$\frac{\Phi_4}{\Phi_1} = h + \frac{1}{2} (V_z^2 + V_r^2). \quad (7.95)$$

Substituindo as equações (7.92) e (7.93) em (7.95):

$$\frac{\Phi_4}{\Phi_1} = h + \frac{1}{2\Phi_1^2} \left[\left(\Phi_2 - p \frac{\partial \xi}{\partial z} \right)^2 + \left(\Phi_3 - p \frac{\partial \xi}{\partial r} \right)^2 \right]. \quad (7.96)$$

As equações (7.94) e (7.96) formam um sistema de duas equações e três incógnitas (pressão, densidade e entalpia). É necessária uma terceira equação que é uma equação de estado (Lee-Kesler), que elimina a indeterminação do sistema. Neste ponto, como já citado, o modelo bifásico de equilíbrio térmico é empregado. Sendo assim, a densidade e a entalpia específica podem ser escritas como função da temperatura e do título (x), enquanto a pressão é função exclusiva da temperatura de saturação T .

$$p = p(T), \quad (7.97)$$

$$h = x h_v + (1-x) h_L, \text{ e} \quad (7.98)$$

$$\rho = \frac{1}{\frac{x}{\rho_v} + \frac{1-x}{\rho_L}}. \quad (7.99)$$

Lembrando que, os subscritos (L) e (v) referem-se respectivamente a líquido e vapor saturados. Introduzindo (7.97), (7.98) e (7.99) em (7.94) e (7.96), são encontradas as novas equações:

$$\frac{1}{\frac{x}{\rho_v} + \frac{1-x}{\rho_L}} - \frac{\Phi_1^2}{\left(\Phi_2 - p \frac{\partial \xi}{\partial z}\right) \frac{\partial \xi}{\partial z} + \left(\Phi_3 - p \frac{\partial \xi}{\partial r}\right) \frac{\partial \xi}{\partial r}} = 0, \text{ e} \quad (7.100)$$

$$x h_v + (1-x) h_L + \frac{1}{2\Phi_1^2} \left[\left(\Phi_2 - p \frac{\partial \xi}{\partial z}\right)^2 + \left(\Phi_3 - p \frac{\partial \xi}{\partial r}\right)^2 \right] = \frac{\Phi_4}{\Phi_1}. \quad (7.101)$$

Como forma de simplificar a solução das equações (7.100) e (7.101), é possível isolar o título na equação (7.100):

$$x = \frac{\left(\Phi_2 - p \frac{\partial \xi}{\partial z}\right) \frac{\partial \xi}{\partial z} + \left(\Phi_3 - p \frac{\partial \xi}{\partial r}\right) \frac{\partial \xi}{\partial r} - \frac{\Phi_1^2}{\rho_L}}{\Phi_1^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_L}\right)}. \quad (7.102)$$

Ao substituir a equação (7.102) em (7.101), após manipulações algébricas e a troca da densidade pelo volume específico $\left(\nu = \frac{1}{\rho} = x \nu_v + (1-x) \nu_L\right)$ chegamos a:

$$2 \frac{\Delta h}{\Delta v} \left(\Phi_2 \frac{\partial \xi}{\partial z} + \Phi_3 \frac{\partial \xi}{\partial r} - \nu_L \Phi_1^2 \right) - 2p \left\{ \left[\left(\frac{\partial \xi}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial r}\right)^2 \right] \frac{\Delta h}{\Delta v} + \Phi_2 \frac{\partial \xi}{\partial z} + \Phi_3 \frac{\partial \xi}{\partial r} \right\} + p^2 \left[\left(\frac{\partial \xi}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial r}\right)^2 \right] + \Phi_3^2 + \Phi_2^2 - 2\Phi_2 \Phi_4 + 2h_L \Phi_1^2 = 0. \quad (7.103)$$

onde: $\Delta h = h_v - h_L$ e $\Delta v = \nu_v - \nu_L$.

A equação (7.103) é uma função exclusiva da temperatura e pode ser genericamente escrita como $\varphi(T) = 0$. No interesse de garantir a convergência da solução da equação (7.103) utiliza-se na solução uma combinação de métodos numéricos, o método da dicotomia e o método de Newton-Raphson.

O processo de expansão pode levar, em alguns casos, a uma mudança de fase completa, ou seja, durante a expansão é possível atingir o estado de vapor superaquecido para o iso-octano (uma SCME – veja Seção 4.3). O procedimento para decodificar as variáveis de fluxo nas variáveis primitivas proposto anteriormente pressupõe que o fluido ainda se encontra na região de equilíbrio bifásico. Nos casos em que o procedimento relatado obtiver valores de título superior

a unidade, a mudança completa de fase já foi alcançada e os valores obtidos não exprimem a realidade. Sendo assim, a decodificação é processada de forma diferente. As equações (7.94) e (7.96) continuam válidas, contudo, não é possível utilizar as equações (7.97), (7.98) e (7.99). A solução proposta neste trabalho é a de reduzir a dependência desse sistema a apenas duas variáveis, pressão e temperatura, haja vista o modo de obtenção de propriedades proposto. É possível relacionar, através de uma equação de estado a entalpia específica como função da pressão e temperatura, o mesmo com a densidade. Matematicamente é possível representar, respectivamente as equações (7.94) e (7.96):

$$\varphi_1(p, T) = 0, \text{ e} \quad (7.94a)$$

$$\varphi_2(p, T) = 0. \quad (7.96a)$$

As equações (7.94) e (7.96) podem ser resolvidas pelo método de Newton-Raphson de solução de equações não-lineares, só que agora aplicado a um sistema de equações.

Uma das grandes desvantagens do método apresentado é justamente a necessidade de decodificação das variáveis de fluxo nas variáveis primitivas. Como mencionado anteriormente, quando a substância pode ser tratada como gás perfeito a obtenção das propriedades termodinâmicas é extremamente simples, de fato direta, como apresentado em muitos livros texto de dinâmica dos gases e escoamento compressível. Contudo, nos casos de gases reais, ou como do presente trabalho que envolve misturas bifásicas (e vapor superaquecido), as equações de estado tornam-se bastante complexas, exigindo que métodos numéricos de cálculo de propriedades sejam empregados na sua solução. A convergência deve acontecer primeiro para a equação de estado na rotina responsável por determinar as propriedades termodinâmicas, depois dentro da rotina de decodificação em um processo que se repete muitas vezes para cada ponto da malha e muitas vezes mais para a rotina de propriedades em um procedimento multiplicativo que chega atingir números extraordinários dada à quantidade de vezes que é solicitado.

7.8 Condições de contorno

A adequada especificação das condições de contorno é decisiva para a solução do problema do escoamento. Em alguns tipos de problemas bidimensionais e tridimensionais sua implementação chega ser mais complexa que a própria solução. Entretanto, a geometria da região de expansão da mistura bifásica do jato evaporativo permite o correto estabelecimento das condições de contorno. A direção da velocidade para os pontos da malha sobre a linha de centro do bocal deve ser obrigatoriamente paralela à mesma devido à simetria axial. Já a velocidade do fluido perpendicular à parede, pelo princípio de aderência deve ser nula. Contudo, o escoamento é tratado como invíscido, ou seja, sem efeitos viscosos, portanto a velocidade terá direção paralela à parede. A Fig.7.4 apresenta os locais na malha de imposição das condições de contorno.

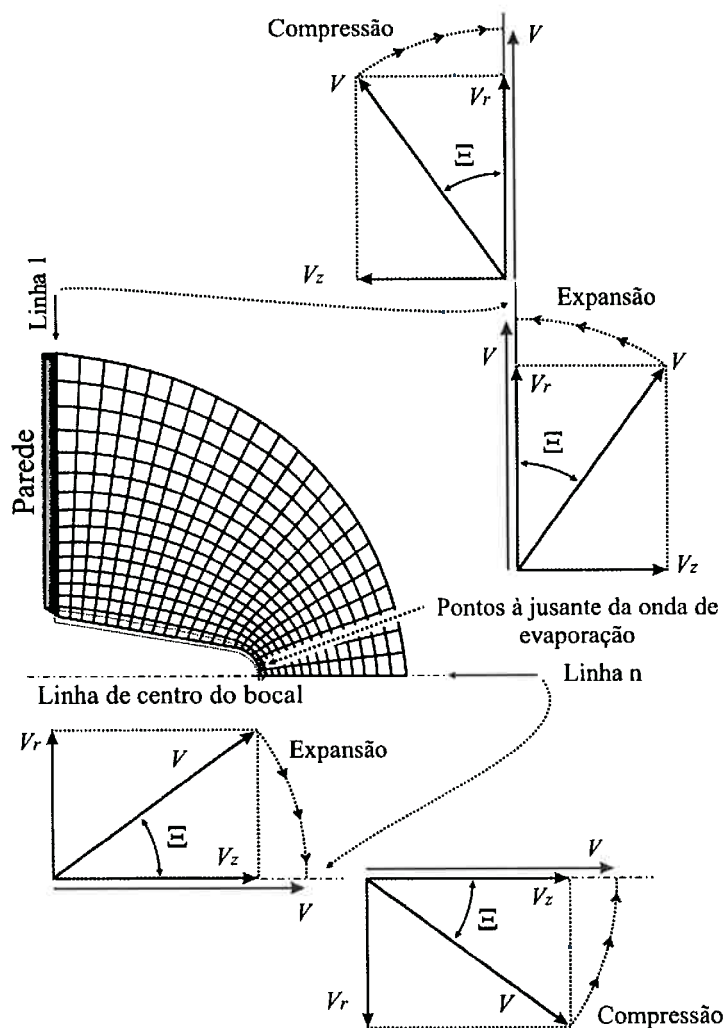


Figura 7.4 Condições de contorno para a expansão da mistura bifásica.

A marcha no espaço obtém para os pontos sobre a linha de simetria axial e sobre a parede, componentes da velocidade que não deveriam existir caso fossem observadas as condições citadas acima. O abandono indiscriminado dessas componentes é possível, contudo desaconselhável (sem uma análise prévia). A Fig.7.4 representa o ângulo Ξ de desvio da velocidade em relação ao especificado nas condições de contorno. A técnica implementada é proposta por Anderson (1995) *apud* Abbet (1973) para escoamentos invíscidos supersônicos e consiste em realizar uma expansão (ou compressão) isoentrópica (de Prandtl-Meyer) através da rotação correspondente ao ângulo Ξ do vetor velocidade (a rotação é indicada na Fig.7.4). Obtendo uma velocidade cuja direção é condizente com as condições de contorno especificadas.

A função de Prandtl-Meyer é dada por Anderson (1990) :

$$\varphi_{PM} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \operatorname{tg}^{-1} \sqrt{\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} (M^2 - 1)} - \operatorname{tg}^{-1} \sqrt{M^2 - 1} \quad (7.104)$$

O ângulo de rotação é obtido pela expressão:

$$\Xi = \operatorname{tg}^{-1} \frac{V_z}{V_r}, \text{ e} \quad (7.105)$$

$$\Xi = \operatorname{tg}^{-1} \frac{V_r}{V_z}, \quad (7.106)$$

respectivamente, para os pontos sobre a parede e sobre a linha de simetria axial. A função de Prandtl-Meyer (φ_{PM}) pode ser calculada através do número de Mach:

$$M_{cal} = \frac{V}{c}. \quad (7.107)$$

O índice *cal* indica que o número de Mach é calculado tendo como base a velocidade obtida pelo método numérico que não é paralela a parede ou a linha de simetria, ou seja, não foi corrigida. O ângulo de rotação total para correção da velocidade é:

$$\varphi_{PM_{real}} = \varphi_{PM_{cal}} + \Xi. \quad (7.108)$$

O número de Mach para a velocidade corrigida M_{real} é encontrado usando novamente a equação (7.104) para a função de Prandtl-Meyer calculada pela equação (7.108), agora empregando o método de Newton-Raphson para solução de equações não lineares. O número de Mach não pode ser obtido diretamente, pois a equação não é linear. A pressão é alcançada via expansão isoentrópica:

$$p_{real} = p_{cal} \left\{ \frac{1 + [(\gamma - 1)/2] M_{cal}^2}{1 + [(\gamma - 1)/2] M_{real}^2} \right\}^{\gamma/(\gamma-1)}, \quad (7.109)$$

onde: γ é a relação entre os calores específicos à pressão constante e a volume constante e o índice *real* indica as propriedades e grandezas corrigidas. As outras propriedades são obtidas dependendo do estado do fluido. Se bifásico ou vapor superaquecido, a verificação é feita admitindo previamente que o estado é bifásico, ou seja, a temperatura é correspondente a temperatura de saturação equivalente pressão calculada pela equação (7.109). O título é encontrado através de uma expansão isoentrópica ($s_{real} = s_{real}$):

$$x_{real} = \frac{s_{cal} - (s_L)_{real}}{(s_v)_{real} - (s_L)_{real}}. \quad (7.110)$$

Se o valor do título for superior a unidade, o fluido durante a expansão, atingiu o estado de vapor superaquecido, assim, as propriedades faltantes, como temperatura, densidade, etc.; são obtidas como função de p_{real} e $s_{real} = s_{cal}$.

As equações (7.104) e (7.109) pressupõe comportamento de gás perfeito e processo isoentrópico. As determinações das propriedades termodinâmicas para todos os cálculos e procedimentos implementados nos métodos numéricos propostos pelo presente trabalho utilizam procedimentos recomendados pela literatura, dispensando a hipótese de comportamento termodinâmico de gás perfeito para o fluido em estudo. A exceção é justamente o uso das duas equações citadas (7.104 e 7.109). Testes revelaram que a ordem de grandeza do ângulo Ξ (exceto para o primeiro passo) não ultrapassa 0,1 grau, ou seja, a correção para a velocidade (e conseqüentemente para as outras propriedades) é muito pequena. A determinação da função de Prandtl-Meyer usando uma equação de estado realista (como a equação de Lee-Kesler) e relações termodinâmicas entre as propriedades não mudaria

significativamente a solução apresentada, contudo, aumentaria muito o tempo de processamento para solução. Mesmo assim, a correção dessas equações sugerida por Anderson (1990) foi implementada. A correção é feita via relação entre os calores específicos representado por γ , que é avaliado utilizando as condições termodinâmicas calculadas antes da correção da velocidade, portanto:

$$\gamma = \gamma_{cat} \cdot \quad (7.111)$$

A atualização deste adimensional tem como objetivo melhorar o modelo e corrigir, ainda que parcialmente as equações (7.104) e (7.109), mesmo que a correção da velocidade para a região do escoamento pós-onda de evaporação seja muito pequena. De fato, esses estudos foram realizados para posterior aplicação do modelo em outras geometrias, cuja demanda pode ser diferente à encontrada no caso do jato evaporativo.

7.9 Estabilidade do método numérico de solução versus densidade de malha

Segundo Anderson (1990), uma análise exata sobre a estabilidade da representação em diferenças finitas das equações não lineares de conservação não existe. Todavia, é possível utilizar um critério de estabilidade simplificado, que garanta a solução numérica apresentada. A rigor, quando um processo de marcha à jusante é empregado, dispositivos internos ao código computacional avaliam o tamanho do passo a ser efetuado pela marcha, ou seja, a distância que o processo de solução pode avançar a partir da linha de dados conhecida, ou calculada no passo anterior. Deste modo, a malha é construída iterativamente durante a solução do problema. Segundo a proposta do presente trabalho, a malha já está pronta antes do início dos cálculos. Ela é obtida previamente em uma etapa de pré-processamento, por um procedimento numérico que obtém sua forma final impossibilitando mudanças durante a solução do escoamento. A proposta é a avaliação inicial do tamanho da malha através das condições pós-onda de evaporação e, um refinamento posterior caso a solução apresente flutuações numéricas ou instabilidades.

A Fig.7.5 exemplifica o critério que é utilizado na determinação inicial da malha para a expansão da mistura bifásica. A dimensão a ser encontrada é o passo, para uma determinada e previamente estabelecida distância (d) entre os pontos. As perturbações no interior de um escoamento propagam-se à velocidade do som, deve-se garantir, que essa informação de variação local possa se propagar mais velozmente na solução que o fluido no escoamento, seguindo é claro, as características apresentadas ns Seção 7.4.3 que destaca as regiões de influência e dependência para o escoamento invíscido supondo que seja supersônico e em regime permanente. Esse critério de estabilidade é conhecido como critério de Courant-Friedrichs-Lewy e pode ser encontrado em diversas referências, entre as quais Anderson (1990).

O ponto (3) da Fig.7.5 emitirá duas linhas características, na literatura são ordinariamente designadas C^+ e C^- . As informações sobre as variações das condições, ou das condições propriamente ditas do ponto (3) propagam-se ao longo dessas duas características. A direção da linha característica relativa à direção da linha de corrente pode ser obtida através do ângulo de Mach:

$$\text{sen}^{-1} \mu = \frac{1}{M}. \quad (7.112)$$

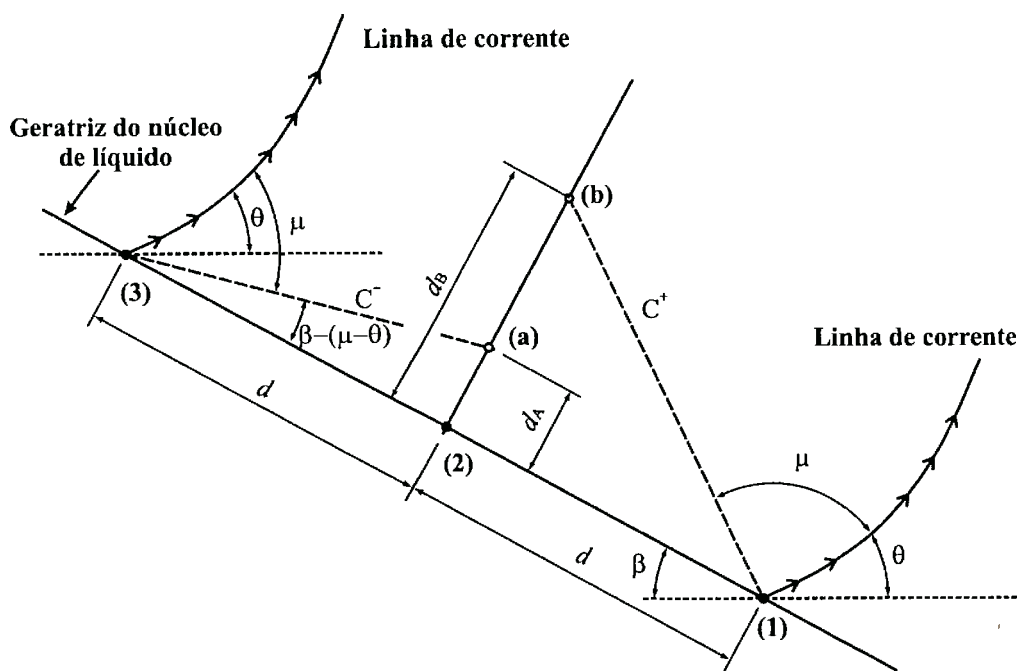


Figura 7.5 Representação das linhas características.

Assegurar a estabilidade do método, significa sustentar o valor do passo, partindo do ponto (2) em um valor menor ou no máximo igual a:

$$\text{passo} \leq d_A = d \cdot \operatorname{tg}(\beta - \mu + \theta). \quad (7.113)$$

A relação acima é facilmente obtida através do uso do triângulo (que pode, em uma aproximação ser considerado retângulo) formado pelos vértices (3), (2) e (a) vistos na Fig.7.5. Manter o passo menor ou igual a este valor garante que a informação emitida pelo ponto (3), carregada pela linha característica C^- será contabilizada adequadamente quando da solução do escoamento. Analogamente, aplicando a condição de estabilidade para influência do ponto (1):

$$\text{passo} \leq d_B = d \cdot \operatorname{tg}(180^\circ - \beta - \mu - \theta). \quad (7.114)$$

O valor do passo efetivo deve satisfazer simultaneamente (7.113) e (7.114). Para todos os pontos da malha que serão calculados pela marcha, essa condição de estabilidade deve ser obedecida. Na prática, o código computacional desenvolvido não realiza essa verificação para todos os passos, apenas para o primeiro. Contudo, o valor adotado para os passos é sempre dez ou quinze vezes menor ao calculado pelas relações apresentadas para o primeiro passo, o que garante que a malha apresentará uma distribuição de pontos que estará dentro das condições de estabilidade para a solução do campo de escoamento.

7.10 Metodologia para determinação da posição da onda de choque

O método numérico é capaz de determinar todas as grandezas e variáveis para o campo de escoamento (pós-onda de evaporação). Entretanto, não encontra a onda de choque. Uma das razões pelas quais a onda de choque não é determinada está relacionada intimamente com a imposição das condições de contorno para o problema. Em outras palavras, as únicas imposições, sob o ponto de vista das condições de contorno, repousam sobre a direção do vetor velocidade para os pontos da malha exatamente sobre a parede ou a linha de axissimetria (ou linha de centro do bocal). A metodologia de resolução, ou seja, a marcha através de passos no espaço

não contém, ou não traz, qualquer informação sobre a condição de pressão do reservatório, como se a mesma fosse nula. Deste modo, a expansão ocorre livremente e o fluido vai diminuindo cada vez mais sua pressão (aumentando sua velocidade, etc.) conforme se afasta do bocal de injeção. Seria a solução de expansão no vácuo absoluto.

No caso real, a pressão no reservatório de injeção nunca, por menor que seja, é nula. O que obriga ao escoamento em alguma posição, atingindo a pressão de reservatório, através é claro de uma onda de choque, pois o mesmo é supersônico. O presente trabalho apresenta uma metodologia auxiliar para determinação da posição da onda de choque. A metodologia consiste em, após determinar todo o escoamento, como se a câmara de injeção estivesse sob condição de pressão muito baixa (vácuo), um algoritmo de busca execute uma verificação das condições de choque para os pontos da malha por varredura na região onde a pressão for menor que a pressão da câmara de injeção. Entre pontos subsequentes da malha são posicionadas ondas de choque oblíquas, ditas aqui locais, como ilustrado na Fig.7.6. Através da resolução das equações de salto descritas no Capítulo 4, respectivamente as equações (5.11), (5.17) e (5.27), comparadas às condições à jusante da onda com as condições do reservatório, caso partilhem uma qualidade específica, a onda de choque foi determinada para essa posição, do contrário a varredura continua. Para cada uma das linhas da Fig.7.6 (linha 1, linha 2, ..., linha n) são encontradas as posições das ondas de choque oblíquas locais, como se fossem pontuais. A solução da onda completa é a linha que une todos os pontos obtidos por esse procedimento, e que deve obrigatoriamente ser tangente a direção das ondas de choque oblíquas locais.

A qualidade específica é a condição de pressão de estagnação à jusante da onda de choque igual a pressão de reservatório. A pressão de estagnação é aquela que o fluido atingiria se fosse levado a velocidade nula por um processo isoentrópico. As velocidades subsônicas pós-onda de choque possibilitam a adoção de uma hipótese simplificadora para pressão de estagnação que a rigor só poderia ser utilizada para escoamentos cujo número de Mach fosse inferior a 0,3 (escoamentos incompressíveis), ou seja:

$$p_{\infty} = p_4 + \frac{\rho_4 V_4^2}{2}. \quad (7.115)$$

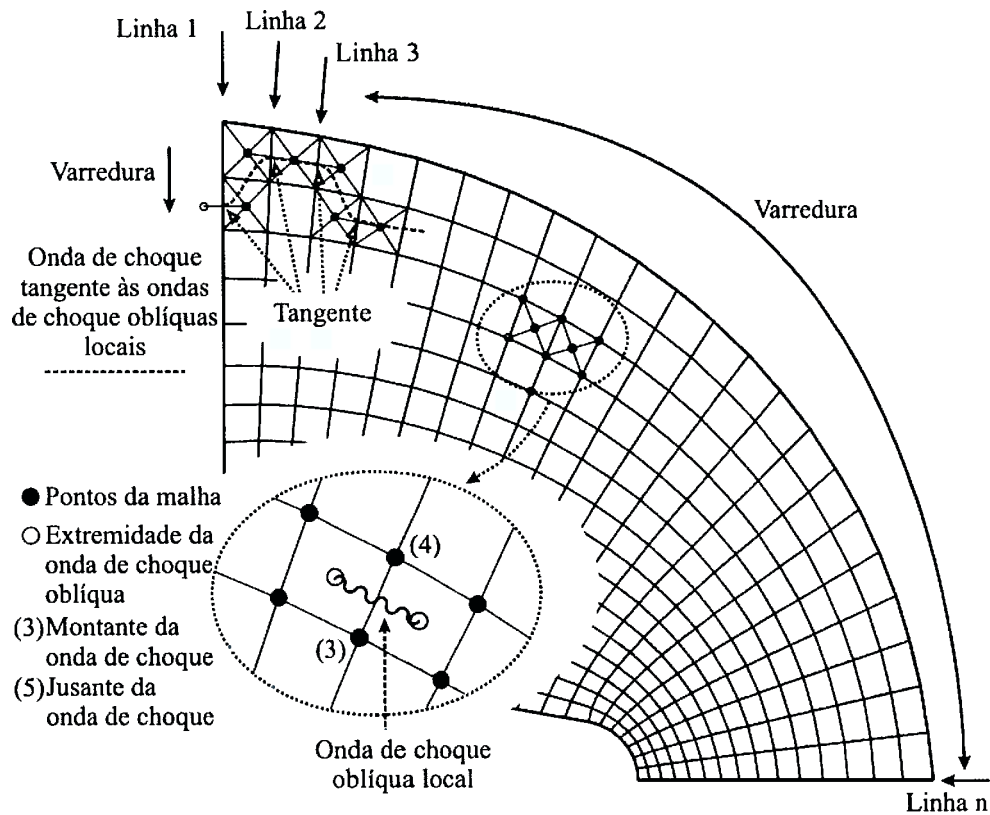


Figura 7.6 Esquema de captura de onda de choque.

A condição expressa pela equação (7.115) é uma aproximação e talvez fonte de erros que influenciará diretamente na determinação exata da posição da onda de choque. As elevadas velocidades que o escoamento atinge durante a expansão, obrigam que a distância entre os pontos da malha sejam relativamente pequenas (por questões de estabilidade do método numérico, conforme já citado), desta forma, devido as condições do escoamento a ilustração da Fig.7.6 é imprecisa no que se trata da distância entre os pontos da malha (mas não imprecisa no formato da malha). Sendo assim, a suavidade da linha tangente às ondas de choque oblíquas locais (que dá origem a onda de choque) é muito maior àquela representada na Fig.7.6, cujo objetivo é apenas ilustrar o método.

8. RESULTADOS

O presente Capítulo apresenta os resultados obtidos pelo modelo para diversos casos simulados. Os resultados das simulações são comparados com os resultados experimentais de Vieira (2004), Athans (1995) e Kurschat et al. (1992).

As soluções foram obtidas em uma estação de trabalho marca COMPAQ ALPHA DIGITAL DS20E (processador 667MHz). O tempo médio de cada simulação para o escoamento da mistura bifásica é de 5 horas para malhas com aproximadamente 27500 pontos, o que perfaz aproximadamente 0,65 segundo para cada ponto da malha. Diversos testes foram realizados pelo autor para estabelecer a densidade de malha ideal para os casos simulados e foi notado que densidades de malha muito inferiores a 27500 (110 pontos sobre a superfície da onda de evaporação e 250 passos no espaço) para as condições dos casos em estudo, levavam a flutuações numéricas e em algumas situações a impossibilidade de solução. Densidades de malha mais elevadas além de aumentar muito o tempo computacional, não obtiveram valores muito diferentes daqueles encontrados nas simulações para a densidade citada (27500 pontos). Em todas as simulações, foi obedecido o critério de estabilidade para a marcha apresentado na Seção 7.9 do Capítulo 7. Um caso exemplo de teste dos resultados para malhas diferentes é descrito no Apêndice V.

Os diâmetros de bocais usados nos experimentos de Vieira, Athans e Kurschat et al. e o tipo de fluido de teste são relacionados na Tabela 8.1 de acordo com a precisão publicada por cada autor. Esses pesquisadores utilizaram bocais de diâmetros menores que um milímetro e vazões mássicas relativamente pequenas (alguns gramas de fluido por segundo em sua maioria) na intenção de manter o regime permanente, ou seja, que a variação da pressão na câmara de baixa pressão (câmara de injeção) durante a injeção do líquido fosse o menor possível.

Os pequenos diâmetros de bocal introduzem uma dificuldade a mais nas simulações, pois levam a raios de arredondamento diminutos no vértice do cone de líquido superaquecido.

Tabela 8.1 Diâmetro do bocal e fluido de testes para as simulações

| Autor | Diâmetro do bocal | Fluido |
|------------------------|-------------------|--------------------------------|
| Vieira (2004) | 0,3085 mm | C ₈ H ₁₈ |
| Athans (1995) | 0,8636 mm | C ₈ H ₁₈ |
| Kurschat et al. (1992) | 0,35 mm | C ₆ F ₁₄ |

As condições de todos os testes, tais como, dados de entrada e medições experimentais, e os resultados das simulações para determinação do estado metaestável e para o estado à jusante da onda de evaporação (solução de Chapman-Jouguet), podem ser encontrados na Tabela 8.2 e na Tabela 8.3. Foram mantidas as denominações de cada um dos autores para os ensaios com os quais são comparados os resultados do modelo computacional. No caso de Vieira (2004), um código de sete dígitos designa os experimentos, os quatro primeiros dígitos referem-se à pressão e temperatura de injeção e os últimos três dígitos à pressão na câmara de injeção. Como foram simulados, em alguns casos, valores diferentes de pressões da câmara de injeção para um determinado par, pressão de injeção e temperatura de injeção, os últimos três dígitos aqui serão sempre indicados como XXX, representando uma série de experimentos realizados por Vieira (2004), em que estão fixas as condições de injeção e foi variada a pressão na câmara de injeção.

8.1 Expansão no vácuo

Um caso será apresentado em detalhes a seguir. Foi escolhido entre os simulados, pois contém as principais características do escoamento à jusante da onda de evaporação. Evidentemente, para um escoamento de um jato no vácuo não há presença de onda de choque. A marcha à jusante foi interrompida quando a pressão tornou-se muito baixa (da ordem de um pascal), ainda assumindo válida a hipótese do contínuo.

Na Fig.8.1a, b, Fig.8.2a, b e Fig.8.3a são representados os campos de pressão, temperatura, título, componente axial da velocidade (paralela ao eixo z) e componente radial da velocidade (paralela ao eixo r) para o escoamento denominado 2329XXX (detalhes sobre as condições do escoamento veja Tabela 8.2). Também foram representados alguns vetores velocidades para pontos selecionados na malha na Fig.8.3b e linhas de corrente na Fig.8.4a.

Tabela 8.2 Dados de entrada e solução de Chapman-Jouguet para ensaios de Vieira (2004) para C_8H_{18}

| Série | Dados de Entrada | | | | Estado Metaestável | | | | Solução de Chapman-Jouguet | | | | | | Denominação | Raio corrigido | |
|-------|------------------|------------|-----------------|----------|--------------------|-------------|--------------|-----------------|----------------------------|-------------|------------|-----------|--------------|-------------|-------------|----------------|------------------|
| | P_0 (kPa) | T_0 (°C) | \dot{m} (g/s) | L (mm) | C_D | P_1 (kPa) | v_1 (m/kg) | β (graus) | θ (graus) | P_2 (kPa) | T_2 (°C) | x_2 (%) | v_2 (m/kg) | W_2 (m/s) | | | Código do ensaio |
| 56 | 122,1 | 56,4 | 0,8447 | 6,9 | 0,9124 | 6,175 | 0,00151 | 0,2 | 76,36 | 3,412 | 11,847 | 28,467 | 1,8466 | 71,458 | 1329XXX | 126/127* | 0,485 |
| 125 | 122,7 | 75,2 | 0,834 | 5,2 | 0,9165 | 7,743 | 0,00155 | 0,21 | 78,5 | 4,1559 | 15,274 | 38,898 | 2,0949 | 86,728 | 1349XXX | 130* | 0,4491 |
| 95 | 123,5 | 94,8 | 0,8023 | 3,1 | 0,9195 | 14,713 | 0,0016 | 0,38 | 80,05 | 7,3981 | 27,479 | 45,039 | 1,4134 | 101,74 | 1368XXX | 121*/122 | 0,5182 |
| 56 | 250,2 | 56,5 | 1,217 | 7,2 | 0,9216 | 14,388 | 0,00151 | 0,39 | 62,4 | 9,1018 | 31,806 | 16,473 | 0,4316 | 47,854 | 2329XXX | 63*/64/65 | 0,2609 |
| 250 | 251,5 | 76,7 | 1,218 | 6 | 0,94 | 17,879 | 0,00155 | 0,38 | 69,71 | 10,402 | 34,533 | 28,5 | 0,6523 | 69,925 | 2349XXX | 16* | 0,2680 |
| 95 | 251,3 | 95,5 | 1,071 | 4,7 | 0,926 | 59,673 | 0,0016 | 1,57 | 63,25 | 40,774 | 70 | 19,012 | 0,1241 | 48,755 | 2368XXX | 2/4/41* | 0,15662 |
| 56 | 501,6 | 56,6 | 1,746 | 11 | 0,9288 | 23,23 | 0,00151 | 0,62 | 24,88 | 19,076 | 49,348 | 5,081 | 0,0667 | 16,846 | 5329XXX | 78*/79/80 | 0,159388 |
| 500 | 496,3 | 76,7 | 1,695 | 7,5 | 0,9319 | 35,694 | 0,00155 | 0,67 | 58,85 | 20,003 | 50,417 | 18,271 | 0,2272 | 59,921 | 5349XXX | 75/76*/77 | 0,179145 |
| 95 | 503,4 | 95,4 | 1,635 | 6,3 | 0,9339 | 64,97 | 0,0016 | 1,17 | 53,8 | 42,952 | 71,437 | 17,88 | 0,1114 | 49,889 | 5368XXX | 72*/73/74 | 0,18805 |
| 56 | 751,1 | 56,4 | 2,1605 | 14,1 | 0,933 | 25,834 | 0,00151 | 0,666 | 20,297 | 20,38 | 50,747 | 3,962 | 0,0498 | 16,73 | 7329XXX | 115*/116/117 | 0,17 |
| 750 | 752,5 | 77 | 2,091 | 10,2 | 0,926 | 42,674 | 0,00156 | 0,64 | 31,95 | 34,135 | 62,322 | 10,699 | 0,089 | 27,815 | 7349XXX | 110/111*/112 | 0,1611 |
| 95 | 752,3 | 96,4 | 2,029 | 7,3 | 0,9374 | 80,973 | 0,0016 | 1,35 | 36,43 | 60,126 | 81,696 | 11,332 | 0,0527 | 33,681 | 7368XXX | 103/105*/108 | 0,1544 |

Tabela 8.3 Dados de entrada e solução de Chapman-Jouguet para ensaios de Athans (1995) para C_8H_{18} e Kurschat et al. (1992) para C_6F_{14} .

| Série | Dados de Entrada | | | | Estado Metaestável | | | | Solução de Chapman-Jouguet | | | | Raio corrigido | | O.C. Medida | | O.C. Modelo | | O.C. *** | | | | |
|--------|------------------|-------------|------------|-----------------|--------------------|------------------|--------------------|-------------|----------------------------|-----------------|------------------|-------------|----------------|-----------|--------------|-------------|-------------------|--------------------|----------|------------|------------|------------|---------------|
| | T_0 (°C) | p_0 (kPa) | T_0 (°C) | \dot{m} (g/s) | L (mm) | p_∞ (kPa) | C_D | p_1 (kPa) | v_1 (m³/kg) | β (graus) | θ (graus) | p_2 (kPa) | T_2 (°C) | x_2 (%) | v_2 (m/kg) | W_2 (m/s) | R'_b (mm) | r_1 (mm) | | r_2 (mm) | r_1 (mm) | r_2 (mm) | r_{SM} (mm) |
| | 2397 | 204 | 204 | 21,4 | 9 ^① | 5,73 | 0,830 ^② | 450,5 | 0,002 | 2,53 | 55,91 | 136,81 | 67,143 | 0,0741 | 119,49 | 0,433 | 12,5 ^③ | 15 ^④ | 8,9 | 10 | 20,4 | A6 | |
| 2400* | 200 | 2338 | 200 | 21,5 | 9 ^① | 8,25 | 0,838 ^② | 435,9 | 0,002 | 2,5 | 55,23 | 135,67 | 63,745 | 0,0721 | 115,25 | 0,434 | 7 ^③ | 11 ^④ | 6,7 | 9,8 | 16,1 | A7 | |
| | 2293 | 200 | 200 | 21,4 | 9 ^① | 9,87 | 0,843 ^② | 430,8 | 0,002 | 2,47 | 55,9 | 134,58 | 64,488 | 0,0746 | 117,6 | 0,435 | 6,5 ^③ | 12 ^④ | 6,3 | 9,8 | 14 | A8 | |
| 1500** | 20 | 1500 | 20 | 6,85 | 12 ^① | 1 | 0,95 ^① | 10,9 | 0,0005 | 0,133 | 34,07 | 6,687 | -3,8 | 15,854 | 0,1555 | 25,656 | 0,5425 | 15,75 ^④ | nd | 16,4 | 15,7 | - | K1 |

① Estimado pelo autor usando Miller (1985) e Poling et. al (2000)

② Estimado por Simões-Moreira (1999)

③ Medido diretamente sobre as fotografias por Simões-Moreira (1999) - precisão não mencionada

④ Precisão de $\pm 0,7$ mm

* Ensaios realizados por Athans (1995) em 24 e 25/10/94 com C_8H_{18}

** Ensaio realizado por Kurschat (1992) com C_6F_{14}

*** Resultado do modelo unidimensional de Simões-Moreira (1999)

nd Não informado por Kurschat (1992)

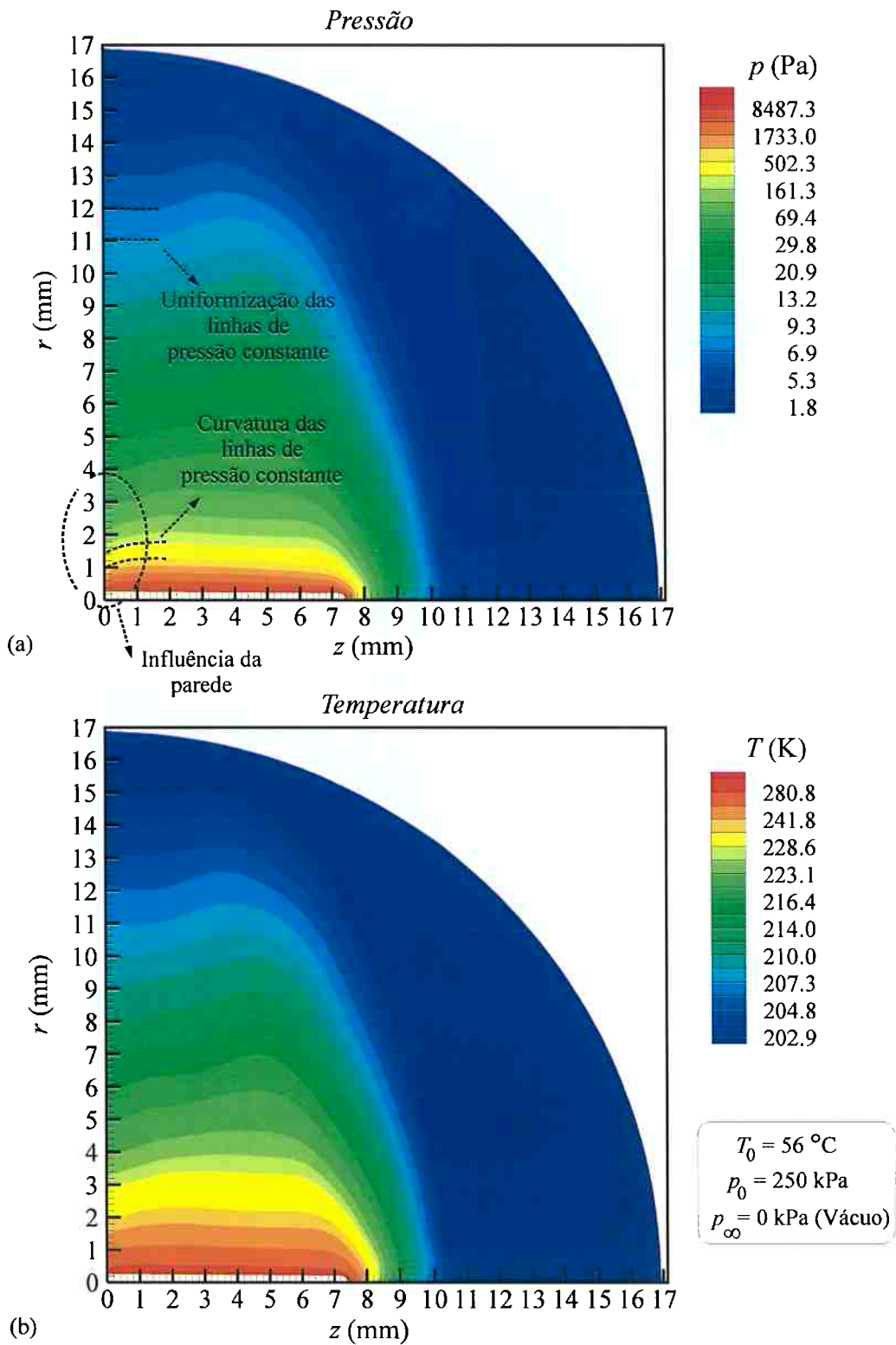


Figura 8.1 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 2329XXX (expansão no vácuo). (a) Distribuição de pressão; (b) Distribuição de temperatura.

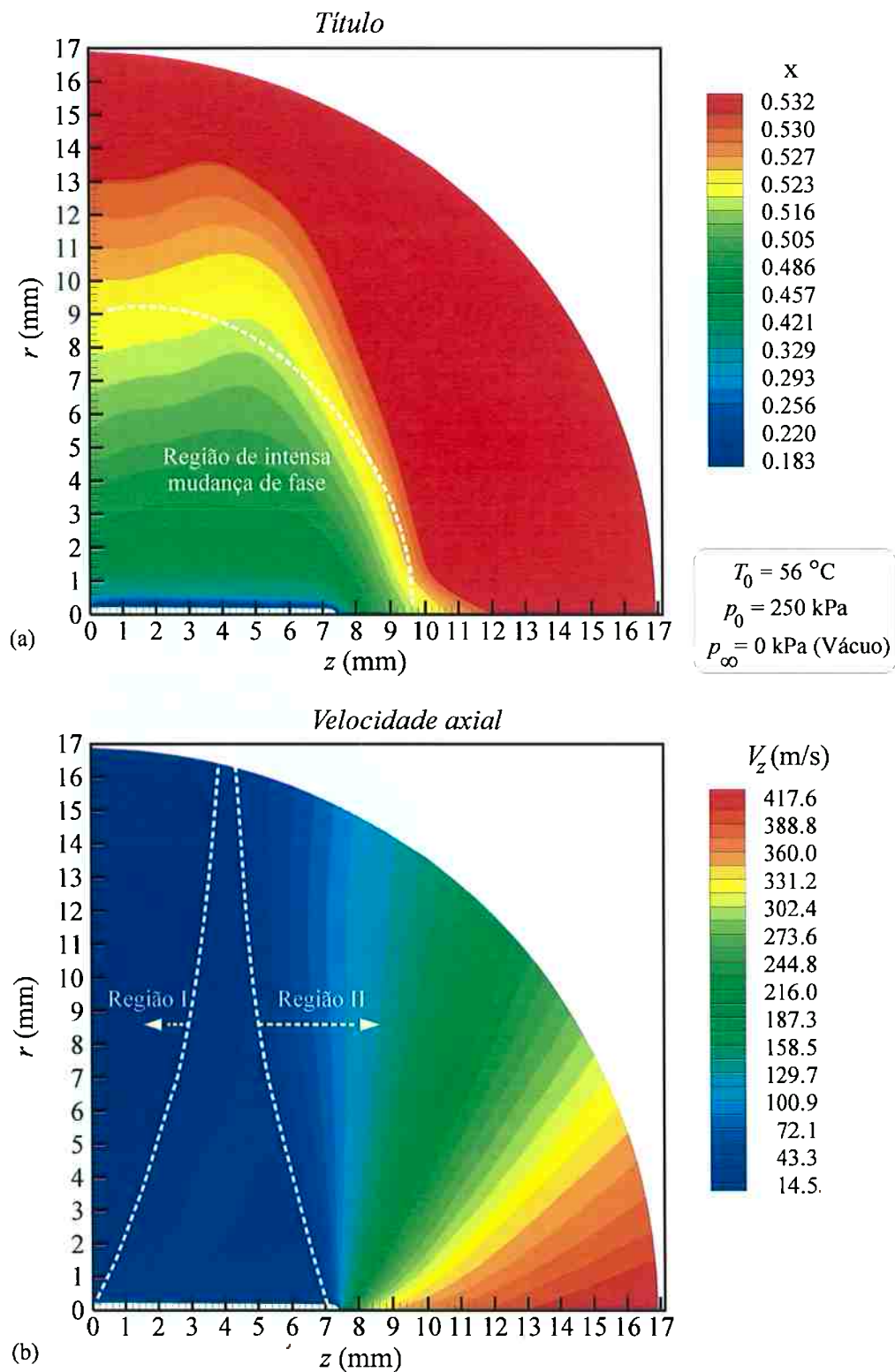


Figura 8.2 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 2329XXX (expansão no vácuo). (a) Distribuição de título; (b) Distribuição de velocidade axial (Região I influência da parede, Região II - grande aumento da velocidade axial).

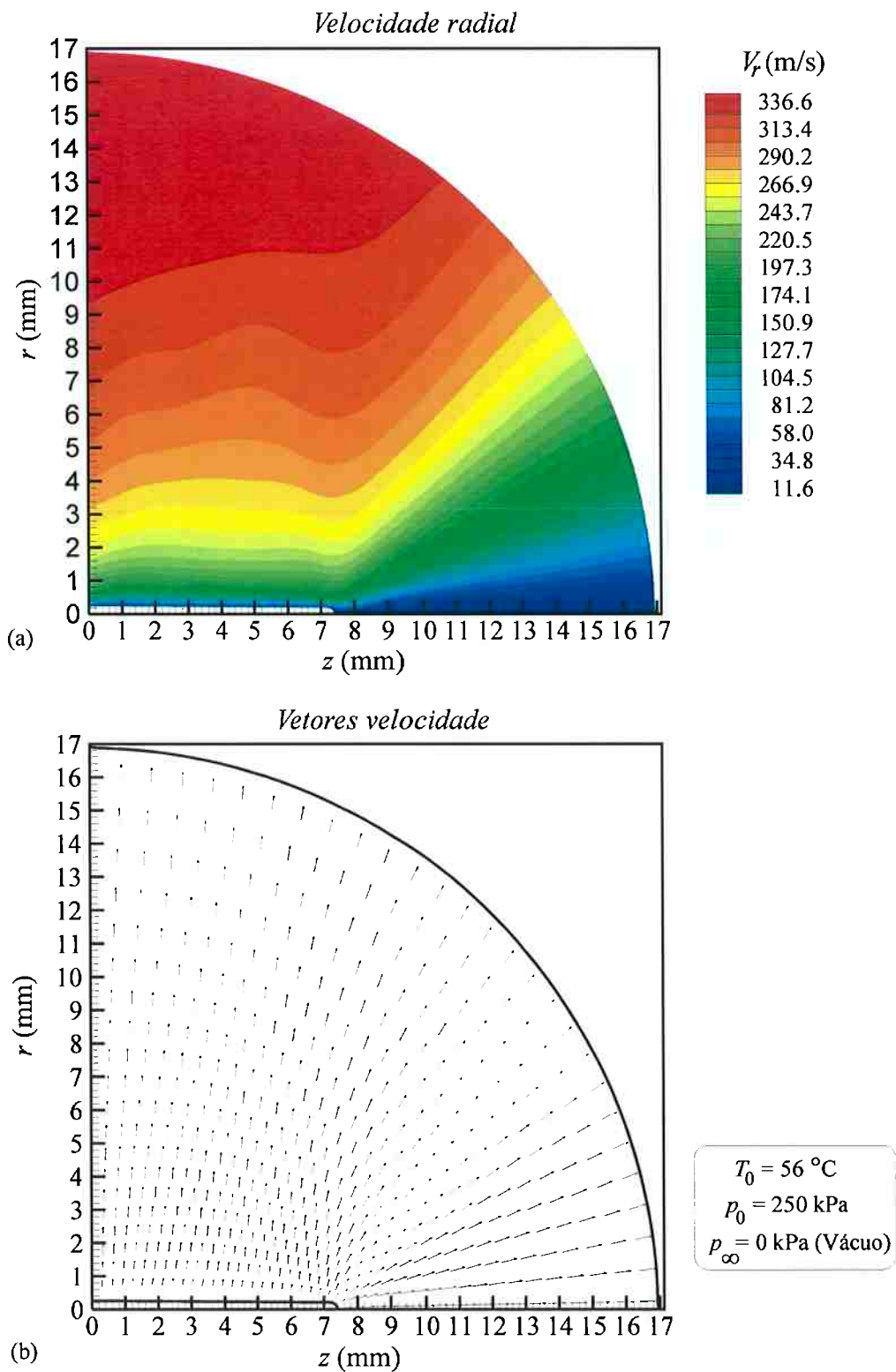


Figura 8.3 Resultados do modelo bidimensional axissim\u00e9trico para regi\u00e3o de expans\u00e3o p\u00f3s-onda de evapora\u00e7\u00e3o para o caso 2329XXX (expans\u00e3o no v\u00e1cuo). (a) Distribui\u00e7\u00e3o de velocidade radial; (b) Vetores velocidade.

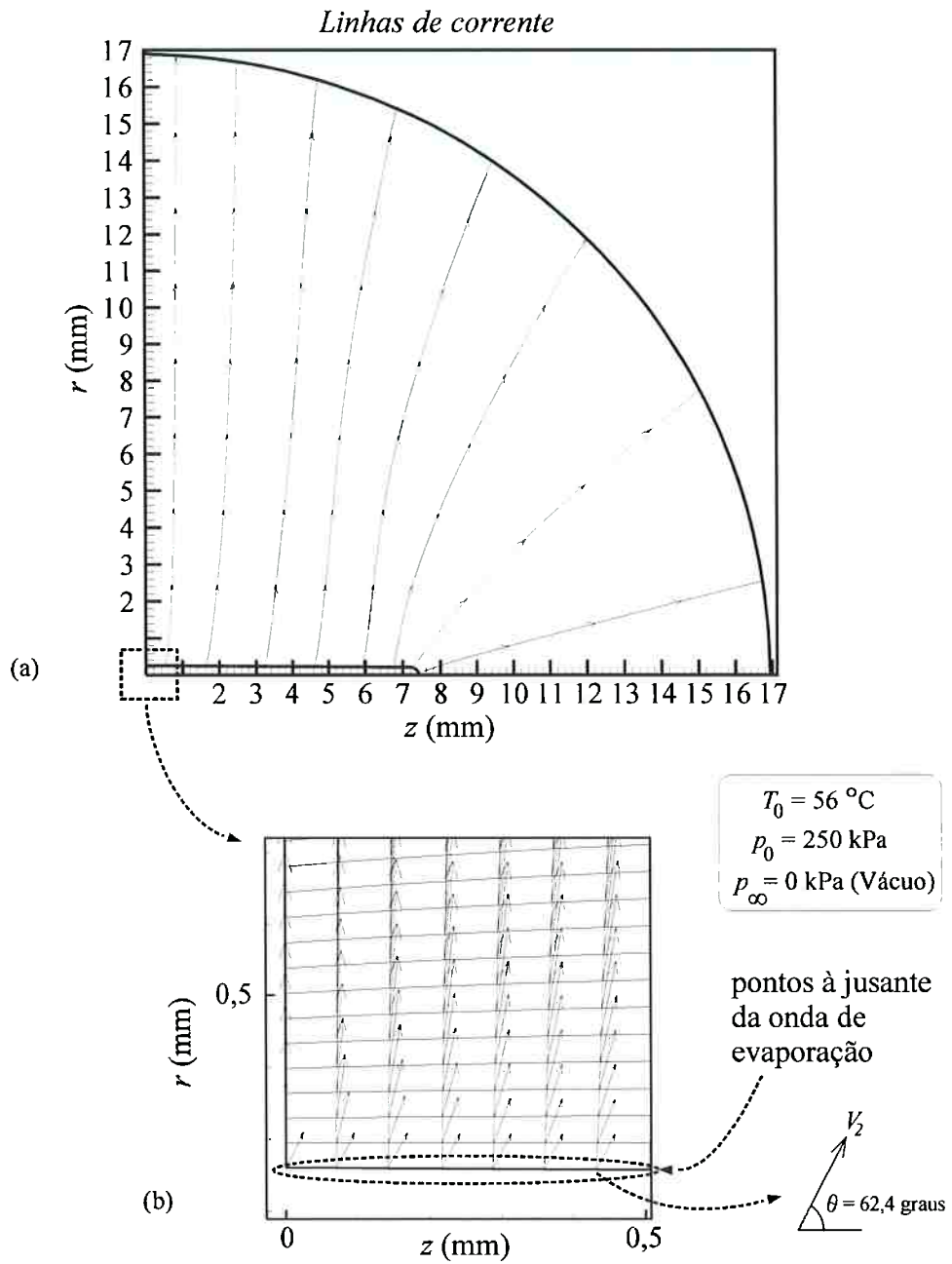


Figura 8.4 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 2329XXX (expansão no vácuo). (a) Linhas de corrente; (b) Detalhe dos vetores velocidade nas proximidades do bocal de injeção.

A análise dos mapas de cores leva a conclusões interessantes sobre o comportamento dos jatos evaporativos altamente superaquecidos. Em vários testes podem ser observados ângulos de giro relativamente elevados, no caso exemplo (2329XXX), o ângulo de giro é de $62,4^\circ$, ou seja, desvia-se da sua direção de injeção de $62,4^\circ$. A condição sônica após a onda de evaporação é o ponto de partida da solução do tipo marcha à jusante implementada.

Nas proximidades do núcleo de líquido há grande evaporação, evidenciada na região indicada na Fig.8.2a pelo aumento significativo do título em poucos milímetros, como consequência da grande diminuição de pressão resultante do processo de expansão. A expansão é mais acentuada para os pontos da malha especialmente próximos à extremidade do núcleo de líquido e para os pontos da malha próximos ao bocal de injeção. Nos pontos próximos ao bocal de injeção o giro do vetor velocidade para ajuste das condições de contorno na parede reforça a expansão. Isso pode ser verificado na curvatura das linhas de pressão constante no mapa de cores da Fig.8.1a. A influência da condição de contorno na parede também é observada na gradativa diminuição da velocidade axial para os pontos circunvizinhos à parede (veja Região I da Fig.8.2b).

A curvatura das linhas de pressão constante (e também das outras propriedades como o título, a temperatura, etc.) vai sendo suavizada à medida que o escoamento se afasta radialmente do núcleo de líquido (veja indicações na Fig.8.1a) atingindo uma uniformização das velocidades radiais para os pontos próximos à parede numa expansão quase radial. Para os pontos próximos à extremidade do núcleo de líquido a expansão acentua-se pela grande área disponível, inclusive livre na direção axial (veja aumento da velocidade axial na Região II da Fig.8.2b). Os pontos da malha nas vizinhanças da linha de simetria axial possuem velocidade radial muito baixa e os pontos exatamente sobre a linha axial possuem velocidade radial nula (por imposição da condição de contorno – Veja Fig.8.3a). Em alguns casos o ângulo de giro é menor que o do exemplo, e a queda de pressão nas proximidades do bocal de injeção bastante acentuada, curvando muito as linhas de pressão constante para os pontos próximos à parede. A Fig.8.5 ilustra um caso onde o ângulo de giro através da onda de evaporação é de $24,9^\circ$ (caso 5329XXX) e a curvatura das linhas de pressão é mais acentuada que no exemplo 2329XXX.

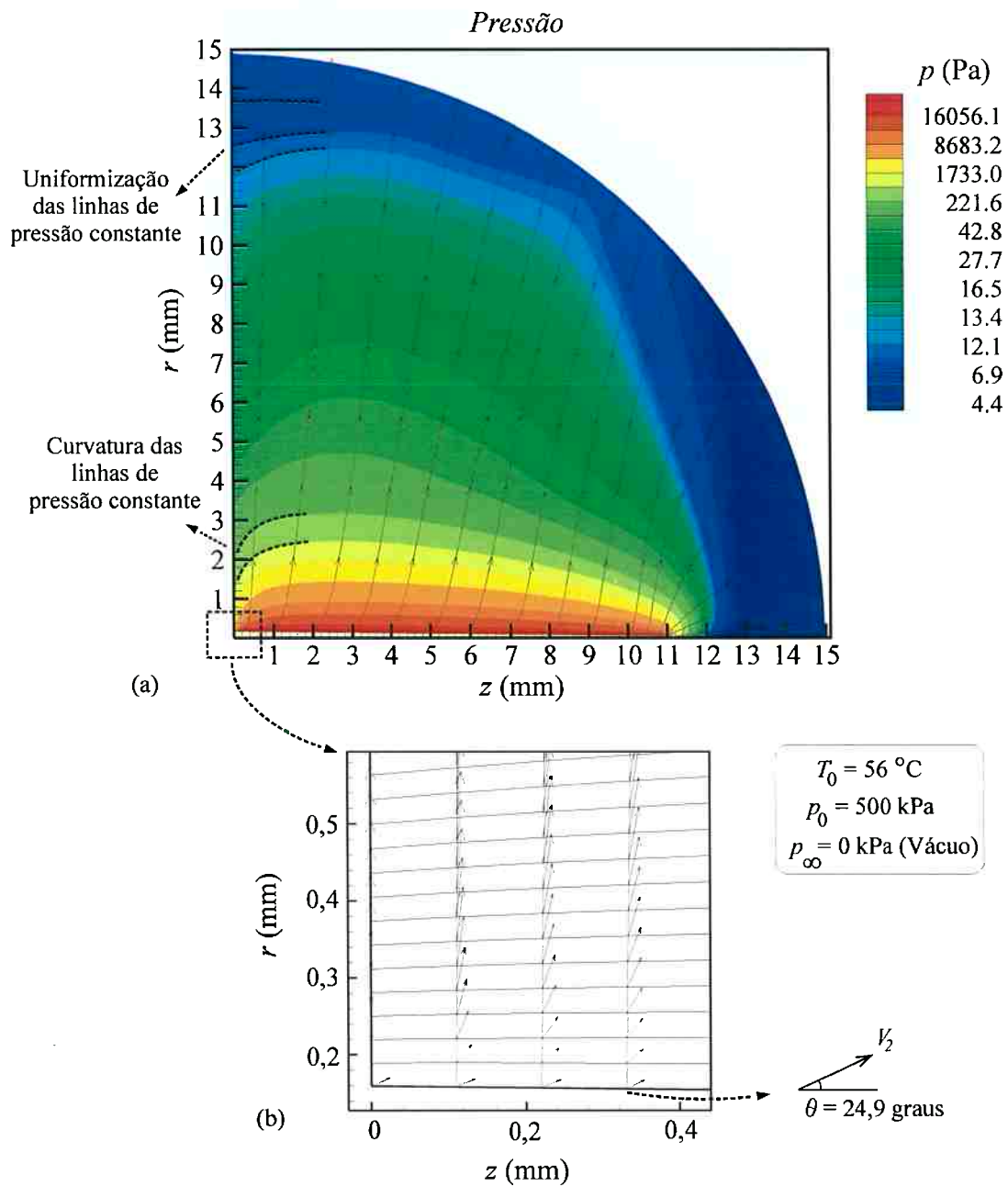


Figura 8.5 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso 5329XXX (expansão no vácuo). (a) Distribuição de pressão e linhas de corrente; (b) Detalhe dos vetores velocidade nas proximidades do bocal de injeção.

Também no caso 5329XXX, é possível notar a gradual uniformização das linhas de pressão constante para os pontos próximos à parede a medida que o escoamento se afasta radialmente, contudo, ocorre a uma distância maior do bocal de injeção (comparativamente ao exemplo 2329XXX). Mostra-se um caso experimental de Athans na Fig.8.6.

O comportamento termodinâmico de Substância de Complexidade Molecular Elevada (SCME), ou seja, a possibilidade de mudança de fase completa durante a expansão pode ser observada em um caso experimental de Athans (1995) cujas condições estão na Tabela 8.3 (caso A6). Neste caso, a temperatura de injeção e a pressão de injeção são muito maiores que as testadas por Vieira (2004) para o iso-octano e a simulação numérica obteve mudança completa de fase poucos milímetros após a passagem do fluido pela onda de evaporação. A linha indicada na Fig.8.6b (título, $x = 1$) corresponde a posição onde há apenas vapor saturado seco, a partir dessa localização, o escoamento torna-se de vapor superaquecido.

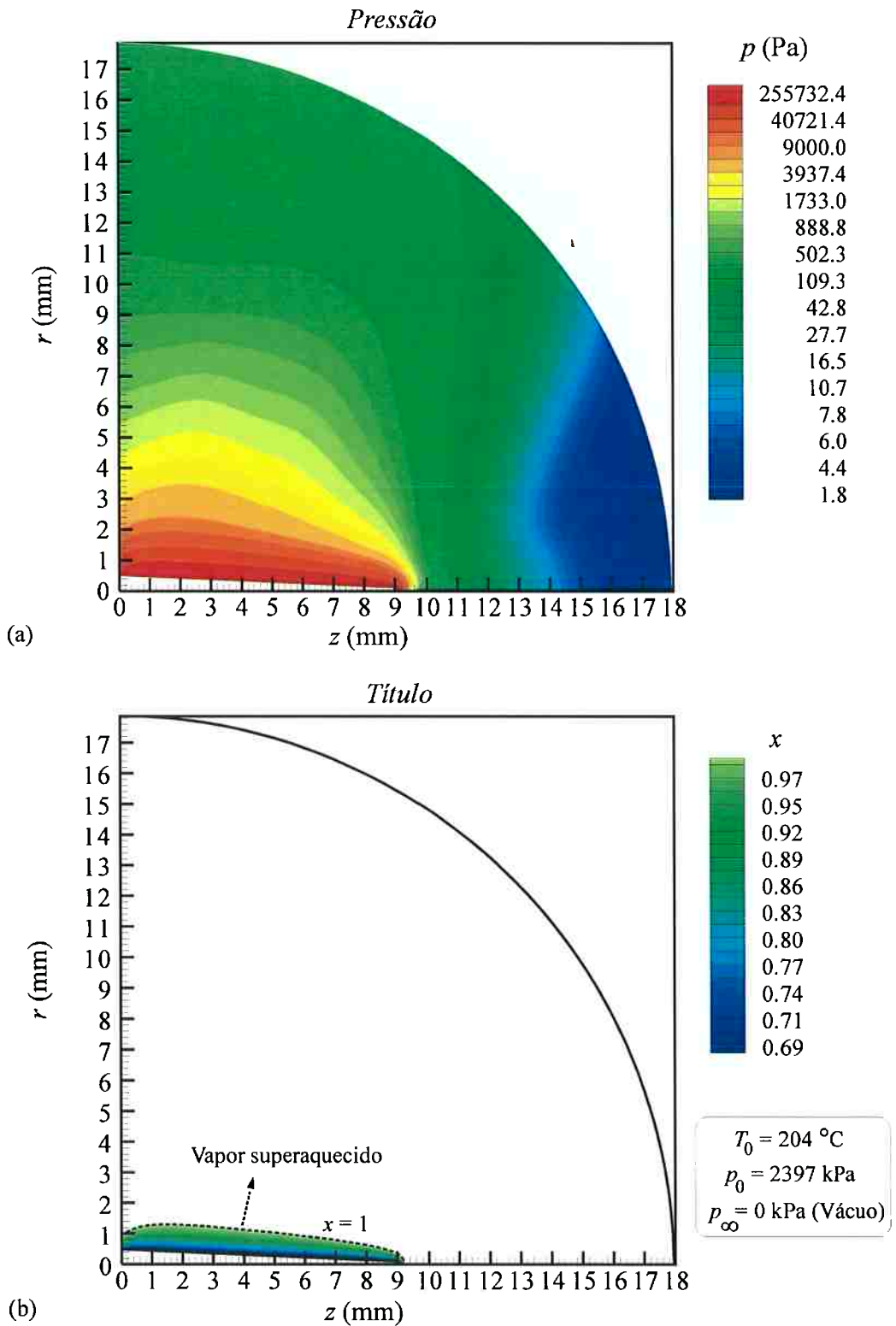


Figura 8.6 Resultados do modelo bidimensional axissimétrico para região de expansão pós-onda de evaporação para o caso A6 (de Athans, 1995) no vácuo. (a) Distribuição de pressão; (b) Distribuição de título - até mudança completa de fase.

8.2 Influência da variação da pressão na câmara de injeção na posição da onda de choque.

Para o padrão de jato estudado, a pressão na câmara de injeção não afeta o tamanho do núcleo de líquido, pois, como já discutido anteriormente, o escoamento está bloqueado (velocidade normal sônica à jusante da onda de evaporação) impossibilitando que a informação de variação de pressão na câmara de injeção possa influenciar as condições à montante da onda de evaporação. Novamente foi utilizado o caso exemplo 2329XXX, porém com uma pressão na câmara de injeção igual a 90 Pa. Na Fig.8.7 são apresentados os resultados, a posição e formato da onda de choque. Após a onda de choque os mapas de cores não são válidos, pois a solução não se estende além dela (é mantida a cor apenas como fundo para destacar e evidenciar a onda de choque), haja vista que o escoamento adquire velocidade baixa e não há gradientes significativos para as propriedades. Vieira fotografou e visualizou a onda de choque e o núcleo de líquido pelo método “Schlieren” e posterior tratamento matemático da fotografia. Na Fig.8.7a a fotografia revela o núcleo de líquido metaestável e a onda de choque. O formato e dimensões podem ser comparados com os resultados apresentados pelo modelo. As dimensões máximas da onda de choque obtidas pelo modelo e pelos experimentos foram praticamente as mesmas.

Segundo Vieira para este caso, $r_1 = 13,0$ mm e $r_2 = 10,6$ mm, os resultados do modelo são $r_1 = 13,07$ mm e $r_2 = 10,38$ mm. Quanto ao formato da onda de choque é possível notar que para esse caso, o modelo não é capaz de prever a exata geometria da onda de choque próximo à parede.

Os mapas de cores são bastante úteis para fornecer uma visão geral das variações das grandezas e propriedades, mas, no intuito de apresentar melhor esses dados, na Fig.8.7b são selecionadas duas linhas de corrente (LC1 e LC2) cujos valores das propriedades pressão, temperatura e título e da grandeza número de Mach são representados na Fig.8.8a e na Fig.8.8b. Os gráficos quantificam os elevados gradientes das propriedades nas proximidades do núcleo de líquido.

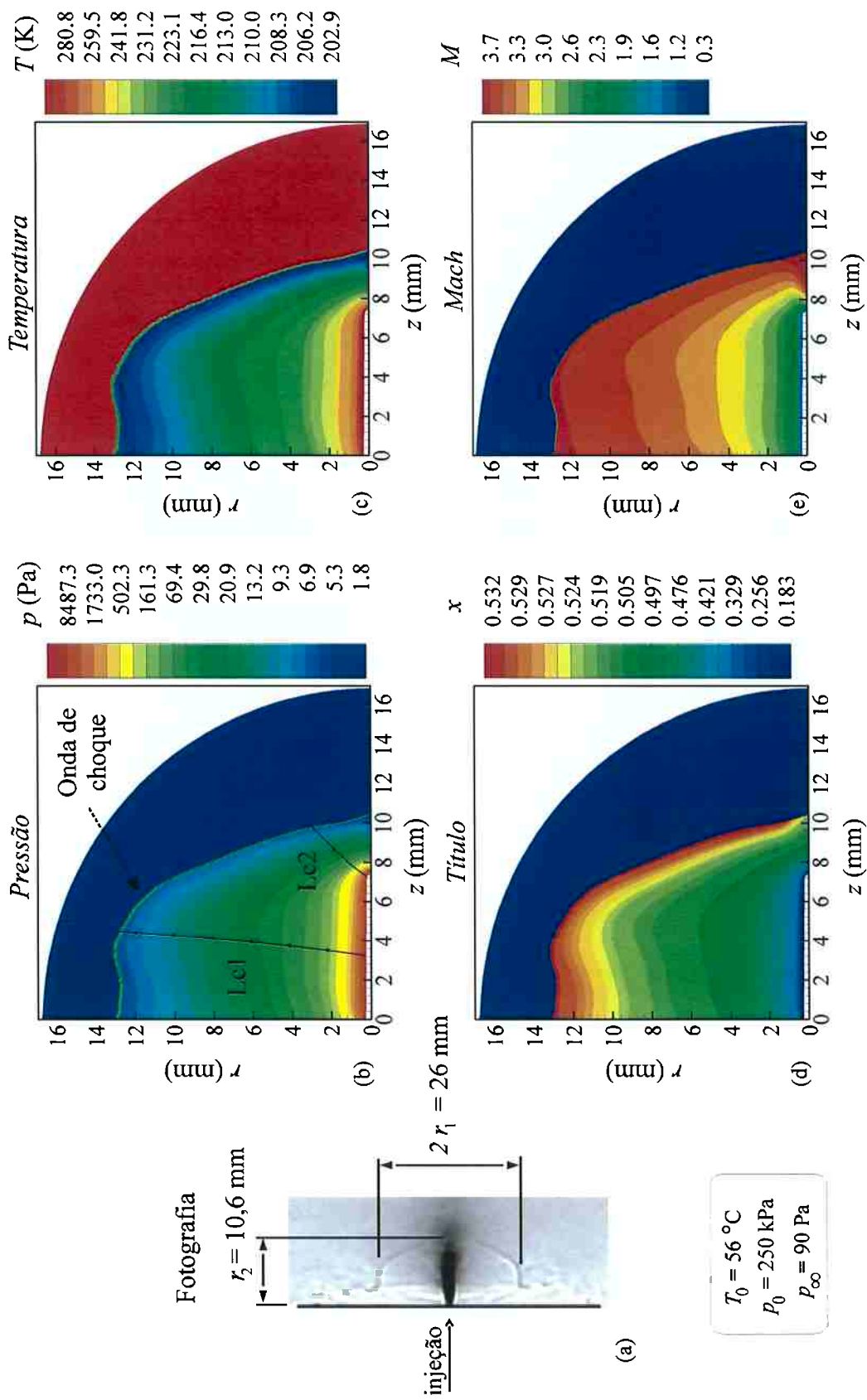


Figura 8.7 Localização da onda de choque para o caso 2329XXX com pressão na câmara de injeção de 90 Pa. (a) Fotografia (Vieira, 2004); (b) Pressão; (c) Temperatura; (d) Título e (e) Número de Mach. (Até a onda de choque).

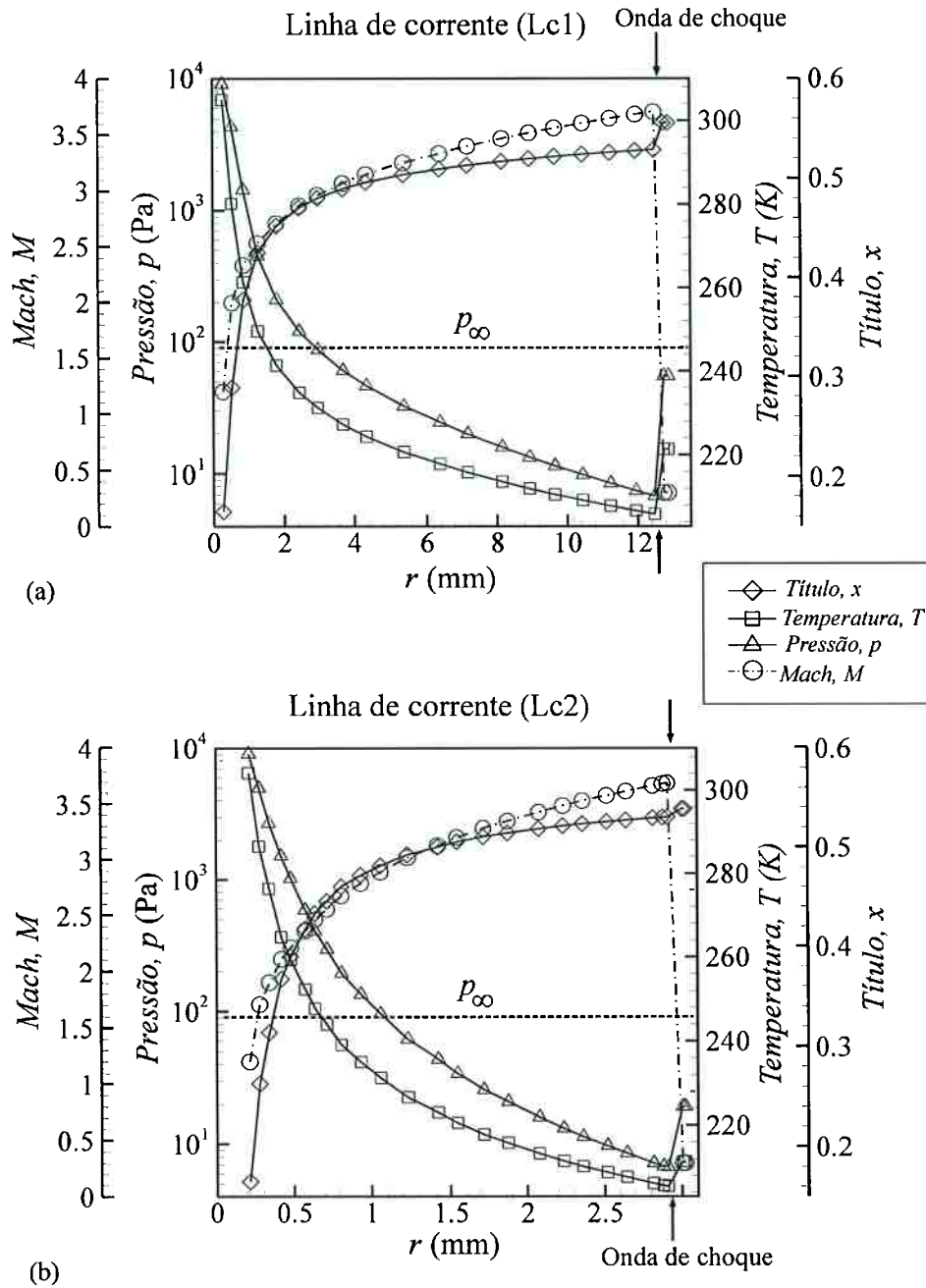


Figura 8.8 Distribuição das propriedades e grandezas para duas linhas de corrente (caso 2329XXX para pressão da câmara de injeção de $p_{\infty} = 90$ Pa). Linhas de corrente: (a) Lc1 e (b) Lc2 indicadas na Fig.8.7b.

Para a linha de corrente LC1, por exemplo, a pressão cai a valores menores que a pressão na câmara de injeção a apenas três milímetros de distância da linha de centro do bocal, ou seja, à jusante da onda de evaporação a pressão que era de 9,1 kPa cai para 90 Pa em poucos milímetros. Queda acompanhada da temperatura e de grande evaporação (aumento do título) e intensa aceleração (aumento do número de Mach). Após um processo de expansão tão intenso a onda de choque ocorre para ajustar as pressões e levar o fluido às condições do reservatório de baixa pressão. Com os valores de pressão, temperatura e título é possível estimar a entropia específica para todos os pontos representados na Fig.8.8. Exceto o ponto à jusante da onda de choque (478,7 kJ/kg K) todos os outros (à jusante da onda de evaporação e à montante da onda de choque) têm o mesmo valor da entropia específica (394 kJ/kg K com desvio máximo de 0,25% - causado provavelmente por imprecisão de origem numérica) revelando um comportamento de escoamento isoentrópico ou muito próximo do escoamento isoentrópico durante a expansão.

A Fig.8.9 compara o resultado do modelo para outro caso experimental de Vieira (5329XXX), neste a pressão na câmara de injeção é maior que no caso apresentado anteriormente (2329XXX com pressão na câmara de injeção de 90 Pa) e vale 500 Pa. No caso em questão, além de conseguir obter com precisão as dimensões máximas da onda de choque (nas fotos de Vieira $r_1 = 5,4$ mm e $r_2 = 12,3$ mm, os resultados do modelo são $r_1 = 5,48$ mm e $r_2 = 12,18$ mm) o modelo conseguiu também capturar muito bem a geometria da onda de choque (inclusive próximo do bocal de injeção).

Diversos testes com outras condições experimentais indicam que o modelo matemático obtém melhores resultados para pressões mais elevadas da câmara de injeção.

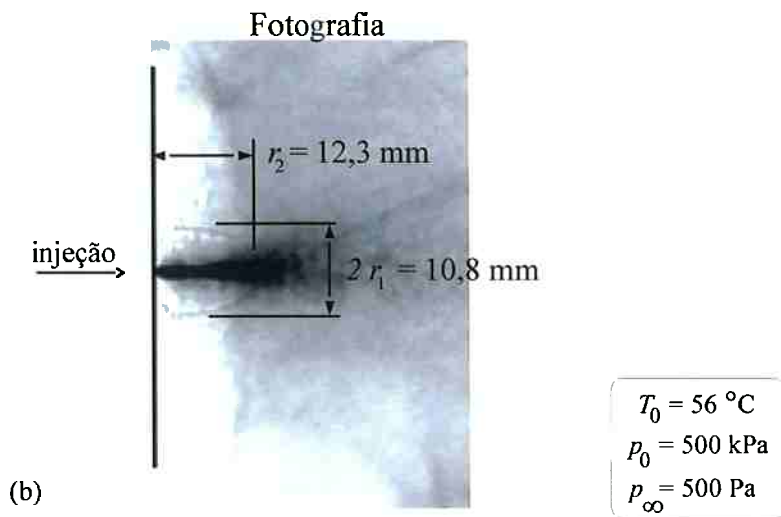
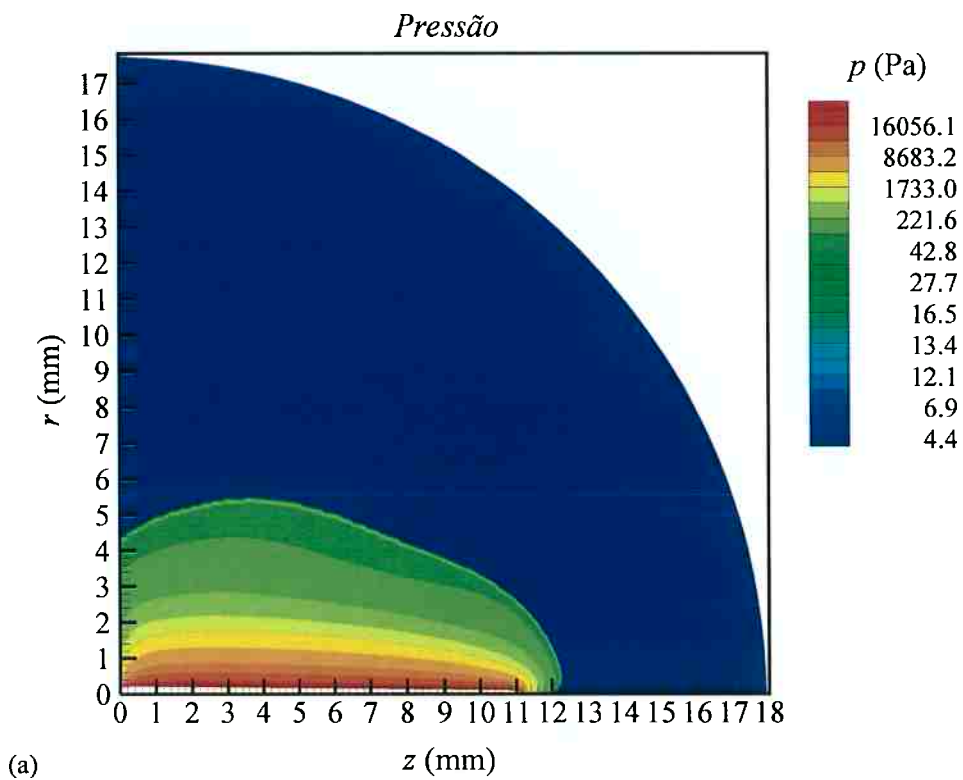


Figura 8.9 Localização da onda de choque para o caso 5329XXX com pressão na câmara de injeção de 500 Pa. (a) Distribuição de pressão; (b) Fotografia de Vieira (2004).

A Fig.8.10a e a Fig.8.10b comparam os resultados do modelo aos resultados experimentais de Vieira para as dimensões máximas da onda de choque para as condições de injeção do caso 2329XXX e diversas pressões na câmara de injeção. Fixas as condições de injeção, ao diminuir a pressão na câmara de baixa pressão a onda de choque também tem suas dimensões aumentadas. O modelo parece prever com mais precisão, quando comparado aos experimentos de Vieira, a dimensão máxima da onda de choque na direção radial (r_1) do que na axial (r_2).

A dimensão máxima da onda de choque na direção axial também é menos sensível à variação da pressão que a dimensão máxima da onda de choque na direção radial. No exemplo, para uma variação de pressão na câmara de injeção de 510 Pa (de 70 Pa até 580 Pa) a variação da dimensão máxima na direção axial encontrada pelo modelo foi de 2,45 mm (de 10,9 a 8,45 mm), em contrapartida a variação da dimensão máxima na direção radial para a mesma variação da pressão da câmara de injeção foi de 11,5 mm (de 15,4 a 3,9 mm).

As linhas na Fig.8.10c mostram as posições da onda de choque quando variada a pressão na câmara de injeção.

Três casos experimentais de Athans (1995) e um de Kurschat (1992) foram simulados e os resultados das simulações (inclusive das dimensões máximas da onda de choque) podem ser vistos na Tabela 8.3. Os resultados mostram que o modelo bidimensional consegue prever bem as dimensões máximas da onda choque e no caso específico da simulação para as condições experimentais de Kurschat, está dentro das tolerâncias de medição da onda de choque informadas pelo pesquisador (medida $r_1 = 15,75 \text{ mm} \pm 0,7 \text{ mm}$ e r_2 não mencionada - determinada pelo modelo bidimensional axissimétrico $r_1 = 16,43 \text{ mm}$ e $r_2 = 15,7 \text{ mm}$). Nos casos de Athans as medições foram realizadas sobre as fotografias por Simões-Moreira (1999) e a precisão não foi informada.

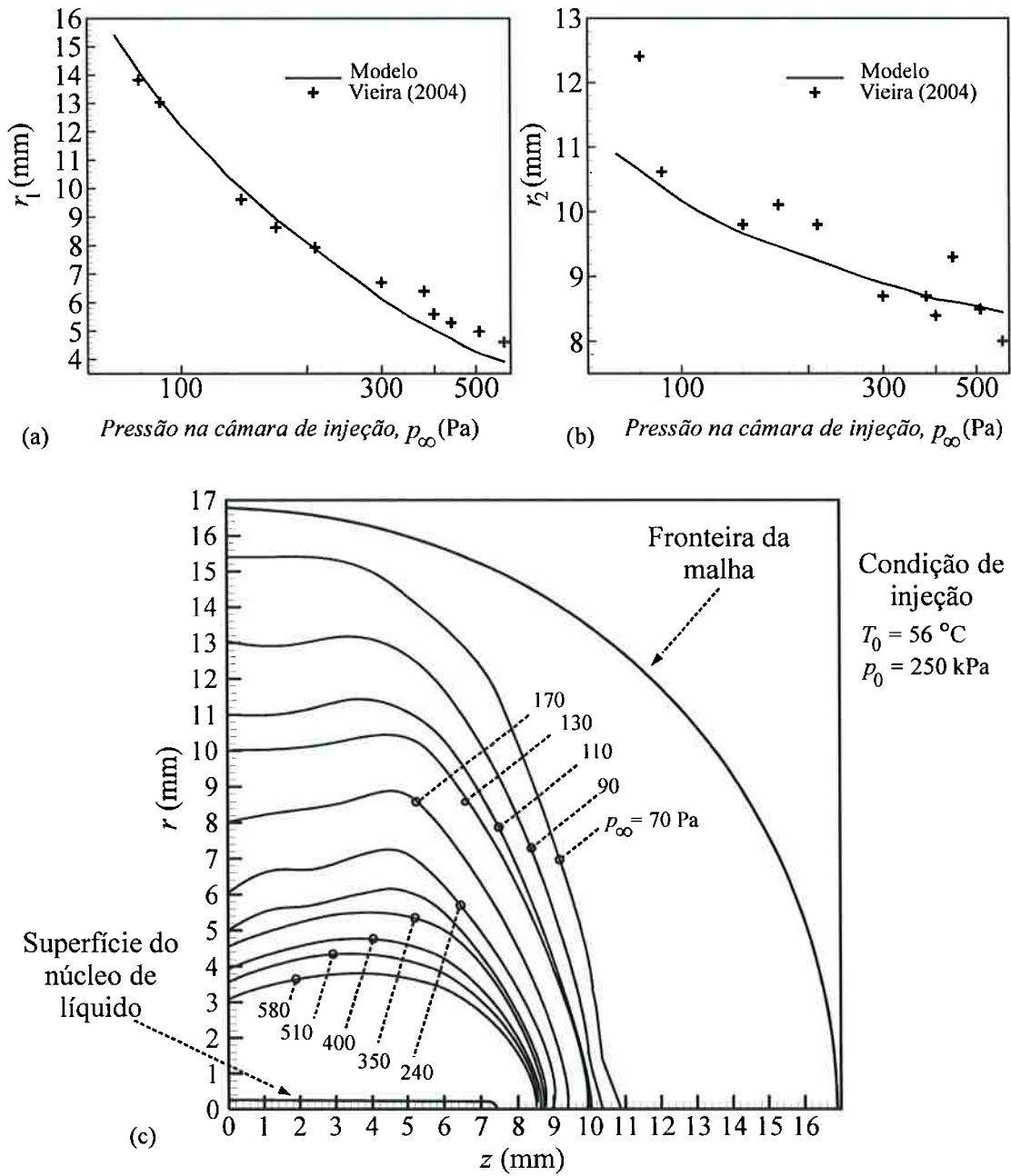


Figura 8.10. Dimensão máxima da onda de choque (caso 2329XXX) na direção: (a) radial e (b) axial em comparação aos resultados experimentais de Vieira (2004) e (c) Geometria das ondas de choque obtidas pelo modelo em função da pressão da câmara de injeção.

8.3 Influência da variação da pressão de injeção na posição da onda de choque

Para estudar a influência da variação da pressão de injeção na posição da onda de choque foram escolhidos os casos 1329XXX, 5329XXX e 7329XXX de Vieira que possuem pressão de injeção, respectivamente de 125 kPa, 500 kPa e 750 kPa e temperatura de injeção igual para os três casos de 56°C.

Para esses casos, foram simuladas para cada par pressão de injeção e temperatura de injeção, condições em que as pressões da câmara de injeção também eram diferentes. As comparações com os resultados de Vieira podem ser analisadas nos gráficos da Fig.8.11.

Novamente é possível notar que o modelo obtém melhores respostas para a dimensão máxima da onda de choque na direção radial do que na axial. Para a dimensão máxima radial a resposta é bem próxima àquela obtida nos experimentos para qualquer pressão na câmara de injeção (mais altas ou mais baixas pressões na câmara de injeção), todavia, para a dimensão máxima axial os resultados são muito melhores para pressões mais elevadas da câmara de injeção.

Na Fig.8.12a e na Fig.8.12b, foram colocados os resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em um comparativo entre si. É possível notar que para a mesma pressão na câmara de injeção, a dimensão da onda de choque, tanto radial quanto axial é maior quando a pressão de injeção também é maior. Uma curiosidade pode ser observada na Fig.8.12, a passagem do formato cilíndrico da onda de choque (para as altas pressões da câmara de injeção) para um formato mais achatado. Nesta última figura uma linha tracejada indica o limite onde das dimensões máximas nas duas direções são iguais.

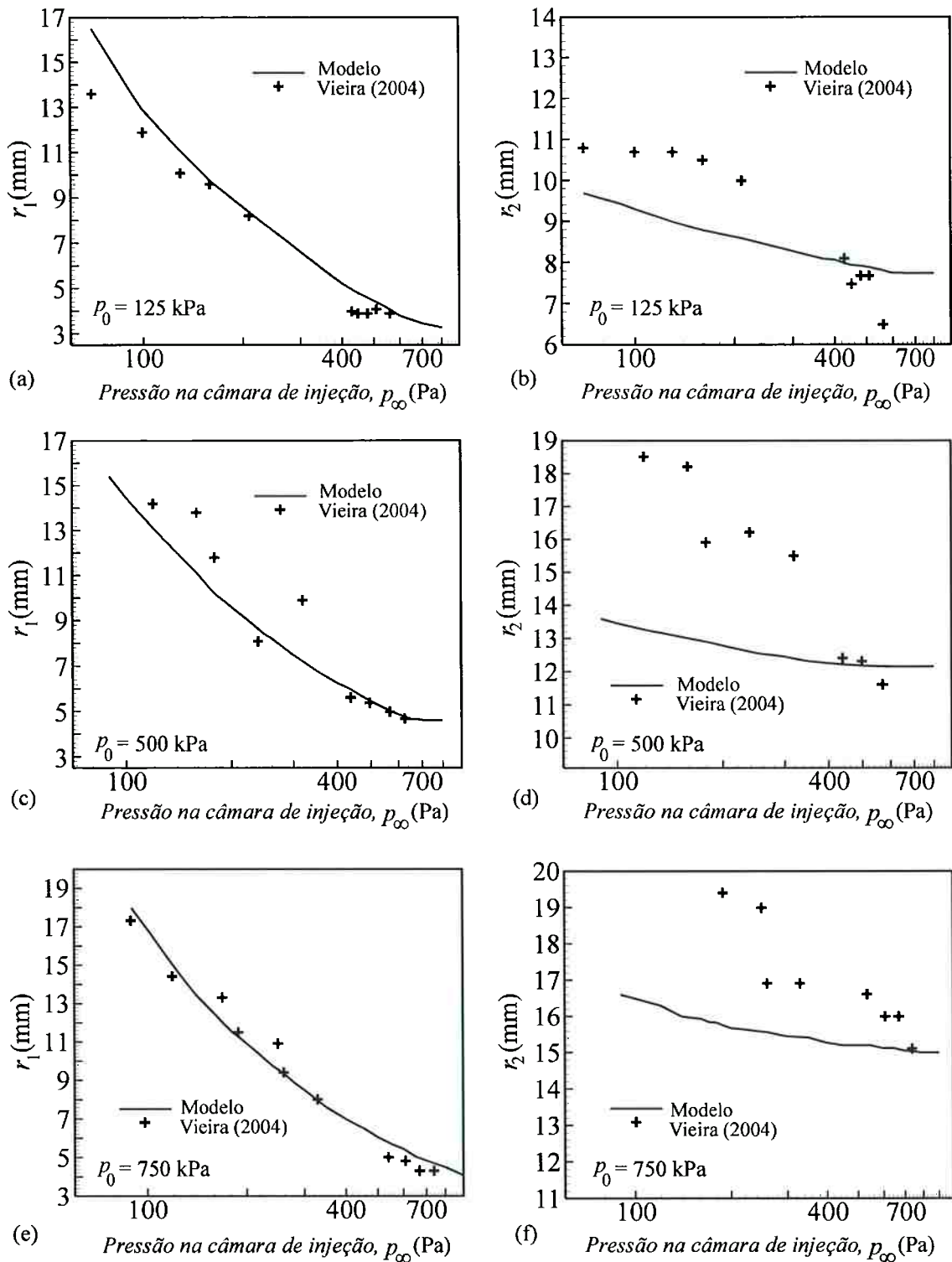


Figura 8.11 Comparação dos resultados do modelo com os experimentos de Vieira (2004) para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão na câmara de injeção para os casos (a) e (b) 1329XXX, (c) e (d) 5329XXX e (e) e (f) 7329XXX cuja temperatura de injeção T_0 é igual a 56 °C.

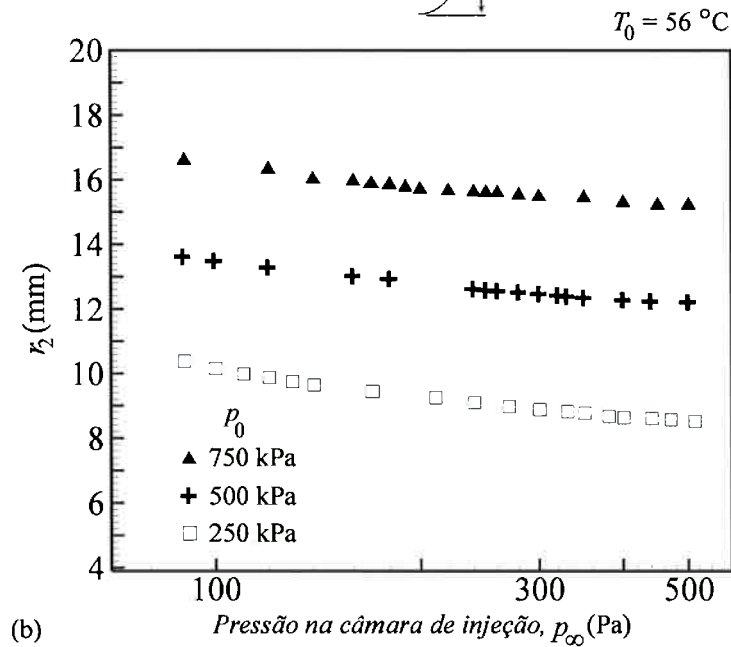
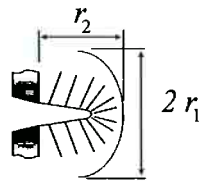
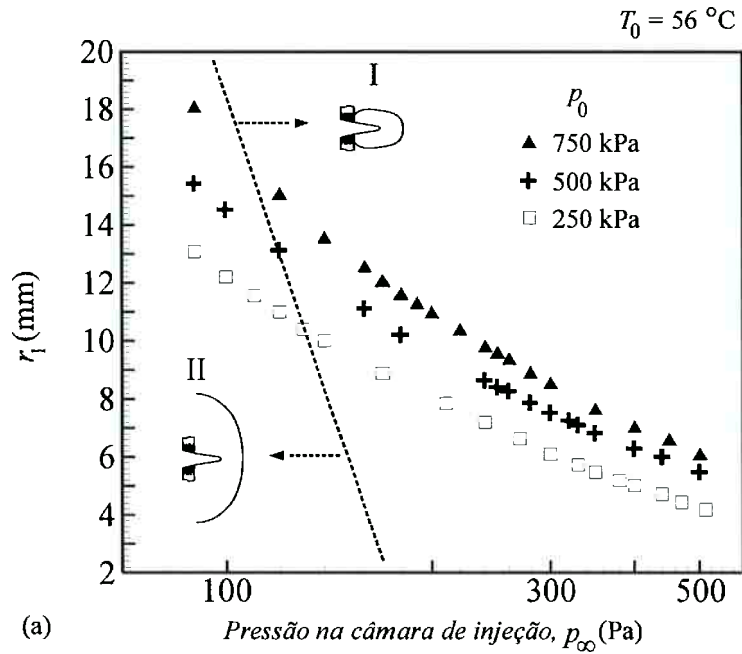


Figura 8.12 Comparação dos resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão do reservatório de injeção para os casos (a) 2329XXX, (b) 5329XXX e (c) 7329XXX cuja temperatura de injeção T_0 é igual a $56 \text{ }^\circ\text{C}$.

8.4 Influência da variação da temperatura de injeção na posição da onda de choque

Para estudar a influência da variação da temperatura de injeção na posição da onda de choque foram escolhidos os casos 7329XXX, 7349XXX e 7368XXX de Vieira que possuem temperatura de injeção, respectivamente de 56°C, 76°C e 95°C e pressão de injeção igual para os três casos de 750 kPa.

Para esses casos, foram simuladas para cada par pressão de injeção e temperatura de injeção (assim como na seção anterior), condições onde as pressões da câmara de injeção também eram diferentes. As comparações com os resultados de Vieira podem ser analisadas nos gráficos da Fig.8.13 (o caso 7329XXX não está na Fig.8.13, pois já foi apresentado na Fig.8.11).

Na Fig.8.14a e na Fig.8.14b foram colocados os resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em um comparativo entre si. É possível verificar que para uma dada pressão na câmara de injeção a dimensão radial da onda de choque aumenta com o aumento da temperatura de injeção, porém a dimensão axial diminui com o aumento de temperatura de injeção.

8.5 Análise dos resultados

O aumento da máxima dimensão radial e axial com o aumento da pressão de injeção (verificado na Fig.8.12) pode ser compreendido da seguinte forma: para todos os casos de Vieira, o bocal de injeção é o mesmo, e a correção do diâmetro da base do núcleo líquido para acerto da vazão em massa devido ao arredondamento do vértice do núcleo líquido cônico não ocasionou grandes mudanças na geometria simulada. Assim, a pressão de Chapman-Jouguet ou a pressão à jusante da onda de evaporação acabou sendo um fator muito relevante na posição da onda de choque. É possível observar a variação da pressão de Chapman-Jouguet em um gráfico que a relacione às condições de pressão de injeção e temperatura de injeção.

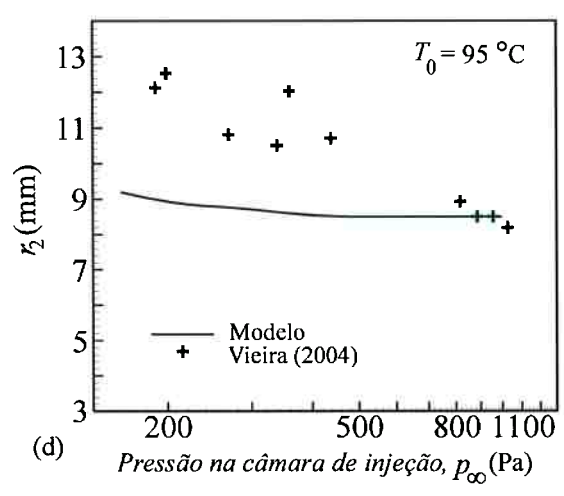
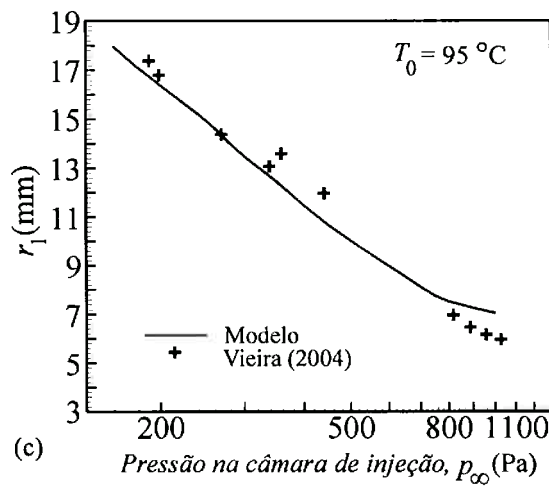
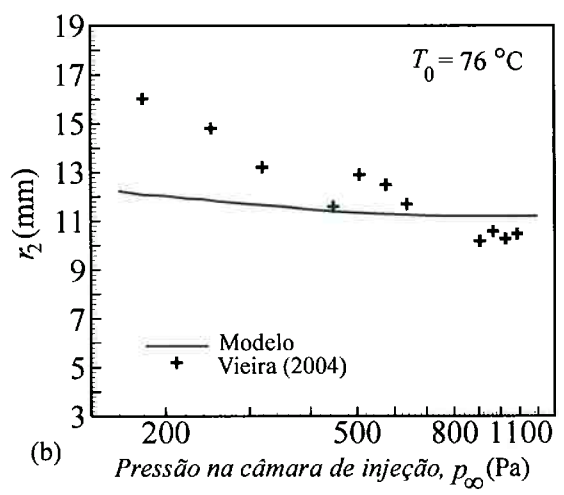
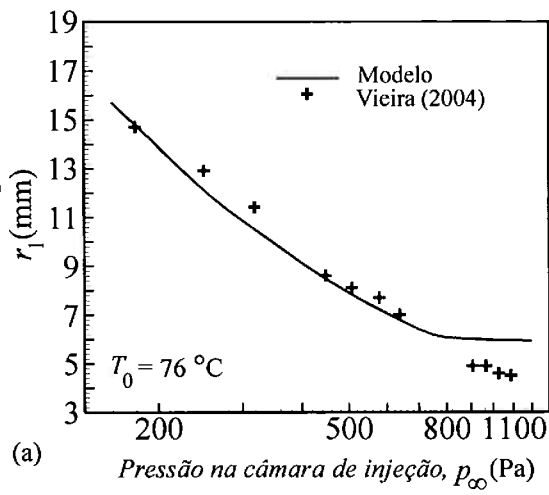


Figura 8.13 Comparação dos resultados do modelo com os experimentos de Vieira (2004) para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão na câmara de injeção para os casos (a) e (b) 7349XXX e (c) e (d) 7368XXX cuja pressão de injeção p_0 é igual a 750 kPa.

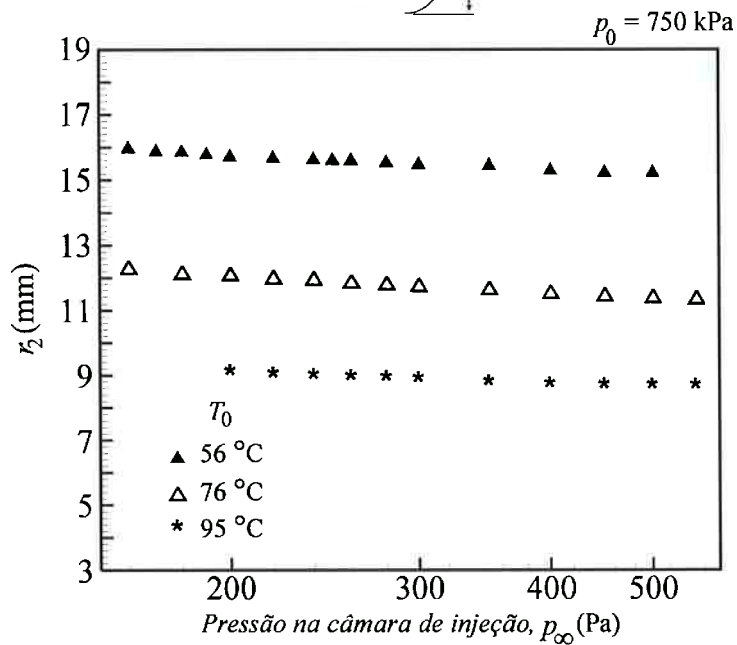
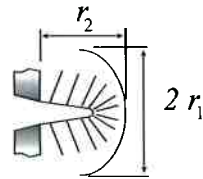
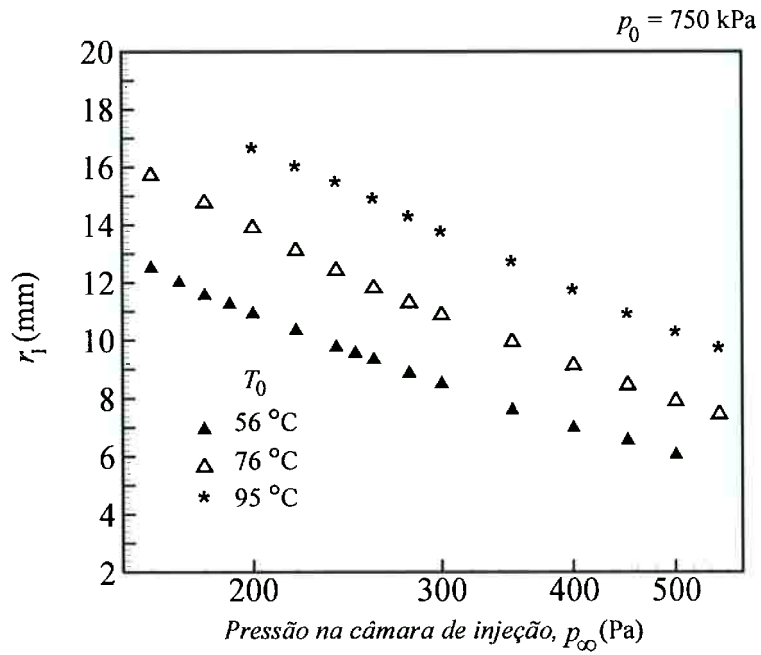


Figura 8.14 Comparação dos resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em função da pressão da câmara de injeção para os casos (a) 7329XXX, (b) 7349XXX e (c) 7368XXX cuja pressão de injeção p_0 é igual a 750 kPa.

A Fig.8.15b exemplifica para algumas pressões e temperaturas de injeção a variação da pressão de Chapman-Jouguet (p_2). É possível notar que, mantendo a temperatura de injeção constante e crescendo a pressão de injeção a pressão de Chapman-Jouguet também aumenta (decorrente do aumento da pressão metaestável p_1 – como pode ser observado na Fig.8.15a). Assim, pressões maiores de injeção obtêm pressões à jusante da onda de evaporação maiores, e choques em posições mais distantes já que para os casos estudados os diâmetros na base do núcleo de líquido são muito semelhantes.

O aumento da temperatura de injeção (na mesma pressão de injeção) causa efeito semelhante sobre a pressão à jusante da onda de evaporação. Portanto, com o aumento da temperatura de injeção, ambas as dimensões máximas da onda de choque deveriam sofrer acréscimos, caso fosse mantida a pressão na câmara de injeção, o que é verificado no caso da dimensão radial máxima (veja Fig.8.14a), mas não no caso da dimensão axial máxima (Fig.8.14b) para a onda de choque. Veja a Fig.8.16a para relacionar os comportamentos de r_1 e, Fig.8.16b para r_2 , com as condições de injeção mantida fixa uma pressão na câmara de injeção. O aparente paradoxo pode ser explicado pela observação do comportamento do comprimento do núcleo de líquido em função das condições de injeção. Segundo dados de Vieira o comprimento do núcleo de líquido (que alimenta o modelo numérico) aumenta com o aumento da pressão de injeção, mas diminui com o acréscimo da temperatura de injeção (veja Fig.8.17). O efeito da diminuição do núcleo de líquido com o aumento da temperatura de injeção suplanta o efeito do aumento da pressão à jusante da onda de evaporação. E para a dimensão máxima axial a influência mais significativa é o tamanho do núcleo líquido, é por esse motivo que, quando a temperatura de injeção sofre acréscimo a dimensão máxima da onda de choque na direção axial diminui.

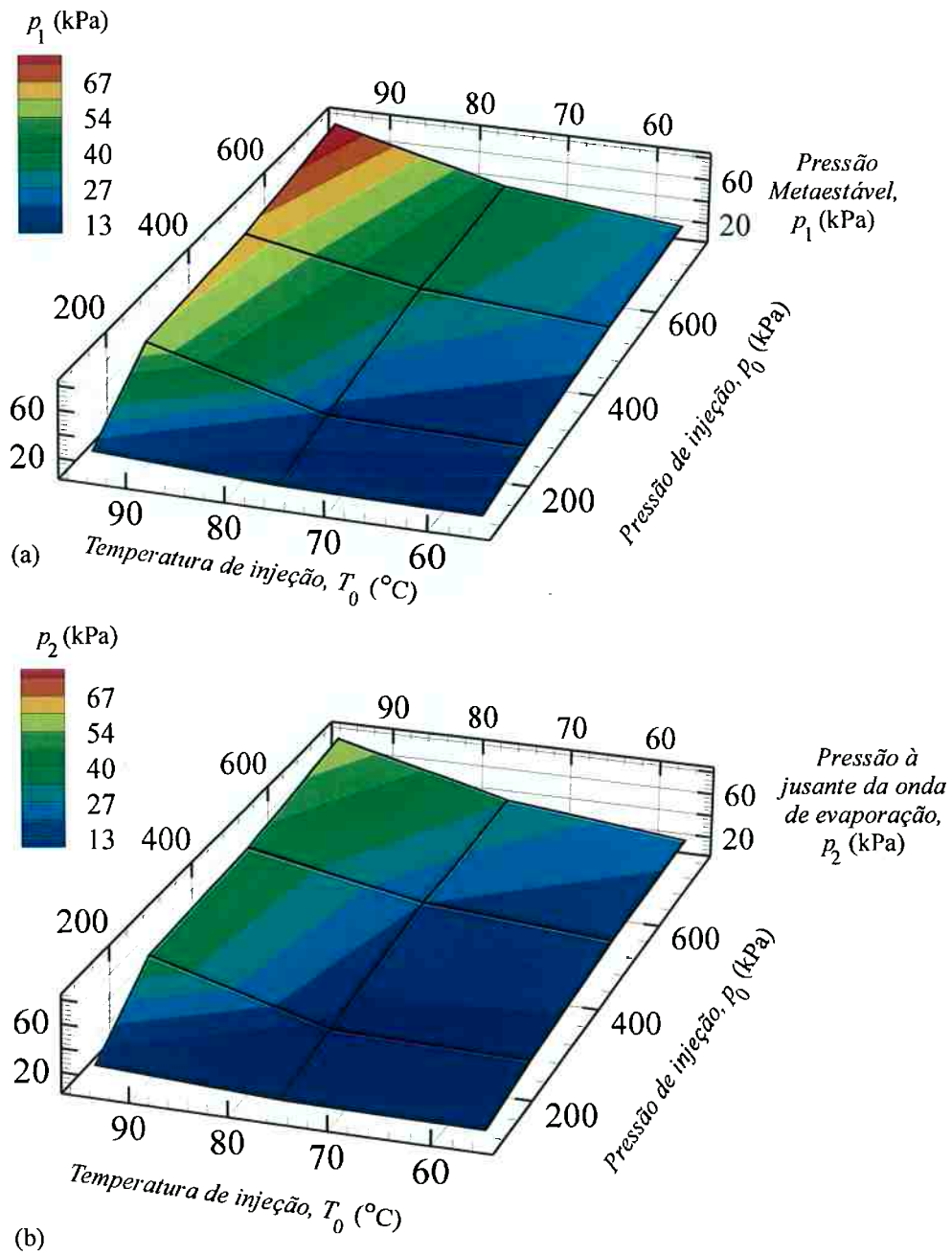


Figura 8.15 Comparação dos resultados do modelo para as pressões metaestável e pós onda de evaporação em função das condições de injeção. (a) pressão metaestável; (b) pressão de Chapman-Jouguet.

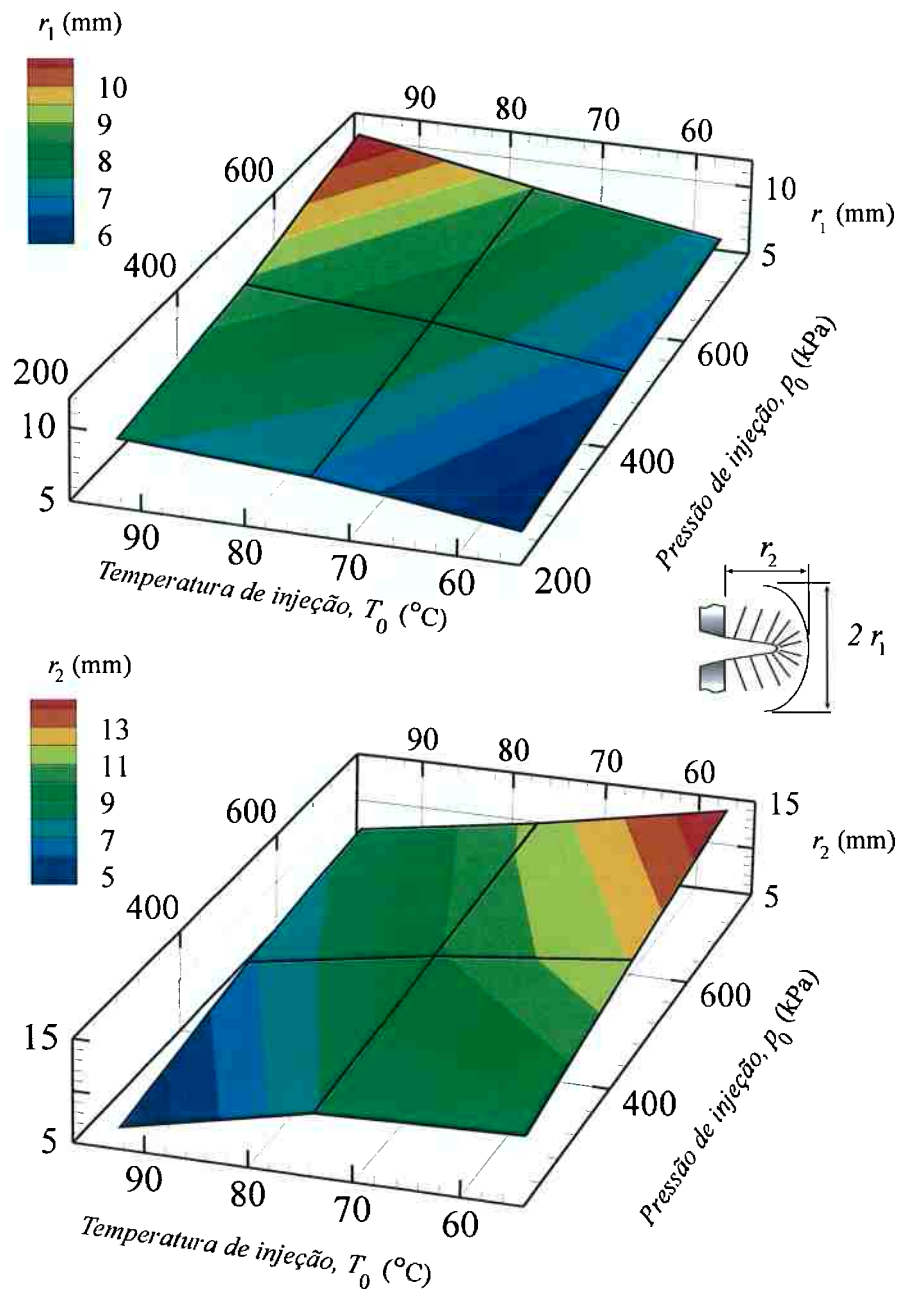


Figura 8.16 Comparação dos resultados do modelo para as dimensões máximas da onda de choque em função das condições de injeção. (a) dimensão máxima radial; (b) dimensão máxima axial.

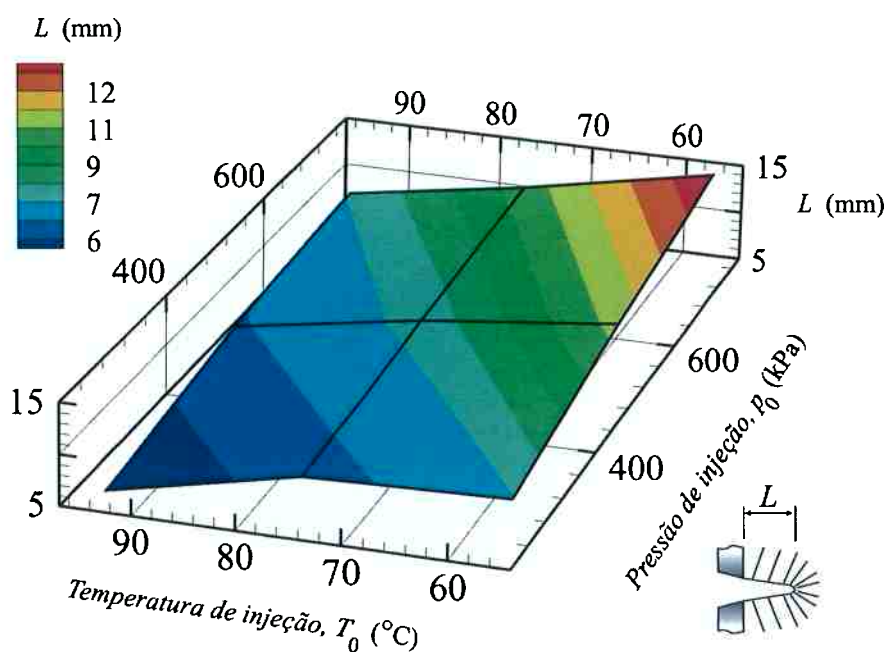


Figura 8.17 Comprimento do núcleo líquido em função das condições de injeção (Vieira, 2004).

8.6 Comparação dos resultados do modelo bidimensional com os resultados do modelo unidimensional de Simões-Moreira (1999)

O modelo unidimensional de Simões-Moreira (1999) também utiliza a técnica de marcha à jusante, contudo, não pelo método das diferenças finitas de MacCormack e sim por integração direta das equações de conservação, através de um método numérico de segunda ordem. A expansão é admitida como radial e um raio de hemisfério (R_h) determinado pela vazão mássica e pela solução de Chapman-Jouguet, através da onda de evaporação conforme Capítulo 5 (veja Seção 5.5.1). No modelo, a cada passo no espaço são resolvidas as equações de salto e comparadas as condições encontradas pela solução destas com as condições de reservatório. A onda de choque neste caso é hemisférica e o modelo fornece, como resultado, sua posição, aqui denominada de r_{SM} (veja Fig.8.18).

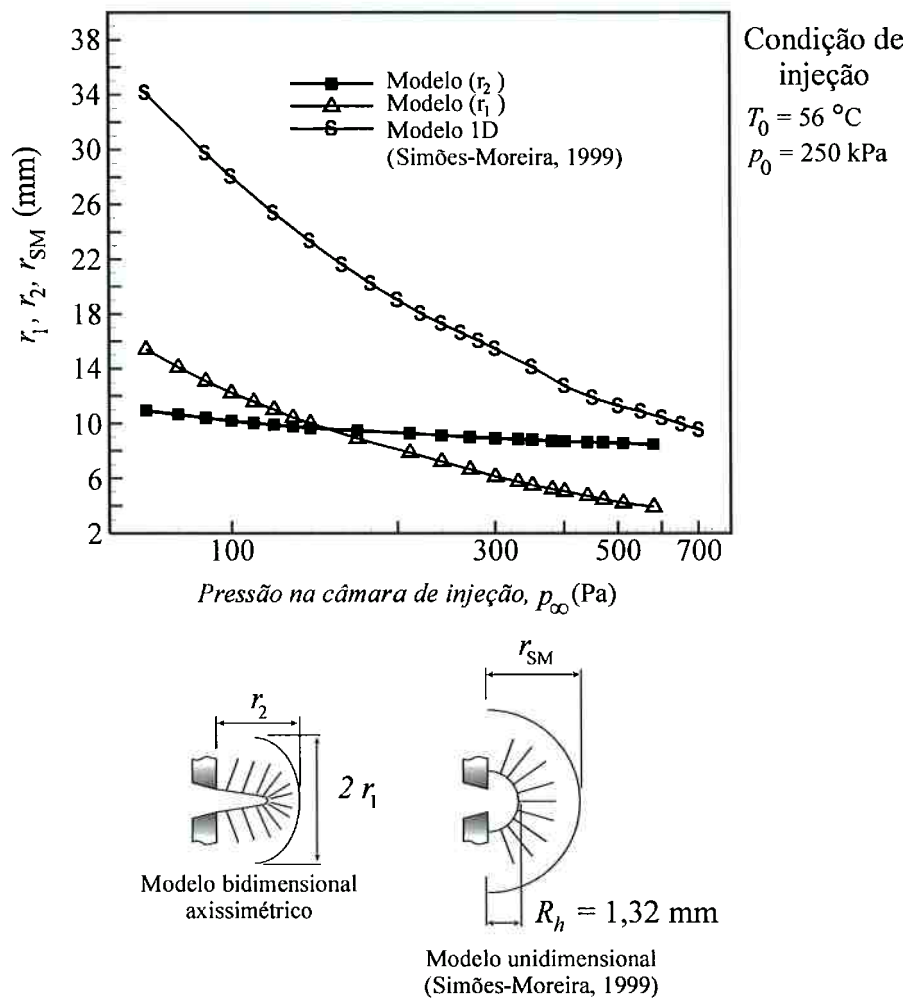


Figura 8.18 Comparação dos resultados do modelo bidimensional com o modelo unidimensional de Simões-Moreira (1999) para o caso 2329XXX

Novamente são comparados os resultados das simulações para o caso 2329XXX de Vieira com variação da pressão na câmara de injeção. Os resultados do modelo unidimensional determinam uma posição a uma distância maior que aquelas obtidas nos experimentos e no modelo bidimensional para onda de choque na maioria dos casos. O modelo consegue determinar apenas a ordem de grandeza da posição da onda de choque, pois não pode simular condições de contorno mais complexas como é possível com o modelo bidimensional axissimétrico. Outros resultados para os casos escolhidos de Athans, utilizando o modelo unidimensional de Simões-Moreira, podem ser vistos na Tabela 8.3.

8.7 Tabelas com os resultados das simulações

A decisão de apresentar os resultados em forma de gráficos deve-se à facilidade de observação e rapidez de análise proporcionada pelos mesmos. Contudo, os valores numéricos para as simulações apresentadas podem ser consultados nas tabelas que seguem, mostradas no final deste capítulo para não quebrar a seqüência de apresentação dos resultados. As dimensões máximas para as ondas de choque dos casos simulados, e também as medições experimentais obtidas por Vieira (2004), são apresentadas nas tabelas de 8.4 até 8.9, cujas condições foram relacionadas na Tabela 8.2.

Tabela 8.4 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 1329XXX

| P_{∞} (kPa) | Modelo | | Medida | | Vieira (2004) código |
|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------------------|
| | r_1 (mm) | r_2 (mm) | r_1 (mm) | r_2 (mm) | |
| 70 | 13,92 | 9,45 | 11,90 | 10,70 | 1329500 (126) |
| 90 | 12,89 | 9,31 | 10,10 | 10,70 | |
| 100 | 11,05 | 9,00 | 9,60 | 10,50 | |
| 130 | 9,75 | 8,80 | 8,20 | 10,00 | |
| 160 | 8,37 | 8,60 | 4,00 | 8,10 | 1329050 (127*) |
| 210 | 5,60 | 8,10 | 3,90 | 7,50 | |
| 370 | 5,23 | 8,08 | 3,90 | 7,70 | |
| 400 | 4,97 | 7,99 | 4,10 | 7,70 | |
| 430 | 4,81 | 7,95 | 3,90 | 6,50 | |
| 450 | 4,60 | 7,93 | | | |
| 480 | 4,41 | 7,90 | | | |
| 510 | 4,08 | 7,82 | | | |
| 560 | 3,88 | 7,76 | | | |
| 590 | 3,82 | 7,76 | | | |
| 600 | 3,47 | 7,75 | | | |
| 700 | 3,30 | 7,74 | | | |

Injeção
 P_0 125 kPa
 T_0 56°C

Tabela 8.5 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 2329XXX

| P_{∞} (kPa) | Modelo | | Medida | | Vieira (2004) código |
|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------------------|
| | r_1 (mm) | r_2 (mm) | r_1 (mm) | r_2 (mm) | |
| 70 | 15,40 | 10,90 | 18,1 | 14,3 | 2329500 (64) |
| 80 | 14,09 | 10,63 | 13,8 | 12,4 | |
| 90 | 13,07 | 10,38 | 13,0 | 10,6 | |
| 100 | 12,20 | 10,15 | 9,6 | 9,8 | |
| 110 | 11,56 | 9,99 | 8,6 | 10,1 | 2329100 (63*) |
| 120 | 10,99 | 9,88 | 7,9 | 9,8 | |
| 130 | 10,40 | 9,76 | 6,7 | 8,7 | |
| 140 | 10,00 | 9,65 | 6,4 | 8,7 | |
| 170 | 8,88 | 9,45 | 5,6 | 8,4 | 2329050 (65) |
| 210 | 7,85 | 9,26 | 5,3 | 9,3 | |
| 240 | 7,20 | 9,11 | 5,0 | 8,5 | |
| 270 | 6,63 | 8,98 | 4,6 | 8,0 | |
| 300 | 6,10 | 8,89 | | | |
| 330 | 5,73 | 8,83 | | | |
| 350 | 5,48 | 8,78 | | | |
| 380 | 5,20 | 8,69 | | | |
| 400 | 5,02 | 8,65 | | | |
| 440 | 4,70 | 8,62 | | | |
| 470 | 4,44 | 8,59 | | | |
| 510 | 4,19 | 8,53 | | | |
| 580 | 3,90 | 8,45 | | | |

Injeção
 P_0 250 kPa
 T_0 56°C

Tabela 8.6 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 5329XXX

| P_{∞} (kPa) | Modelo | | Medida | | Vieira (2004) código e |
|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|------------------------------|
| | r_1 (mm) | r_2 (mm) | r_1 (mm) | r_2 (mm) | |
| 90 | 15,40 | 13,60 | 14,2 | 18,5 | 5329500 (79) |
| 100 | 14,50 | 13,46 | 13,8 | 18,2 | |
| 120 | 13,10 | 13,26 | 11,8 | 15,9 | 5329050 (80) |
| 160 | 11,10 | 13,01 | 8,1 | 16,2 | |
| 180 | 10,20 | 12,90 | 9,9 | 15,5 | |
| 240 | 8,64 | 12,60 | 5,6 | 12,4 | 5329100 (78*) |
| 250 | 8,41 | 12,56 | 5,4 | 12,3 | |
| 260 | 8,26 | 12,53 | 5,0 | 11,6 | |
| 280 | 7,87 | 12,49 | 4,7 | 9,1 | |
| 300 | 7,52 | 12,45 | | | |
| 320 | 7,25 | 12,39 | | | |
| 330 | 7,10 | 12,37 | | | |
| 350 | 6,83 | 12,32 | | | |
| 400 | 6,29 | 12,25 | | | |
| 440 | 6,00 | 12,22 | | | |
| 500 | 5,48 | 12,18 | | | |
| 550 | 5,17 | 12,16 | | | |
| 600 | 4,90 | 12,15 | | | |
| 630 | 4,80 | 12,15 | | | |
| 650 | 4,71 | 12,15 | | | |
| 700 | 4,65 | 12,15 | | | |
| 750 | 4,64 | 12,15 | | | |
| 800 | 4,63 | 12,15 | | | |

Injeção
 P_0 500 kPa
 T_0 56°C

Tabela 8.7 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 7329XXX

| P_{∞} (kPa) | Modelo | | Medida | | Vieira (2004) código e |
|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|------------------------------|
| | r_1 (mm) | r_2 (mm) | r_1 (mm) | r_2 (mm) | |
| 90 | 18,00 | 16,60 | 17,3 | 23,9 | 7329500 (116) |
| 120 | 15,00 | 16,30 | 14,4 | 21,7 | |
| 140 | 13,50 | 16,00 | 13,3 | 20,9 | 7329200 (115) |
| 160 | 12,50 | 15,94 | 11,5 | 19,4 | |
| 170 | 12,00 | 15,85 | 10,9 | 19,0 | |
| 180 | 11,56 | 15,83 | 9,4 | 16,9 | |
| 190 | 11,25 | 15,75 | 8,0 | 16,9 | |
| 200 | 10,92 | 15,68 | 5,0 | 16,6 | 7329050 (117*) |
| 220 | 10,34 | 15,64 | 4,8 | 16,0 | |
| 240 | 9,76 | 15,60 | 4,3 | 16,0 | |
| 250 | 9,55 | 15,58 | 4,3 | 15,1 | |
| 260 | 9,33 | 15,57 | | | |
| 280 | 8,86 | 15,50 | | | |
| 300 | 8,50 | 15,45 | | | |
| 350 | 7,60 | 15,42 | | | |
| 400 | 6,99 | 15,27 | | | |
| 450 | 6,56 | 15,20 | | | |
| 500 | 6,06 | 15,20 | | | |
| 550 | 5,70 | 15,20 | | | |
| 600 | 5,45 | 15,12 | | | |
| 650 | 5,05 | 15,12 | | | |
| 700 | 4,84 | 15,05 | | | |
| 750 | 4,66 | 15,03 | | | |
| 800 | 4,50 | 15,00 | | | |
| 850 | 4,30 | 15,00 | | | |
| 900 | 4,08 | 15,00 | | | |

Injeção
 P_0 750 kPa
 P_0 56°C

Tabela 8.8 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 7349XXX

| P_{∞} (kPa) | Modelo | | Medida | | Vieira (2004) código |
|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------------------|
| | r_1 (mm) | r_2 (mm) | r_1 (mm) | r_2 (mm) | |
| 160 | 15,72 | 12,26 | 18,9 | 17,8 | 7349500 (110) |
| 180 | 14,78 | 12,1 | 14,7 | 16,0 | |
| 200 | 13,9 | 12,06 | 12,9 | 14,8 | |
| 220 | 13,11 | 11,96 | 11,4 | 13,2 | |
| 240 | 12,42 | 11,92 | 8,6 | 11,6 | 7349100 (111*) |
| 260 | 11,82 | 11,82 | 8,1 | 12,9 | |
| 280 | 11,31 | 11,77 | 7,7 | 12,5 | |
| 300 | 10,88 | 11,72 | 7,0 | 11,7 | |
| 350 | 9,95 | 11,62 | 4,9 | 10,2 | 7349050(112) |
| 400 | 9,14 | 11,50 | 4,9 | 10,6 | |
| 450 | 8,47 | 11,42 | 4,6 | 10,3 | |
| 500 | 7,92 | 11,37 | 4,5 | 10,5 | |
| 550 | 7,46 | 11,32 | | | |
| 600 | 7,07 | 11,30 | | | |
| 650 | 6,72 | 11,27 | | | |
| 700 | 6,42 | 11,25 | | | |
| 750 | 6,19 | 11,23 | | | |
| 800 | 6,08 | 11,22 | | | |
| 900 | 6,01 | 11,22 | | | |
| 1000 | 5,98 | 11,22 | | | |
| 1100 | 5,96 | 11,22 | | | |
| 1200 | 5,94 | 11,22 | | | |

Injeção
 P_0 750 kPa
 T_0 76°C

Tabela 8.9 Resultados do modelo e dos ensaios de Vieira (2004) para a série 7368XXX

| P_{∞} (kPa) | Modelo | | Medida | | Vieira (2004) código |
|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------------------|
| | r_1 (mm) | r_2 (mm) | r_1 (mm) | r_2 (mm) | |
| 160 | 18,00 | 9,20 | 19,9 | 13,4 | 7368m10 (108) |
| 180 | 17,13 | 9,05 | 17,4 | 12,1 | e |
| 200 | 16,42 | 8,94 | 16,8 | 12,5 | 7368500 (103) |
| 220 | 15,80 | 8,86 | 14,4 | 10,8 | |
| 240 | 15,25 | 8,82 | 13,1 | 10,5 | |
| 260 | 14,68 | 8,79 | 13,6 | 12,0 | |
| 280 | 14,05 | 8,75 | 12,0 | 10,7 | |
| 300 | 13,54 | 8,715 | 7 | 8,9 | 7368100 (105*) |
| 350 | 12,5 | 8,618 | 6,5 | 8,5 | |
| 400 | 11,52 | 8,548 | 6,2 | 8,5 | |
| 450 | 10,7 | 8,513 | 6 | 8,2 | |
| 500 | 10,08 | 8,502 | | | |
| 550 | 9,525 | 8,5 | | | |
| 600 | 9,025 | 8,5 | | | |
| 650 | 8,575 | 8,5 | | | |
| 700 | 8,15 | 8,50 | | | |
| 750 | 7,80 | 8,50 | | | |
| 800 | 7,57 | 8,50 | | | |
| 900 | 7,30 | 8,50 | | | |
| 1000 | 7,10 | 8,50 | | | |

Injeção
 P_0 750 kPa
 T_0 95°C

9. CONCLUSÕES E CONTINUIDADE DO TRABALHO

9.1 Conclusões

A contribuição do presente trabalho dá-se principalmente na construção de um modelo que permite determinar as grandezas e propriedades do escoamento pós-onda de evaporação. O modelo bidimensional axissimétrico que utiliza o método de diferenças finitas de MacCormack no esquema de marcha à jusante é capaz de prever com boa precisão, a posição da onda de choque no escoamento do jato de líquido altamente superaquecido. Foram observadas as seguintes características do escoamento (observações que são corroboradas pelos experimentos de outros pesquisadores):

- a) Ao atravessar a superfície do núcleo de líquido (onda de evaporação) o fluido (já como mistura bifásica) sofre um giro, que em alguns casos é bastante acentuado, mudando assim, a sua direção preferencial de escoamento que é a da linha de centro do bocal de injeção;
- b) Nas proximidades do núcleo de líquido há grande evaporação, e acentuada diminuição de pressão e temperatura, que são acompanhadas do aumento da velocidade (processo de expansão);
- c) Em alguns casos devido às características termodinâmicas peculiares das substâncias em estudo (SCME) há durante o processo de expansão pós-onda de evaporação mudança completa de fase;
- d) O processo de expansão à jusante da onda de evaporação leva, em alguns casos, a pressões inferiores a pressão da câmara de injeção e a formação de uma onda de choque;
- e) A posição da onda de choque é muito sensível ao valor da pressão na câmara de injeção. Valores maiores de pressão de injeção obtém ondas de choque mais próximas do núcleo de líquido;

- f) Fixada uma temperatura de injeção e uma pressão na câmara de injeção, quanto maior for a pressão de injeção, maiores serão as dimensões máximas da onda de choque;
- g) Fixada uma pressão de injeção e uma temperatura na câmara de injeção, quanto maior for a temperatura de injeção, maior será a máxima dimensão radial da onda de choque e menor a dimensão axial;

Quanto às respostas do modelo bidimensional e seu comportamento é possível dizer que:

- a) Para pressões da câmara de injeção muito baixas o modelo é mais preciso na determinação das dimensões máximas da onda de choque na direção radial do que na axial (pressões da câmara maiores obtêm bons resultados para ambas as dimensões máximas);
- b) Ao contrário dos modelos unidimensionais (Simões-Moreira, 1999 e unidimensional do tipo falso transitório apresentado no Apêndice II) o modelo bidimensional não superestima a posição da onda de choque;
- c) A necessidade da utilização de uma equação de estado realista (como a Lee-Kesler) impõe dificuldades de solução e aumento do tempo computacional, pois sua solução não é direta como, por exemplo, nos casos de escoamentos de ar que empregam a equação de estado dos gases perfeitos.

9.2 Continuidade do trabalho

Seguem propostas da continuidade da investigação do escoamento do jato evaporativo:

- a) Exploração de outros formatos para o núcleo de líquido mais realísticos (através de métodos variacionais), bem como um estudo mais aprofundado do estado termodinâmico em seu interior;

- b) Previsão através de métodos analíticos da vazão em massa do escoamento do jato evaporativo;
- c) Aplicação da teoria em passagens, restrições, válvulas, bocais (convergente / divergente), entre outros. O programa ShoWPhasT2D foi construído também visando a utilização na solução de problemas que mantenham características e comportamento matemático semelhante ao jato evaporativo como os citados;
- d) Investigar o fenômeno em acidentes como na ruptura de tubulações e tanques e seus efeitos na dispersão dos fluidos e,
- e) O aperfeiçoamento do programa ShoWPhasT2D e do programa de determinação de propriedades PROP tornando os códigos computacionais mais eficientes e se possível, preparados para computadores com múltiplos processadores.

Referências Bibliográficas

ABBETT, M. J. Boundary Condition Calculation Procedures for Inviscid Supersonic Flow Fields. **Proceedings of the 1st AIAA Computational Fluid Dynamics Conference**. Palm Springs, CA, 1973. p.153-172.

ATTOU, A.; SEYNHAEVE, J.M. Steady-state critical two-phase flashing flow with possible multiple choking phenomenon. Part 1: Physical modelling and numerical procedure. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v.12, p.335-345, 1999.

ATTOU, A.; SEYNHAEVE, J.M. Steady-state critical two-phase flashing flow with possible multiple choking phenomenon. Part 2: comparison with experimental results and physical interpretations. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v.12, p.347-359, 1999.

ATTOU, A.; BOLLE, L.; SEYNHAEVE, J.M. Experimental study of the critical flashing flow through a relief line: evidence of the double-choked flow phenomenon. **International Journal of Multiphase Flow**, v.26, p.921-947, 2000.

AL-KHAFAJI, A.W.; TOOLEY, J.R. **Numerical Methods in Engineering Practice**. Fort Worth: Saunders College Publishing, 1986. 642p.

ANDERSON, J.D. **Modern compressible flow: with historical perspective**. 2.ed. New York: McGraw-Hill, 1990. 650p.

ANDERSON, J.D. **Computational fluid dynamics: The basics with applications**. New York: McGraw-Hill, 1995. 547p.

ANDERSON, J.D. **Fundamentals of Aerodynamics**. 3.ed. Boston: McGraw-Hill, 2001. 892p.

ANGELO, E. **Estudo numérico de jatos evaporativos**. 2000. 148p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, 2000.

ATHANS, R.E.; HIRSA, A. A photographic study of a small flashing jets. **Flow visualization and image processing of multiphase system**, ASME, v.209, p.201-206, 1995.

ATHANS, R.E. **The rapid expansion of near-critical retrograde fluid**. 1995. Tese (Doutorado) – Rensselaer Polytechnic Institute. New York, 1995.

BAILEY, J.F. Metastable flow of saturated water. **Journal of Basic Engineering**, pp.1109-1116, 1951.

BOLLE, L et al. Experimental and theoretical analysis of flashing water flow through a safety valve. **Journal of Hazardous Materials**, v.46, p.105-116, 1996.

CARNAHAN, B.; LUTHER, H.A.; WILKES, J.D. **Applied numerical methods**. New York: Wiley, 1969. 604p.

CHAPRA, S.C.; CANALE, R.P. **Numerical methods for engineers**. 2.ed. New York: McGraw-Hill, 1988. 812p.

DEAVES, D.M. et al. Modelling of catastrophic flashing releases. **Journal of Hazardous Materials**, v.A88, p.1-32, 2001.

DETTLEFF, G. et al. An experimental study of liquefaction shock waves. **Journal of Fluid Mechanics**, v.95, p.279-304, 1979.

ELIAS, E.; CHAMBRÉ, P.L. Bubble transport in flashing flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 26, p.191-206, 2000.

FAIRUZOV, Y.V. Blowdown of pipelines carrying flashing liquids. **American Institute of Chemical Engineers Journal**. V.44, n.2, p.245-254, 1998.

FERRO, E. et al. Modelling of flash and stripping Phenomena in deaerators for seawater desalination. **Desalination**, v.142, p.171-180, 2002.

FOX, R.W.; MCDONALD, A.T. **Introdução à mecânica dos fluidos**. 4.ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1995. 662p.

FRASER, D.W.H.; ABDELMESSIH. A study of the effects of the location of flashing inception on maximum and minimum critical two-phase flow rates: Part I – experimental. **Nuclear Engineering and Design**, v.211, p.1-11, 2002.

FRASER, D.W.H.; ABDELMESSIH. A study of the effects of the location of flashing inception on maximum and minimum critical two-phase flow rates: Part II – analysis and modelling. **Nuclear Engineering and Design**, v.213, p.11-30, 2002.

FROST, D.; STURTEVANT, B.; Effects of ambient pressure on the instability of liquid boiling explosively at the superheat limit. **Transactions of the ASME**. v.108, p.418-424, 1986.

FUCHS, H.; LEGGE, H. Flow of a water jet into vacuum. **Acta. Astronautica**, v.6, p.1213-1226, 1979.

GEMCI, T. et al. Cavitation and flash boiling atomization of water/acetone binary mixtures. **Proceedings of the 14th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems**, America (ILASS-America), Dearborn, MI, May 20-23, 2001. p.241-246.

HAHNE, E.; BARTHOU, G. Evaporation waves in flashing processes. **International Journal of Multiphase Flow**, v.26, p.531-547, 2000.

HILL, L.G. **An experimental study of evaporation waves in superheated liquids.** 1991. Tese (Doutorado) – California Institute of Technology. California, 1991.

HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows volume I.** Chichester: Wiley, 1988. 515p.

HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows volume II.** Chichester: Wiley, 1988. 691p.

KIM, Y. **Two-phase flow of HCFC-22 and HCFC-134a through short tube orifices.** 1993. 210p. Tese (Doutorado) – Texas A&M University. Texas, 1993.

KURCHAT, T.; CHAVES, H.; MEIER, G.E.A. Complete adiabatic evaporation highly superheated liquid jets. **Journal of Fluid Mechanics**, v.236, p.43-59, 1992.

LEE, B.I.; KESLER, M.G. A generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding state. **American Institute of Chemical Engineers Journal**, v.21, n.3, p.510-527, 1975.

LIENHART, J.H.; DAY, J.B. The breakup of superheated liquid jets. **Journal of Basic Engineering**, v.92, p.515-521, 1970.

MENEGHINI, J.R. **Geração e utilização de sistemas de coordenadas orientadas de acordo com as fronteiras do escoamento.** 1999. 242p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo. São Paulo, 1989.

MILLER, R.W. **Flow measurement engineering handbook.** 2ed. McGraw-Hill, 1985.

MORAN, M.J.; SHAPIRO, H.N. **Fundamentals of engineering thermodynamics.** John Wiley & Sons, 1996. 880p.

MORRIS, S.D. Vapour adiabatic exponent for flashing flow in nozzles. **Chemical Engineering and Processing**, v.39, p.275-281, 2000.

OZA, R.D. On Mechanism of flashing injection of initially subcooled fuels. **Journal of Fluids Engineering**, v.106, p.105-109, 1984.

OZA, R.D.; SINNAMON, J. F. An experimental and analytical study of flash-boiling fuel injection. **SAE Paper 830590**, 1983.

PASQUA, P.F. Metastable flow of Freon-12. **Refrigerating Engineering**, v.61, p.1084A-1088, 1953.

PARK, S.B.; LEE, S.Y. An experimental investigation of the flash atomization mechanism. **Atomization and Sprays**, v.4, p.159-179, 1994.

PETER, E.M.; TAKIMOTO, A.; HASHIRO, Y. Flashing and shattering phenomena of superheated liquid jets. **JSME International Journal**, B series, v.37, n.2, p.313-321, 1994.

PETER, E.M.; TAKIMOTO, A.; HAYASHI, Y. Experimental investigation of the mode of phase dissociation in superheated liquid jets. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.38, n.8, p.1457-1466, 1995.

PETERSON, R.J.; GREWAL, S.S.; EL-WAKIL, M.M. Investigations of liquid flashing and evaporation due to sudden depressurization. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.27, n.2, p.301-310, 1984.

PIANTHONG, K. et al. Supersonic liquid jets: Their generation and shock wave characteristics. **Shock Waves**, v.11, p.457-466, 2002.

POLING, B.E; PRAUSNITZ, J.M; O'CONNELL, J.P. **The properties of gases & liquids**. 5.ed. McGraw-Hill, 2000.

PRAGER, W. **Introduction to mechanics of continua**. Boston: Ginn, 1961. 251p.

PRESS, W.H. et al. **Numerical Recipes in FORTRAN: The art of scientific computing**. 2.ed. New York: Cambridge University Press, 1992. 963p.

RAMAMURTHI, K.; NANDAKUMAR, K. Disintegration of liquid jets from sharp-edged nozzles. **Atomization and Sprays**, v.4, p.551-564, 1994.

REID, R.C. Superheated Liquids. **American Scientist**, v. 64, p. 145-156, 1976.

REID, R.C.; PRAUSNITZ, J.M., POLING, B.E. **The properties of gases & liquids**. 4.ed. New York: McGraw-Hill, 1987. 741p.

REITZ, R.D. A photographic study of flash-boiling atomization. **Aerosol Science and Technology**, v.12, p.561-569, 1990.

SAURY, D.; HARMAND, S.; SIROUX, M. Experimental study of flash evaporation of a water film. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 45, p.3447-3457, 2002.

SHEPHERD, J. E. **Dynamics of vapor explosions: rapid evaporation and instability of butane droplets exploding at the superheat limit**. 1981. Tese (Doutorado) – California Institute of Technology, California, 1981.

SHEPHERD, J. E.; STURTEVANT, B.; Rapid evaporation at the superheat limit. **Journal of Fluid Mechanics**. v.121, p.379-402, 1982.

SHIVAYYANAMATH, S.; TEWARI, P.K. Simulation of start-up characteristics of multi-stage flash desalination plants. **Desalination**, v.155, p.277-286, 2002.

SIMÕES-MOREIRA, J.R.; MCCAHAN, S.E.; SHEPHERD, J.E. Complete evaporation waves. **In: ASME FLUID ENGINEERING CONFERENCE**, paper # 93-FE-7. Washington DC, EUA, June 20-24, 1993.

SIMÕES-MOREIRA, J.R. **Adiabatic evaporation waves**. 1994. 275p. Tese (Doutorado) – Rensselaer Polytechnic Institute. New York, 1994.

SIMÕES-MOREIRA, J.R. Comportamento termodinâmico de substâncias de complexidade molecular elevada. **In: CONGRESSO IBERO-AMERICANO DE ENGENHARIA MECÂNICA**, 3., Havana, Cuba, 23 a 26 de setembro, 1997.

SIMÕES-MOREIRA, J.R.; SHEPHERD, J. Evaporation waves in superheated dodecane. **Journal of Fluid Mechanics**, v.382, p.63-68, 1999.

SIMÕES-MOREIRA, J. R. **Aplicação da teoria das ondas de evaporação aos jatos evaporativos**. 1999. 145p. Tese (Livre-docência) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo. São Paulo, 1999.

SIMÕES-MOREIRA, J.R.; VIEIRA, M.M.; ANGELO, E. Highly expanded flashing liquid jets. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v.16, n.3, 2002.

SIMÕES-MOREIRA, J.R.; BULLARD, C. Pressure drop and flashing mechanisms in expansion devices. **International Journal of Refrigeration**. v.26, p.840-848, 2003.

THOMPSON, J.F.; SONI, B.K.; WEATHERILL, N.P. **Handbook of grid generation**. Boca Raton, Florida: CRC Press, 2000.

THOMPSON, P.A. **Compressible fluid dynamics**. 1988.

THOMPSON, P.A.; SULLIVAN, D.A. On the possibility of complete condensation shock waves in retrograde fluids. **Journal of Fluid Mechanics**, v.70, p.639-649, 1975.

VARGAFTIK, N. B. **Handbook of physical properties of liquid and gases: pure substances and mixtures**. 3.ed. New York: Begell House, 1996. 1358p.

VIEIRA, M.M. **Estudo experimental de jatos evaporativos**. 1999. 228p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, 1999.

VIEIRA, M.M. **Análise da dinâmica dos jatos evaporativos de iso-octano superaquecido**. 2004. Tese (Doutorado) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, 2004. (Em preparação).

WATANABE, T. et al. A mechanistic model for the analysis of flashing phenomena. **Ann. Nuclear Energy**, v.23, p.801-811, 1996.

WEISMANN, J.; CHEN, Z.; GOVIND, R. Discharge of a saturated liquid through a relief valve. **Multi-Phase Flow and Heat Transfer III**. Part A: Fundamentals, p.575-587, 1984.

WILDGEN, A.; STRAUB, J. The boiling mechanism in superheated free jets. **Journal of Multiphase Flow**, v.15, n.2, p.193-207, 1989.

WHITHAM, G.B. **Linear and nonlinear waves**. New York: Wiley, 1974. 636p.

WYLEN, G.V.; SONNTAG, R.; BORGNAKKE, C. **Fundamentos da termodinâmica clássica**. 4.ed. São Paulo: Edgard Blücher, 1995. 591p.

XU, S.; LIANG, W.; WANG, S. Experimental studies on orifice behavior and two-phase flow in flash chamber. **Desalination**, v.150, p.93-98, 2002.

APÊNDICE I. ROTINAS DO PROGRAMA DE DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES PROP

O programa PROP resolve a equação de estado de Lee-Kesler e também utiliza a teoria das propriedades residuais para o cálculo das demais propriedades termodinâmicas. Foi desenvolvido para uso em conjunto com o programa ShoWPhasT2D (e também pelo programa unidimensional que utiliza a técnica do falso transitório), contudo, construído de modo independente e modular para utilização em outras simulações e programas, visando auxiliar na solução de problemas que necessitem da determinação das propriedades termodinâmicas com precisão.

As sub-rotinas que compõe o programa PROP são:

PREP, LEEKESLER, ESTIMATIVA, DEPARTURE, RTSAFE, FUNCDC, PRESSAT, CALORESPI e CALORESPPM.

As entradas, saídas e chaves do programa de propriedades foram descritas brevemente na Seção 4.2 do Capítulo 4. A sub-rotina PROP trata de uma busca das propriedades pressão e temperatura que satisfazem o par de propriedades termodinâmicas fornecidas inicialmente. Se a entrada for temperatura e entropia específica, por exemplo, correspondente a opção de chave ICHAV = 3, a sub-rotina PROP executa uma procura de qual par temperatura e pressão obtém exatamente aquela entropia específica inicialmente declarada.

A sub-rotina PREP determina, a partir das propriedades temperatura e pressão o estado termodinâmico, se líquido comprimido, bifásico ou vapor superaquecido (valor da chave IE). Ela utiliza a sub-rotina LEEKESLER que calcula o volume específico, a entalpia específica e a entropia específica para um dado par temperatura, pressão, contudo também deve ser informado o estado em que se encontra a substância (chave IE).

A Fig.I.1 mostra o diagrama de blocos para a sub-rotina PREP, e a Fig.I.2 o diagrama de blocos para a sub-rotina PREP.

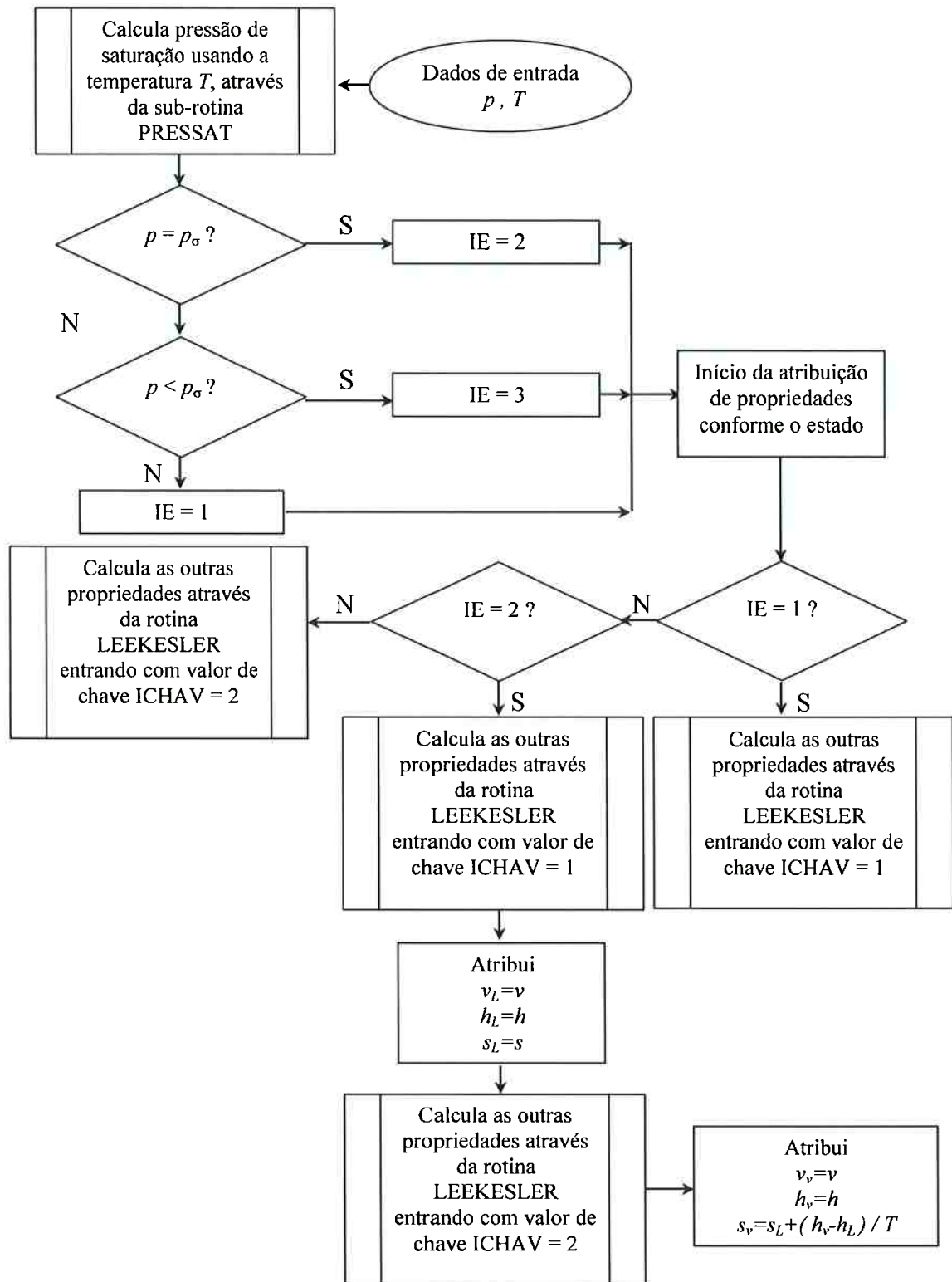


Figura I.1 Diagrama de blocos para a sub-rotina PREP.

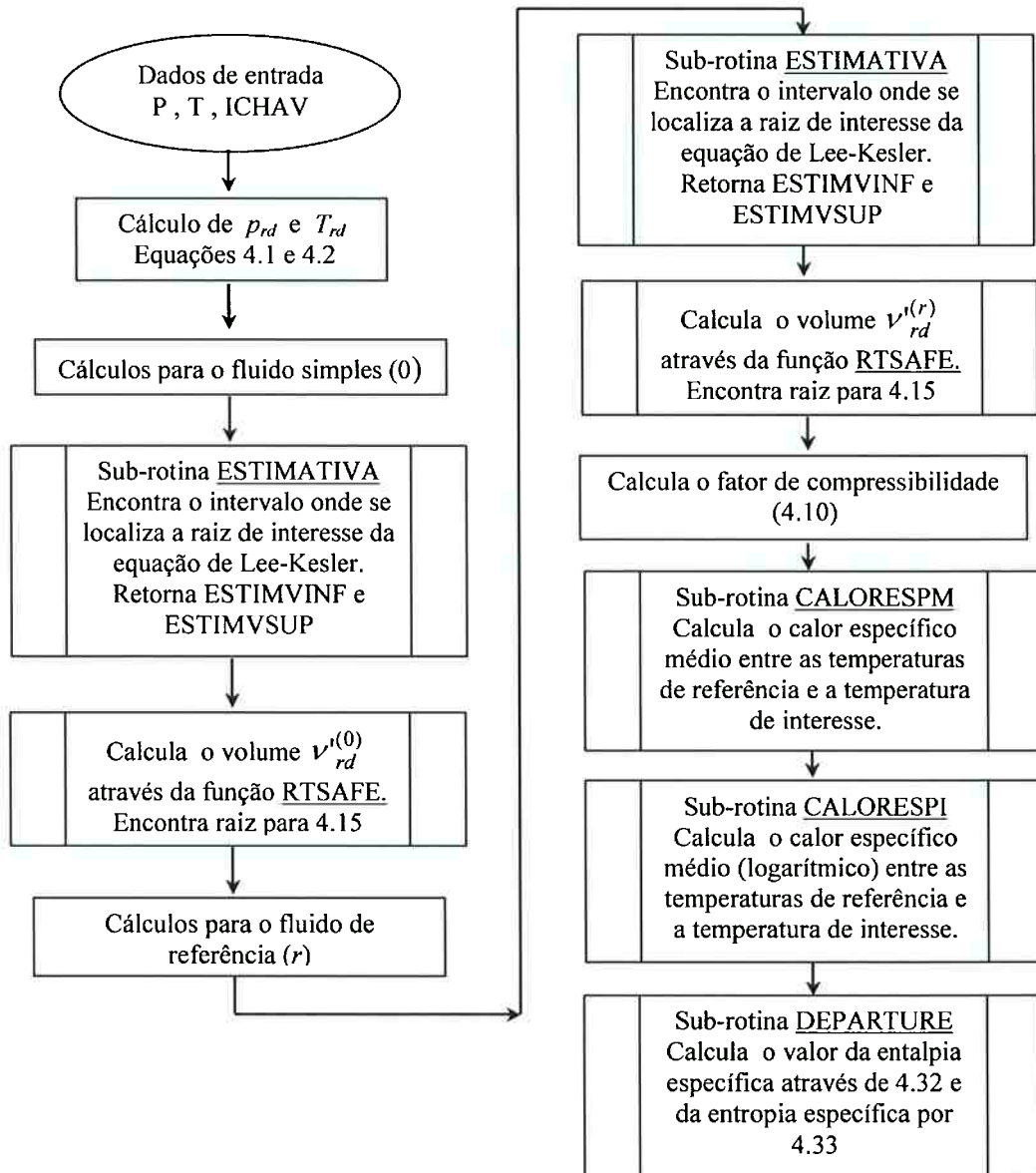


Figura I.2 Diagrama de blocos para a sub-rotina LEEKESLER

A sub-rotina ESTIMATIVA, usada pela sub-rotina LEEKESLER retorna o intervalo onde existe uma raiz para a equação de Lee-Kesler. Tratando-se de uma equação de estado cúbica, a equação de Lee-Kesler possui mais de uma raiz. Na entrada de dados da rotina ESTIMATIVA existe uma chave (ICHAVE) indicando à rotina qual raiz selecionar dentre as possíveis soluções. Para ICHAVE = 1 a rotina começa a pesquisa pela raiz iniciando o processo na região do estado líquido, caso ICHAVE = 2 a rotina inicia a pesquisa da raiz pela condição de vapor. Entre os dados de entrada encontra-se a temperatura reduzida, a pressão reduzida e um valor de início de pesquisa, que de fato é um valor de limite superior para a pesquisa, quando ICHAVE vale dois.

A sub-rotina ESTIMATIVA é, portanto, uma ferramenta que garante o encontro da raiz da equação de Lee-Kesler. Para um cálculo menos preciso, poder-se-ia utilizar apenas a rotina ESTIMATIVA para encontrar a raiz, desde que o incremento de pesquisa DELTA fosse relativamente pequeno. Para a solução proposta, o incremento DELTA pode ter valor comparativamente grande, pois, os valores retornados (ESTIMVINF e ESTIMVSUP) alimentam uma rotina de cálculo mais robusta, precisa e de convergência mais rápida, chamada função RTSAFE, que de fato encontra a raiz desejada.

A função RTSAFE é genérica e utiliza o método da dicotomia combinado ao método de Newton-Raphson de solução de equações não lineares, para encontrar as raízes da equação de Lee-Kesler. A rotina foi retirada de Press e outros (1992) e também é alimentada por uma sub-rotina. A Fig.I.3 ilustra o diagrama de blocos da sub-rotina ESTIMATIVA.

Finalmente, a função CALORESPM calcula o calor específico médio para uma faixa de temperaturas e a função CALORESPI calcula o calor específico médio logarítmico. Propriedades como pressão crítica, temperatura crítica, entre outras são obtidas em um banco de dados retirado de Reid (1987) e lidas pela rotina REID.

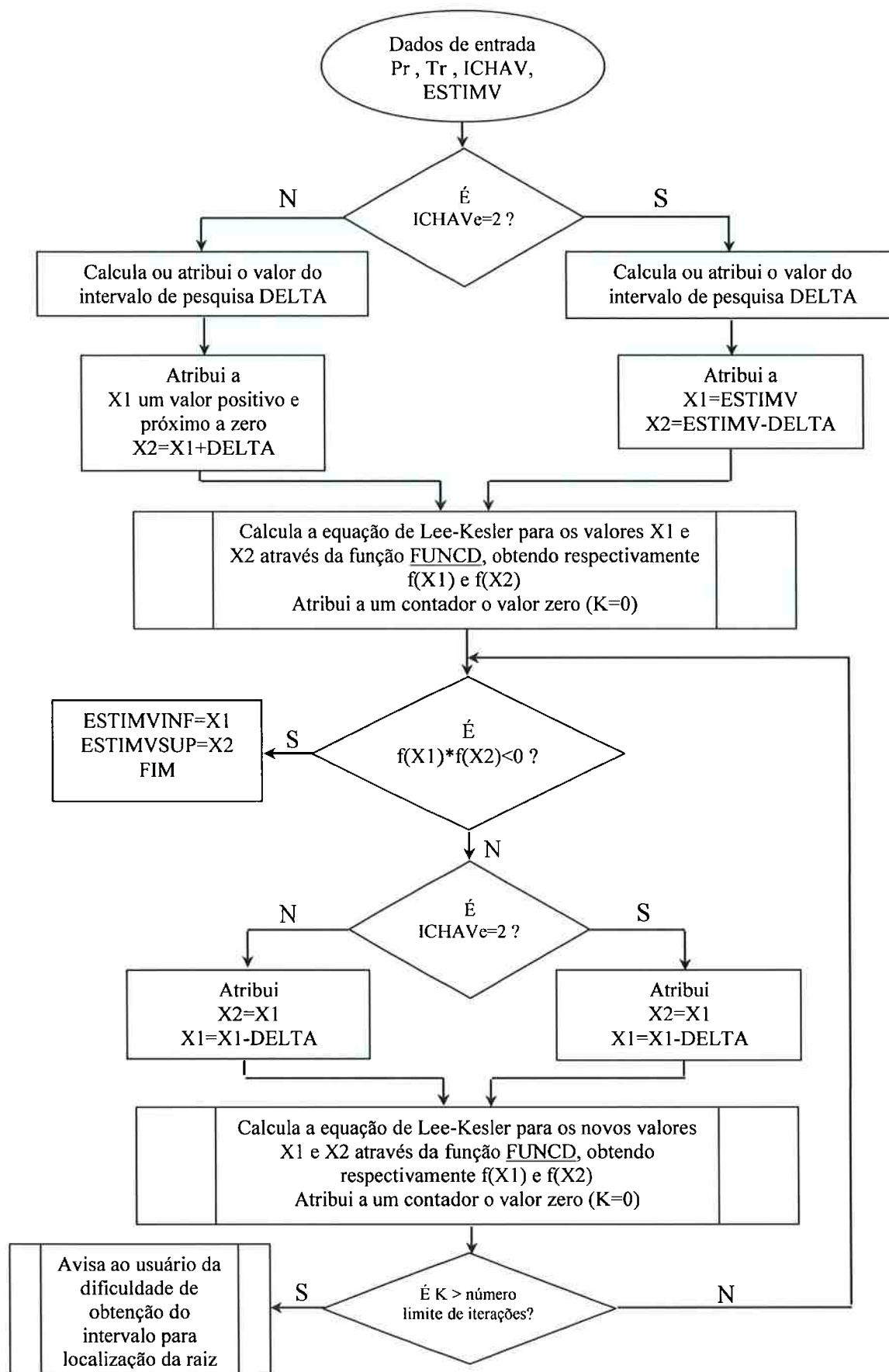


Figura I.3 Diagrama de blocos para a sub-rotina ESTIMATIVA

APÊNDICE II. MODELO UNIDIMENSIONAL (FALSO TRANSITÓRIO)

Neste apêndice será apresentado o modelo unidimensional que utiliza a técnica do falso transitório para determinação de todas as grandezas e propriedades pós-onda de evaporação durante a expansão da mistura bifásica. O motivo da apresentação de tal modelo é a justificativa da utilização no modelo bidimensional da técnica da marcha à jusante ao invés do falso transitório.

II.1 Aspectos gerais

A expansão da mistura bifásica é tratada de modo radial (hemisférica) assim como no modelo unidimensional do tipo marcha à jusante de Simões-Moreira (1999). Contudo, as equações de conservação são escritas para o escoamento transitório e na forma conservativa que possibilita uma solução numérica mais estável (mais detalhes sobre a forma conservativa são discutidos no Capítulo 7 na Seção 7.3). O sistema de equações formado pelas equações de conservação ainda possui comportamento hiperbólico, contudo, com relação ao tempo e não para a coordenada espacial r . São mantidas todas as hipóteses simplificadoras citadas no Capítulo 7 Seção 7.1.

II.2 Sistema de equações

II.2.1 Equação da conservação de massa

A equação da conservação de massa na forma unidimensional é multiplicada pela área do hemisfério (A_h), adquirindo o formato final para utilização no método numérico:

$$\frac{\partial(\rho A_h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho A_h V_r)}{\partial r} = 0. \quad (\text{II.1})$$

II.2.2 Equação da conservação da quantidade de movimento

A equação da conservação da quantidade de movimento unidimensional é multiplicada pela área do hemisfério:

$$\rho A_h \frac{\partial V_r}{\partial t} + \rho A_h V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} = -A_h \frac{\partial p}{\partial r}. \quad (\text{II.2})$$

A equação anterior não está na forma conservativa desejada para a equação de conservação da quantidade de movimento. Duas identidades são utilizadas no intuito de escrevê-la na forma conservativa, são elas:

$$\rho A_h \frac{\partial V_r}{\partial t} = \frac{\partial(\rho A_h V_r)}{\partial t} - V_r \frac{\partial(\rho A_h)}{\partial t}, \text{ e} \quad (\text{II.3})$$

$$\rho A_h V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} = \frac{\partial(\rho A_h V_r^2)}{\partial r} - V_r \frac{\partial(\rho A_h V_r)}{\partial r}. \quad (\text{II.3}')$$

Substituindo (II.3) e (II.3') na equação da conservação da quantidade de movimento (II.2), tem-se:

$$\frac{\partial(\rho A_h V_r)}{\partial t} - V_r \frac{\partial(\rho A_h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho A_h V_r^2)}{\partial r} - V_r \frac{\partial(\rho A_h V_r)}{\partial r} = -A_h \frac{\partial p}{\partial r}. \quad (\text{II.4})$$

Utilizando a equação da conservação de massa (II.1) é possível encontrar a forma final para utilização no método de solução numérica:

$$\frac{\partial(\rho A_h V_r)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho A_h V_r^2)}{\partial r} = -A_h \frac{\partial p}{\partial r}. \quad (\text{II.5})$$

II.2.3 Equação da conservação de energia

A equação da conservação da energia unidimensional é multiplicada pela área do hemisfério:

$$A_h \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V_r^2}{2} \right) \right] + \frac{A_h}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \rho V_r \left(e + \frac{V_r^2}{2} \right) + r^2 p V_r \right] = 0. \quad (\text{II.6})$$

Cuja apresentação final para utilização pelo método numérico, após manipulações é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho A_h \left(e + \frac{V_r^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho A_h V_r \left(e + \frac{V_r^2}{2} \right) + p A_h V_r \right] = 0. \quad (\text{II.7})$$

A apresentação das equações (II.1), (II.5) e (II.7) segue um padrão semelhante, o que faz com que possamos escrever o sistema que representam de um modo genérico:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial r} = B. \quad (\text{II.8})$$

As letras U , F e B são vetores do tipo coluna e têm três linhas. Cada qual representando um termo das equações que formam o sistema (conservação de massa, conservação da quantidade de movimento na direção r e da conservação da energia, respectivamente). Deste modo U , F e B são:

$$U = \begin{Bmatrix} \rho A_h \\ \rho A_h V_r \\ \rho A_h \left(e + \frac{V_r^2}{2} \right) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{Bmatrix}, \quad (\text{II.9})$$

$$F = \begin{Bmatrix} \rho A_h V_r \\ \rho A_h V_r^2 \\ \rho A_h V_r \left(e + \frac{V_r^2}{2} \right) + p A_h V_r \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{Bmatrix}, \text{ e} \quad (\text{II.10})$$

$$B = \begin{Bmatrix} 0 \\ -A_h \frac{\partial p}{\partial r} \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{Bmatrix}. \quad (\text{II.11})$$

O sistema de equações é classificado como quase linear, pois, suas derivadas são de primeira ordem e não há produtos entre elas. Têm comportamento matemático

hiperbólico em relação ao tempo o que possibilita uma solução iterativa do tipo marcha temporal ou conhecida como falso transitório.

II.3 Método numérico de solução

O método de diferenças finitas de MacCormack, como já citado, é um método explícito e possui precisão de segunda ordem. O método é dividido em duas etapas, uma etapa de predição e outra de correção (“predictor - corrector”). A discretização do campo do escoamento se dá conforme ilustrado pela Fig.II.1, por uma malha do tipo unidimensional, composta por uma quantidade pré-determinada de pontos representativos de sucessivas “casca” hemisféricas.

A técnica do falso transitório consiste, em a partir de uma estimativa inicial (correspondente a $t = 0$ s) das grandezas e propriedades para todos os pontos da malha, realizar iterações sucessivas no tempo para recálculo das mesmas propriedades e grandezas. Os valores de tais propriedades e grandezas, decorridos um certo período de tempo, convergirão para a solução de regime permanente. A convergência se dará quando o tempo for suficientemente grande para estabilizar a solução, indicado pela pequena variação das mesmas dentro de uma certa tolerância pré-estabelecida, conhecida como critério de parada. A marcha temporal pode ser observada esquematicamente na Fig.II.1.

O avanço no tempo indicado na Fig.II.1 genericamente como Δt_n é calculado conforme a Seção II.3.7 e os procedimentos de predição e correção são mostrados a seguir.

O número de pontos que fazem parte da malha (np) tem influência sobre os resultados obtidos pelo método numérico, bem como a distância para posicionamento das condições de contorno denominadas “ao longe” que são as condições do reservatório. Estudos sobre a influência do tamanho da malha e da posição do ponto representante das condições do reservatório podem ser vistos na Seção II.4 deste capítulo.

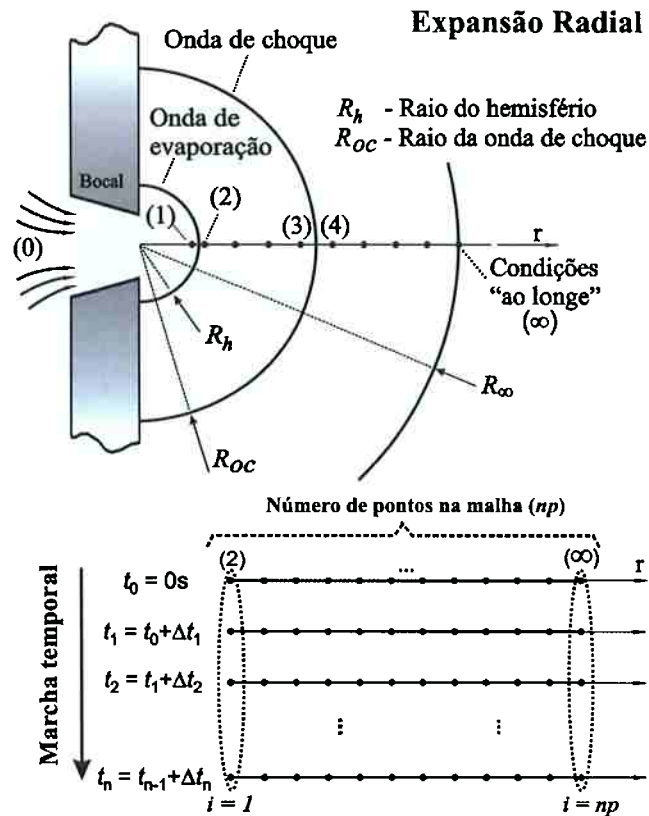


Figura II.1 Esquema da marcha temporal para o modelo unidimensional.

Como são conhecidas as propriedades para $t = 0s$ (veja Seção II.3.5), usando uma expansão em série de Taylor truncada é possível calcular o valor da variável de fluxo U no próximo “instante” ($t + \Delta t$) para todos os pontos da malha (usando i como contador dos pontos, este assumirá valores desde $i = 1$ até $i = np$):

$$U_i^{t+\Delta t} = U_i^t + \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_m \Delta t + \overline{SF}_i^{t+\Delta t}. \quad (\text{II.12})$$

A derivada parcial da variável de fluxo U em relação ao tempo é uma média (m) conveniente que será calculada em duas etapas (predição e correção). O termo designado SF será explicado na Seção II.3.3 correspondente à viscosidade artificial. Assim:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_m = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)'_i + \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_i^{t+\Delta t} \right]. \quad (\text{II.13})$$

II.3.1 Etapa de predição

São conhecidas todas as propriedades e grandezas para o tempo t , desta forma é possível avaliar, usando diferenças finitas para frente a variação da variável de fluxo U em relação ao tempo para todos os pontos da malha usando as equações de conservação, ou seja, a equação geral discretizada:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)'_i = B'_i - \frac{F'_{i+1} - F'_i}{r_{i+1} - r_i}. \quad (\text{II.14})$$

É importante salientar que testes numéricos realizados pelo autor revelaram que, para calcular o termo B'_i para a equação da conservação da quantidade de movimento na direção r , não é recomendável o cálculo da diferencial da pressão em relação à coordenada r usando diretamente diferenças finitas do seguinte modo:

$$B'_i = (A_h)'_i \frac{p'_{i+1} - p'_i}{r_{i+1} - r_i}, \quad (\text{II.15})$$

pois, desestabiliza a solução numérica. A solução é escrever a pressão como função da densidade e da energia interna específica, ou seja, $p = p(\rho, e)$ e utilizar a regra da cadeia do cálculo para avaliar a variação da pressão na direção r :

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_e \frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{\partial p}{\partial e} \Big|_\rho \frac{\partial e}{\partial r}. \quad (\text{II.16})$$

Usando diferenças finitas para avaliar os termos da variação da densidade e da energia interna com a coordenada r :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial r}\right)'_i = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_e \frac{\rho'_{i+1} - \rho'_i}{r_{i+1} - r_i} + \frac{\partial p}{\partial e} \Big|_\rho \frac{e'_{i+1} - e'_i}{r_{i+1} - r_i}. \quad (\text{II.17})$$

A variação da pressão com a densidade e a variação da pressão com a energia interna mantidas energia interna e densidade constantes, respectivamente, podem ser obtidas através da equação de estado.

A variável de fluxo U pode ser estimada (em todos os pontos da malha unidimensional) para o tempo $t + \Delta t$ usando a expansão em série de Taylor truncada como segue:

$$\bar{U}_i^{t+\Delta t} = U_i^t + \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_i^t \Delta t + SF_i^t. \quad (\text{II.18})$$

O traço sobre a variável de fluxo indica que se trata de um valor intermediário que necessita ser corrigido. Encontrada a variável de fluxo, há a necessidade da decodificação, ou seja, a determinação das variáveis primitivas (velocidade na direção r , pressão, temperatura, título, energia interna específica e densidade). O procedimento para decodificação é descrito na Seção II.3.4 e se resume a solução do seguinte sistema não linear de equações:

$$\bar{U}_i^{t+\Delta t} = \left\{ \begin{array}{l} \overline{[\rho A_h]}_i^{t+\Delta t} \\ \overline{[\rho A_h V_r]}_i^{t+\Delta t} \\ \overline{\left[\rho A_h \left(e + \frac{V_r^2}{2} \right) \right]}_i^{t+\Delta t} \end{array} \right\}, \quad (\text{II.19})$$

obtendo:

$$\left(\bar{V}_r \right)_i^t, \left(\bar{V}_z \right)_i^t, \left(\bar{\rho} \right)_i^t, \left(\bar{p} \right)_i^t \text{ e } \left(\bar{e} \right)_i^t. \quad (\text{II.20})$$

Neste ponto são calculados os valores das outras variáveis de fluxo para o instante $t + \Delta t$, $\bar{F}_i^{t+\Delta t}$ e $\bar{B}_i^{t+\Delta t}$. Lembrando que a observação sobre o modo de obtenção da derivada da pressão em relação a coordenada r deve ser feito da seguinte maneira:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial r} \right)_i^{t+\Delta t} = \frac{\partial p}{\partial \rho} \bigg|_e \frac{\bar{\rho}_i^{t+\Delta t} - \bar{\rho}_{i-1}^{t+\Delta t}}{r_i - r_{i-1}} + \frac{\partial p}{\partial e} \bigg|_\rho \frac{\bar{e}_i^{t+\Delta t} - \bar{e}_{i-1}^{t+\Delta t}}{r_i - r_{i-1}}. \quad (\text{II.21})$$

II.3.2 Etapa de correção

Neste passo, obtém-se a derivada da variável de fluxo U em relação ao tempo através dos valores de $\bar{F}_i^{t+\Delta t}$ e $\bar{B}_i^{t+\Delta t}$ que foram calculados na etapa de predição com as variáveis primitivas preditas. Usando diferenças finitas para trás na equação geral (II.8) discretizada:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_i^{t+\Delta t} = \bar{B}_i^{t+\Delta t} - \frac{\bar{F}_i^{t+\Delta t} - \bar{F}_{i-1}^{t+\Delta t}}{r_i - r_{i-1}}. \quad (\text{II.22})$$

Finalizada a etapa de correção é possível o cálculo da derivada média da variável de fluxo U em relação ao tempo, obtida ponto a ponto através da média aritmética simples entre as equações (II.22) e (II.14) conforme apresentado em (II.13). Finalmente, a variável de fluxo U é calculada para a posição $t + \Delta t$ usando a equação (II.12). A última etapa do procedimento para o instante $t + \Delta t$ é a decodificação final da variável de fluxo U nas variáveis primitivas exatamente como realizado no final da etapa de predição.

II.3.3 Viscosidade artificial

A necessidade dos termos dissipativos nas equações de conservação discretizadas foi exposta na Seção 7.7.4 do Capítulo 7. Para o modelo unidimensional é usado:

$$(SF_\lambda)_i^t = \frac{C_x |p'_{i+1} - 2p'_i + p'_{i-1}|}{p'_{i+1} + 2p'_i + p'_{i-1}} \left[(U_\lambda)_{i+1}^t - 2(U_\lambda)_i^t + (U_\lambda)_{i-1}^t \right]. \quad (\text{II.23})$$

Para a etapa de predição. Onde λ é um contador que varia de 1 até 3 (representando os termos adicionados respectivamente às equações de conservação de massa, conservação de quantidade de movimento na direção r e conservação de energia) e C_x um adimensional que controla a influência da viscosidade artificial no escoamento. E para a etapa anterior a decodificação final:

$$\left(\overline{SF}_\lambda\right)_i^{t+\Delta t} = \frac{C_x \left| \bar{p}_{i+1}^{t+\Delta t} - 2\bar{p}_i^{t+\Delta t} + \bar{p}_{i-1}^{t+\Delta t} \right|}{\bar{p}_{i+1}^{t+\Delta t} + 2\bar{p}_i^{t+\Delta t} + \bar{p}_{i-1}^{t+\Delta t}} \left[\left(\overline{U}_\lambda\right)_{i+1}^{t+\Delta t} - 2\left(\overline{U}_\lambda\right)_i^{t+\Delta t} + \left(\overline{U}_\lambda\right)_{i-1}^{t+\Delta t} \right]. \quad (\text{II.24})$$

II.3.4 Decodificação da variável de fluxo U nas variáveis primitivas

Utilizando a equação (II.9) e supondo conhecidos os valores das variáveis de fluxo U_1 , U_2 e U_3 são diretamente obtidas a densidade, velocidade na direção r e a energia interna específica:

$$\rho = \frac{U_1}{A_h}, \quad (\text{II.25})$$

$$V_r = \frac{U_2}{U_1}, \text{ e} \quad (\text{II.26})$$

$$e = \frac{1}{U_1} \left(U_3 - \frac{U_2^2}{2U_1} \right). \quad (\text{II.27})$$

Todas as outras propriedades termodinâmicas podem ser calculadas (pelo programa PROP), pois são conhecidas duas propriedades termodinâmicas independentes: densidade e energia interna específica. Inicialmente é admitido que o estado termodinâmico é o de uma mistura bifásica, deste modo as relações apresentadas no Capítulo 7 podem ser utilizadas, são elas: (7.97), (7.98) e (7.99). Na equação (7.98) e (7.99) é possível isolar o título:

$$x = \frac{h - h_L}{h_v - h_L}, \text{ e} \quad (\text{II.28})$$

$$x = \frac{v - v_L}{v_v - v_L}. \quad (\text{II.29})$$

Dividindo a equação (II.28) pela equação (II.29) e substituindo a entalpia específica pela soma entre o produto da pressão e o volume específico com a energia interna específica:

$$e + pv - \frac{(h_v - h_L)}{(v_v - v_L)}(v - v_L) - h_L = 0. \quad (\text{II.30})$$

A equação (II.30) é uma equação não linear do tipo $\varphi(T)=0$, ou seja, dependente apenas da temperatura, haja vista que na saturação a pressão, as entalpias específicas do líquido e do vapor, assim como os volumes específicos do líquido e do vapor são funções exclusivas da temperatura e os valores da entalpia específica e da energia interna específica já foram determinados pelas equações (II.25) e (II.27). A solução da equação não linear apresentada utiliza o método de Newton-Raphson combinado ao método da dicotomia. Caso não haja raiz para a equação (II.30) ou o valor do título, obtido pelas equações (II.28) ou (II.29) logo após o cálculo da temperatura, for superior a unidade, indica que foi atingido o estado de vapor superaquecido. O programa PROP de propriedades é novamente utilizado com a chave seletora ICHAV = 5 conforme Tabela 4.2a (Seção 4.2 do Capítulo 2).

II.3.5 Distribuição das propriedades no instante inicial

As iterações dão início após o estabelecimento das propriedades para o instante inicial ($t=0s$). A rigor, qualquer que fosse a estimativa inicial, passadas um número muito grande de iterações (suficientes) a solução deveria convergir para o resultado final (solução para o regime permanente). Na prática a estimativa inicial para os pontos da malha não pode ter um valor qualquer. Por exemplo, se for admitida pressão ou temperatura nula para valor inicial a equação de estado utilizada não será capaz de ser resolvida, o código computacional retornará erros como divisão por zero ou número muito grande (“overflow”).

Segundo a literatura, para métodos como o utilizado neste capítulo, em que o objetivo é determinar o campo do escoamento e a posição da onda de choque, é preciso adotar previamente uma posição para a onda de choque, impondo desta maneira sua localização inicial. É esperado que a mesma se “movimente” durante as iterações e se posicione no local correto ao final dessas iterações. O código desenvolvido não exige esse posicionamento inicial, fato que pode ser considerado uma vantagem.

O estado (2) – que se encontra à jusante da onda de evaporação – está completamente determinado pela solução de C-J, suas propriedades e grandezas são fixas ao longo das iterações, em contrapartida, para o estado denominado ao longe

(∞) a única grandeza fixa (imposta pelas condições da simulação) é a pressão. Como estimativa inicial é admitida uma distribuição linear de pressões entre o estado (2) e o estado ao longe (∞), também é suposto que o escoamento (ao menos inicialmente) permanecerá como mistura bifásica durante todo o trajeto entre (2) e (∞) e que a taxa de mudança de fração de massa de vapor na mistura bifásica é linear, admitido um valor para o título na posição ao longe. A Fig.II.2 exemplifica a distribuição das duas propriedades estimadas inicialmente considerando essa discussão. Todas as outras propriedades termodinâmicas podem ser obtidas já que a temperatura é função da pressão e densidade (ou volume específico), entalpia, energia interna são função da temperatura e do título. A distribuição de velocidade pode ser conseguida através da equação da conservação de massa para cada ponto:

$$V_r = \frac{\dot{m}}{\rho A_h}. \quad (\text{II.31})$$

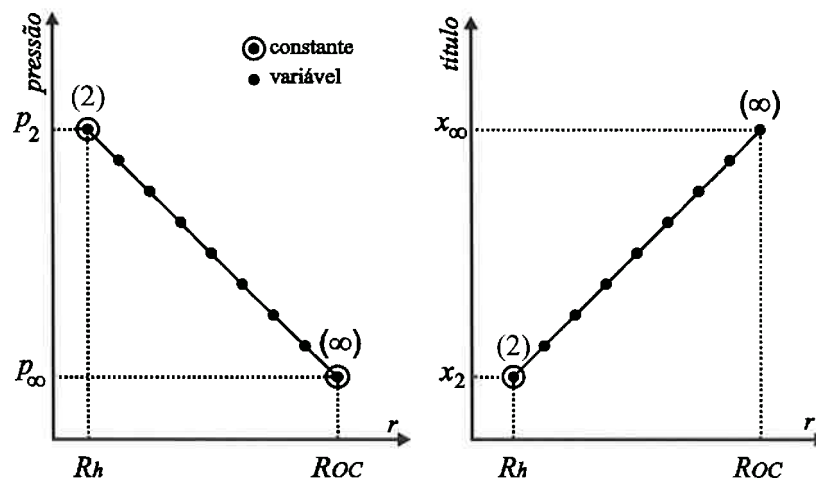


Figura II.2 Estimativa da distribuição linear inicial da pressão e do título para o instante $t = 0$ s.

II.3.6 Condições de contorno

As propriedades e grandezas, como citado, permanecem inalteradas para o ponto (2) durante as iterações no tempo. Do mesmo modo a pressão para o estado ao longe também se mantém fixa, o que não é verdade para as outras propriedades e grandezas do referido ponto. A justificativa da variação de algumas propriedades e da manutenção de outras pode ser obtida através da análise do comportamento matemático das equações diferenciais parciais, utilizando o conceito de superfícies características.

Duas linhas características partem para dentro do domínio do escoamento emanadas do ponto (2), pois sua velocidade é sônica (e o escoamento é invíscido transitório), por esse motivo duas variáveis independentes devem, obrigatoriamente serem fixadas (veja Fig.II.3). Escolhendo entre as variáveis independentes V_r , ρ e e , a densidade e a energia interna específica, a velocidade também é indiretamente imposta pois há necessidade da observação da equação da conservação de massa.

O ponto $i=np$ reconhecidamente subsônico contribui apenas com uma linha característica (veja Fig.II.3) na direção do campo do escoamento que está sendo analisado, devendo, deste modo, manter uma variável independente imutável. É evidente que tal propriedade é a pressão (ao longe). Todas as outras propriedades e grandezas para $i=np$ terão seus valores atualizados a cada passo no tempo, a cada iteração. A densidade será obtida por extrapolação linear dos pontos anteriores a $i=np$, que são $i=np-1$ e $i=np-2$:

$$\rho_{i=np} = 2\rho_{np-1} - \rho_{np-2}. \quad (\text{II.32})$$

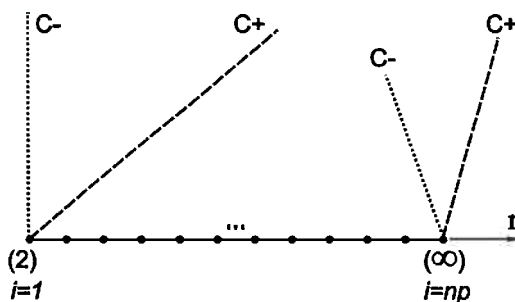


Figura II.3 Linhas características dos pontos $i=1$ e $i=np$. C+ é linha característica emitida para “direita” e C- para a “esquerda”.

A velocidade é estimada através da equação da conservação de massa (II.31) e as demais propriedades termodinâmicas pela equação de estado. O teste a ser realizado para determinação do estado (se bifásico ou vapor superaquecido) admite previamente que o estado é bifásico e a temperatura de saturação pode ser obtida através da pressão p (programa PROP), bem como as densidades do líquido saturado e do vapor saturado. Assim, se $\rho > \rho_v$ o estado é mesmo bifásico e o título pode ser obtido através da expressão:

$$x = \frac{\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_L}}{\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_L}}. \quad (\text{II.33})$$

Também estarão determinadas as propriedades, e conseqüentemente o estado termodinâmico se a densidade for igual à densidade do vapor superaquecido e, neste caso, o título por definição será unitário.

Caso contrário, ou seja, $\rho < \rho_v$ foi atingido o estado de vapor superaquecido e a temperatura e outras propriedades termodinâmicas deverão ser encontradas através do programa PROP.

II.3.7 Determinação do passo no tempo (Δt)

De acordo com o critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (para mais detalhes veja Anderson, 1995) o valor máximo para o passo no tempo Δt na marcha, deve ser menor ou no máximo igual ao tempo necessário para uma perturbação movendo-se à velocidade do som (relativa) percorrer a distância entre dois pontos adjacentes da malha (veja Fig.II.4).

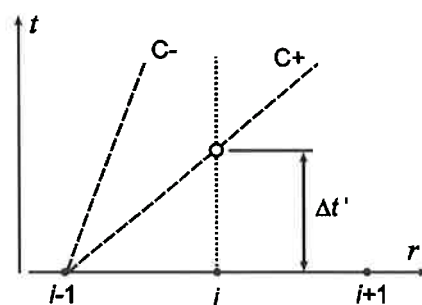


Figura II.4 Ilustração do passo no tempo para um ponto (i) da malha

Examinando os pontos genéricos i , $i+1$ e $i-1$ no interior da malha e sabendo que a linha característica emitida para a esquerda (C-) e para a direita (C+) têm respectivamente inclinação:

$$\frac{dr}{dt} = V_r - c, e \quad (\text{II.34})$$

$$\frac{dr}{dt} = V_r + c. \quad (\text{II.35})$$

onde, c é a velocidade do som local. A Fig.II.4 mostra dois pontos genéricos no interior da malha. Para todos os pontos devem ser calculados os $\Delta t'$ da seguinte maneira:

$$\Delta t' = Courant \frac{\Delta r}{(V_r + c)}, \quad (\text{II.36})$$

onde, *Courant* é um adimensional (cujo valor é inferior a unidade). Sendo que o valor do passo a ser implementado deve ser menor que o menor deles, para garantir o critério de estabilidade.

$$\Delta t = \text{menor}(\Delta t'_1, \Delta t'_2, \dots, \Delta t'_{np}). \quad (\text{II.37})$$

II.4 Resultados

A Tabela II.1 apresenta o resultado da simulação utilizando o modelo unidimensional do falso transitório para um caso selecionado (2349XXX) e também (para comparação) as repostas obtidas pelo mesmo caso usando o modelo unidimensional de Simões-Moreira (1999). O índice (3) e (4) indicam respectivamente as condições à montante e jusante da onda de choque.

Tabela II.1 Simulação usando o modelo unidimensional do falso transitório (FT) e o modelo de Simões-Moreira (SM) para o caso 2349XXX com pressão na câmara de injeção de 540 Pa.

| Modelo | C_x | <i>Courant</i> | p_3 (Pa) | T_3 (°C) | V_{r3} (m/s) | x_3 | M_3 | p_4 (Pa) | T_4 (°C) | V_{r4} (m/s) | x_4 | M_4 | R_{oc} (mm) |
|--------|-------|----------------|---------------|---------------|-------------------|-------|-------|---------------|---------------|-------------------|-------|-------|------------------|
| FT | 0,2 | 0,2 | 67,0 | -44,6 | 330,1 | 0,562 | 3,39 | 520 | -18,35 | 32,7 | 0,582 | 0,31 | 11,73 |
| SM | - | - | 40,8 | -42,6 | 329,5 | 0,596 | 3,34 | 446 | -16,8 | 38,5 | 0,609 | 0,35 | 11,83 |

As fotografias de Vieira (2004) para essa condição experimental mostraram ondas de choque de dimensões $r_1 = 6,5$ mm e $r_2 = 7,6$ mm. O modelo de Simões-Moreira (1999) obtém uma resposta muito semelhante ao modelo unidimensional do falso transitório, contudo, se compararmos às dimensões medidas nas fotos de Vieira, a dimensão da onda de choque calculada pelo modelo é muito acima do real.

De modo a estudar o comportamento do escoamento do jato evaporativo é apresentado na Fig.II.5 um gráfico que expõe a típica variação de algumas propriedades ao longo da expansão da mistura bifásica desde a posição à jusante da onda de evaporação (2) até o estado denominado “ao longe” (∞) para o caso 2349XXX.

A posição do estado ao longe, ou seja, o valor de R_∞ foi admitido à 40 mm do bocal de injeção, aproximadamente 260 vezes o raio do bocal de injeção (R_b). A onda de choque para tal simulação foi obtida em um raio R_{oc} igual a 11,73 mm ou a 76,17 raios do bocal de injeção (cujo valor é de 0,154 mm).

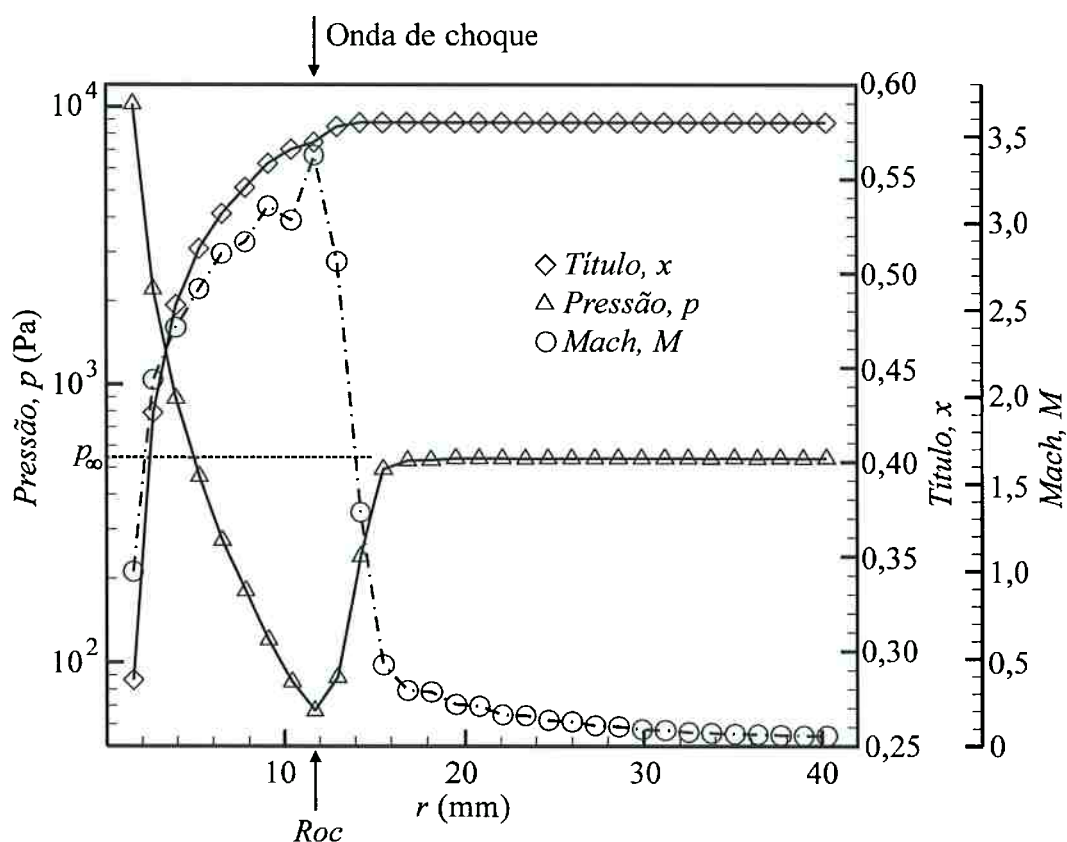


Figura II.5 Variação da pressão, título e número de Mach como função da posição radial para o caso 2349XXX.

Serão analisados alguns itens importantes ao longo dos próximos parágrafos no intuito de identificar quais parâmetros, cujos valores são impostos na simulação, têm influência sobre os resultados e suas implicações.

Como o valor de R_∞ foi imposto, é possível cogitar o fato da posição da onda de choque e do campo do escoamento dependerem ou mesmo serem influenciados por seu valor. Uma série de simulações numéricas foi realizada com diferentes posições do estado ao longe, mantendo o tamanho da malha (mantendo a distância entre os pontos da malha, aumentando apenas o número de pontos). Valores entre $90R_b \leq R_\infty \leq 500R_b$ não revelaram diferenças significativas quanto a posição da onda de choque no escoamento já citado ($76,17R_b$). Caso o valor seja inferior à $90R_b$, há decréscimos significativos de R_{oc} à medida que o estado ao longe se aproxima da posição da onda de choque. Para valores do posicionamento do estado ao longe superiores à $500R_b$, apesar dos mesmos não terem sido verificados, espera-se que não influenciem na posição da onda de choque.

A Fig.II.6a ilustra a variação da pressão para todos os pontos da malha para algumas iterações selecionadas (para o teste 2349XXX). A linha traço ponto indica a estimativa inicial, linear, que aparece como uma curva pela apresentação logarítmica da escala de pressões. A solução de regime permanente está representada por linha tracejada e é alcançada neste caso após dez mil iterações (a solução completa contendo todas as outras propriedades pode ser vista na Fig.II.5). A Fig.II.6b exemplifica a variação da pressão durante as iterações para o décimo terceiro ponto da malha ($i = 13$, escolhido aleatoriamente). Fica evidente a grande variação da pressão (e em consequência das outras propriedades) ocasionada principalmente pela estimativa inicial para todas as grandezas bastante distante da solução final. A onda de choque “surge” nas primeiras iterações como uma descontinuidade (próxima do ponto 2), um salto de pressão, e se “movimenta” até a posição definitiva (veja Fig.II.6a). A Fig.II.6a contém apenas algumas iterações no intuito de manter a clareza de apresentação dos gráficos.

O tempo de processamento para o caso em estudo foi de aproximadamente 86 horas em um servidor COMPAQ ALPHA DIGITAL DS20E. Para cada ponto da malha o procedimento (“predictor-corrector”) demora em média um segundo.

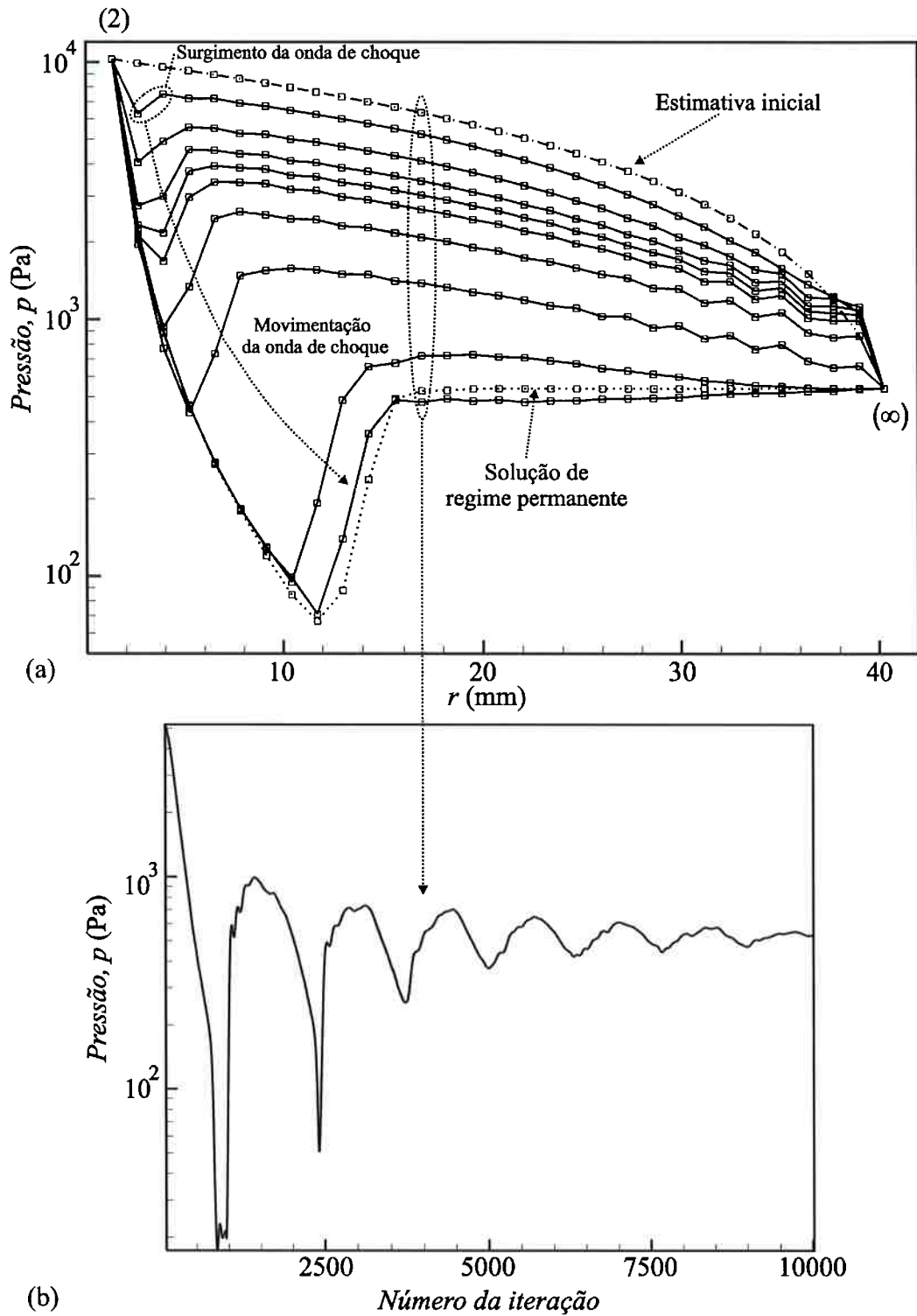


Figura II.6 (a) Variação da pressão para todos os pontos para algumas iterações selecionadas e (b) Variação da pressão para o ponto $i=13$ da malha para o Teste 2349XXX.

A máxima variação de pressão por iteração entre dois tempos consecutivos para um mesmo ponto, na malha em sua totalidade pode ser observada para a simulação em questão (caso 2349XXX) no gráfico da Fig.II.7. Matematicamente isto é dado por:

$$\Delta p_i = p_i^{t+\Delta t} - p_i^t, \text{ e} \quad (\text{II.38})$$

$$\Delta p_{\max} = \text{máximo}(\Delta p_1, \Delta p_2, \dots, \Delta p_{np}). \quad (\text{II.39})$$

Os pontos de maior variação por passo concentram-se próximo da localização da onda de choque.

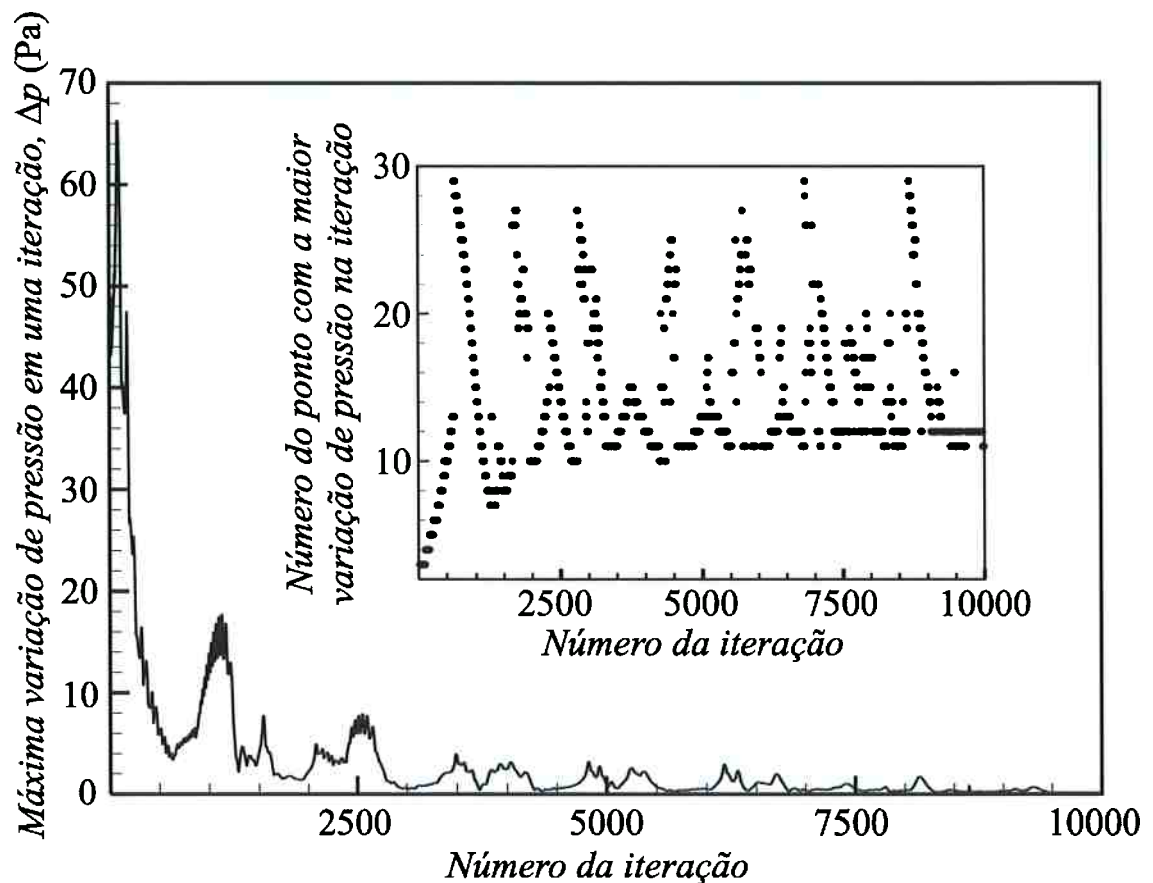


Figura II.7 Máxima variação de pressão por iteração para o caso 2349XXX.

Para esse tipo de malha unidimensional, a distância entre pontos da mesma tem grande influência sobre os resultados obtidos. Inicialmente para o caso teste 2349XXX foram distribuídos 31 pontos sobre a malha espaçados equitativamente, ou seja, guardando entre si a mesma distância. O raio do hemisfério de evaporação é $R_h = 1,345$ mm e o raio do estado ao longe $R_\infty = 40$ mm, desta forma, a distância entre dois pontos consecutivos da malha é de 1,2885 mm. Experimentos comprovam que as ondas de choque de um modo geral tem localização bem determinada no escoamento (regime permanente) e sua espessura é da ordem de décimos de milímetros. Na Fig.II.8 é possível notar, para a curva em linha tracejada da simulação para o caso 2349XXX (a mesma curva da variação de pressão com a posição radial da Fig.II.5), que a espessura da onda de choque obtida possui uma espessura comparativamente alta. Neste caso, a espessura da onda de choque é da ordem de $esp_{nr} = 3,89$ mm (entre os pontos $i = 9$ e $i = 12$), ou seja, aproximadamente $25,26 R_b$, valor que não pode ser considerado desprezível frente às dimensões em estudo. Este é um dos problemas apresentados pelos métodos numéricos, de distribuir o elevado gradiente das propriedades no escoamento através da onda de choque para diversos pontos, “espalhando” dessa maneira a onda de choque. Dobrando o número de pontos na malha, ou seja, diminuindo a distância entre os pontos consecutivos de 1,298 mm para 0,6489 mm é possível notar a diminuição da espessura da onda de choque para $esp_r = 2,59$ mm ou $16,82 R_b$ e a mudança de posição da onda de choque do raio $R_{oc} = 11,73$ mm para $R_{oc} = 11,1$ mm. Refinando ainda mais a malha não são observadas mudanças significativas se comparadas as repostas àquela apresentada pela malha de distância entre os pontos de 0,6489 mm. A Fig.II.8 mostra os resultados para duas malhas, uma refinada outra não refinada.

A quantidade de iterações para atingir o regime permanente no caso da malhas mais refinadas é obviamente maior do que nas malhas mais esparsas. Não somente pelo fato das mesmas apresentarem um maior número de pontos mas também pelo fato da atualização do tempo, ou do passo no tempo (Δt) ser menor devido à menor distância (Δr) entre os mesmos.

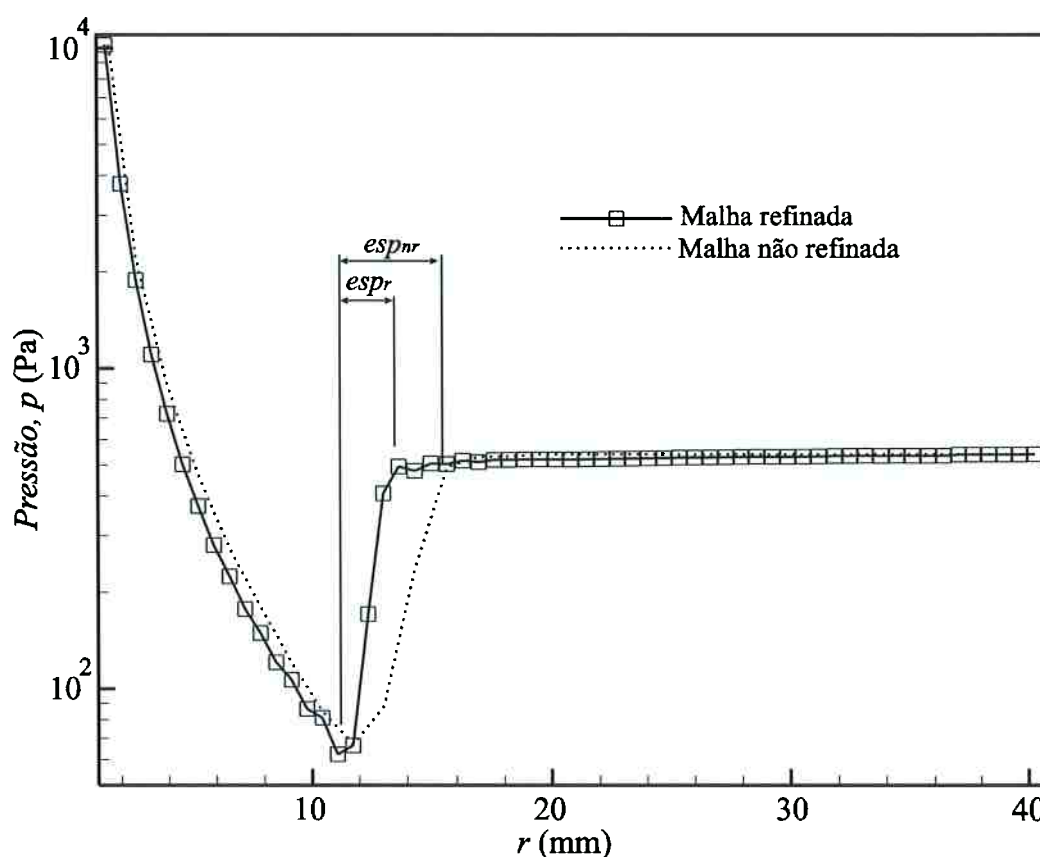


Figura II.8 Comparação entre duas distribuições de pontos na malha para caso 2349XXX.

II.5 Comentários

O modelo unidimensional que utiliza a técnica do falso transitório mostrou-se limitado quanto à determinação da posição da onda de choque e sua forma, pois assim como o modelo de Simões-Moreira, encontra uma dimensão da onda de choque no escoamento maior do que a real. Uma das explicações para tal fato pode ser a impossibilidade de simulação de condições de contorno mais complexas. Experimentos indicam que a onda de choque tem formatos mais complexos que, evidentemente, não podem ser capturados em um modelo unidimensional.

Quanto à técnica de solução numérica (falso transitório – Método de MacCormack) é sabido que para os escoamentos compressíveis invíscidos obtém solução adequada em um tempo computacional razoável. Para o escoamento do jato evaporativo, por causa da necessidade de utilização de uma equação de estado realista (como a equação de Lee-Kesler), o tempo computacional é em muito

incrementado. O procedimento de decodificação, neste caso, não é direto. Por esse motivo, o uso da técnica do falso transitório foi abandonada em favor da técnica da marcha à jusante para o escoamento do jato evaporativo.

O mesmo código (unidimensional), usado para os cálculos expostos neste apêndice, foi testado (com algumas mudanças) para simular o escoamento quase unidimensional dentro de um bocal admitindo escoamento de gás perfeito e a onda de choque pode ser encontrada em questão de segundos, simplesmente pela facilidade na operação de decodificação.

APÊNDICE III. MÁXIMA VAZÃO MÁSSICA ATRAVÉS DA ONDA DE EVAPORAÇÃO

Neste apêndice é deduzida uma expressão que relaciona as propriedades pressão e volume específico à jusante da onda de evaporação com o fluxo de massa normal por unidade de área, quando a solução à jusante da onda de choque é a solução de Chapman-Jouguet. A dedução foi desenvolvida por Simões-Moreira (1999).

A solução de C-J é a solução de máxima vazão mássica, se fixo um estado à montante da onda de evaporação, fato amplamente discutido no texto principal desta dissertação. Matematicamente essa condição pode ser traduzida como:

$$d J^2 = 0 \quad (\text{III.1})$$

Aplicada à equação de Rayleigh (5.39):

$$d \left\{ - \frac{[p]}{[\nu]} \right\} = 0 \quad (\text{III.2})$$

As seguintes manipulações matemáticas são necessárias:

$$- \frac{d \{ [p] \}}{[\nu]} - [p] d \left\{ \frac{1}{[\nu]} \right\} = 0 \quad (\text{III.3})$$

$$\frac{d \{ p_2 - p_1 \}}{[\nu]} + [p] d \left\{ \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \right\} = 0 \quad (\text{III.4})$$

O estado 1 (à montante) é fixo, portanto:

$$\frac{d p_2}{\{ \nu_2 - \nu_1 \}} + [p] \{ \nu_2 - \nu_1 \}^{-2} d \nu_2 = 0 \quad (\text{III.5})$$

Finalmente:

$$d \nu_2 = - \frac{1}{J_{C-J}^2} d p_2 \quad \text{ou} \quad \frac{d \nu_2}{d T_2} = - \frac{1}{J_{C-J}^2} \frac{d p_2}{d T_2} \quad (\text{III.6})$$

APÊNDICE IV. TESTES DO PROGRAMA SHOCK WAVES WITH PHASE TRANSITION TWO-DIMENSIONAL (ShoWPhasT2D)

Neste apêndice, o programa ShoWPhasT2D que calcula o escoamento pós-onda de evaporação é testado para casos de escoamento compressível supersônico relatados na literatura para verificação da acuidade e validação do mesmo.

Os casos escolhidos podem ser encontrados em Anderson (1990). São escoamentos supersônicos de ar:

- 1) Escoamento supersônico sobre um canto (com reflexão de onda de choque em uma parede sólida);
- 2) Escoamento de Prandtl-Meyer (Leque de expansão);
- 3) Escoamento sobre uma peça em forma de diamante;

A Fig.IV.1 apresenta a solução para o primeiro caso teste. As condições do escoamento ou dados de entrada (Região I) e os resultados (Região II e Região III) bem como a solução apresentada pela referência estão na Tabela IV.1.

O ângulo de onda obtido pelo modelo para a primeira onda de choque é de $35,3^\circ$ e da solução analítica de 35° , para o segundo ângulo de onda (reflexão) o modelo obteve $29,5^\circ$ e a solução analítica é de $29,5^\circ$ (os ângulos são cotados na Fig.IV.1a)

Tabela IV.1 Comparação da solução numérica do modelo à solução analítica presente na literatura (Anderson, 1990) – as regiões podem ser vistas na Fig.IV.1c para o caso 1.

| | | | | |
|------------|-----------|-----------|-----------|-------------------|
| Região I | p_I | T_I | M_I | Dados de entrada |
| | 101.325 | 288,3 | 2,8 | Anderson (1990) |
| Região II | p_{II} | T_{II} | M_{II} | |
| | 286.000 | 400,4 | 2,061 | Modelo |
| | 285.736 | 400,2 | 2,053 | Solução analítica |
| Região III | p_{III} | T_{III} | M_{III} | |
| | 663.448 | 518,2 | 1,46 | Modelo |
| | 662.909 | 517,9 | 1,45 | Solução analítica |

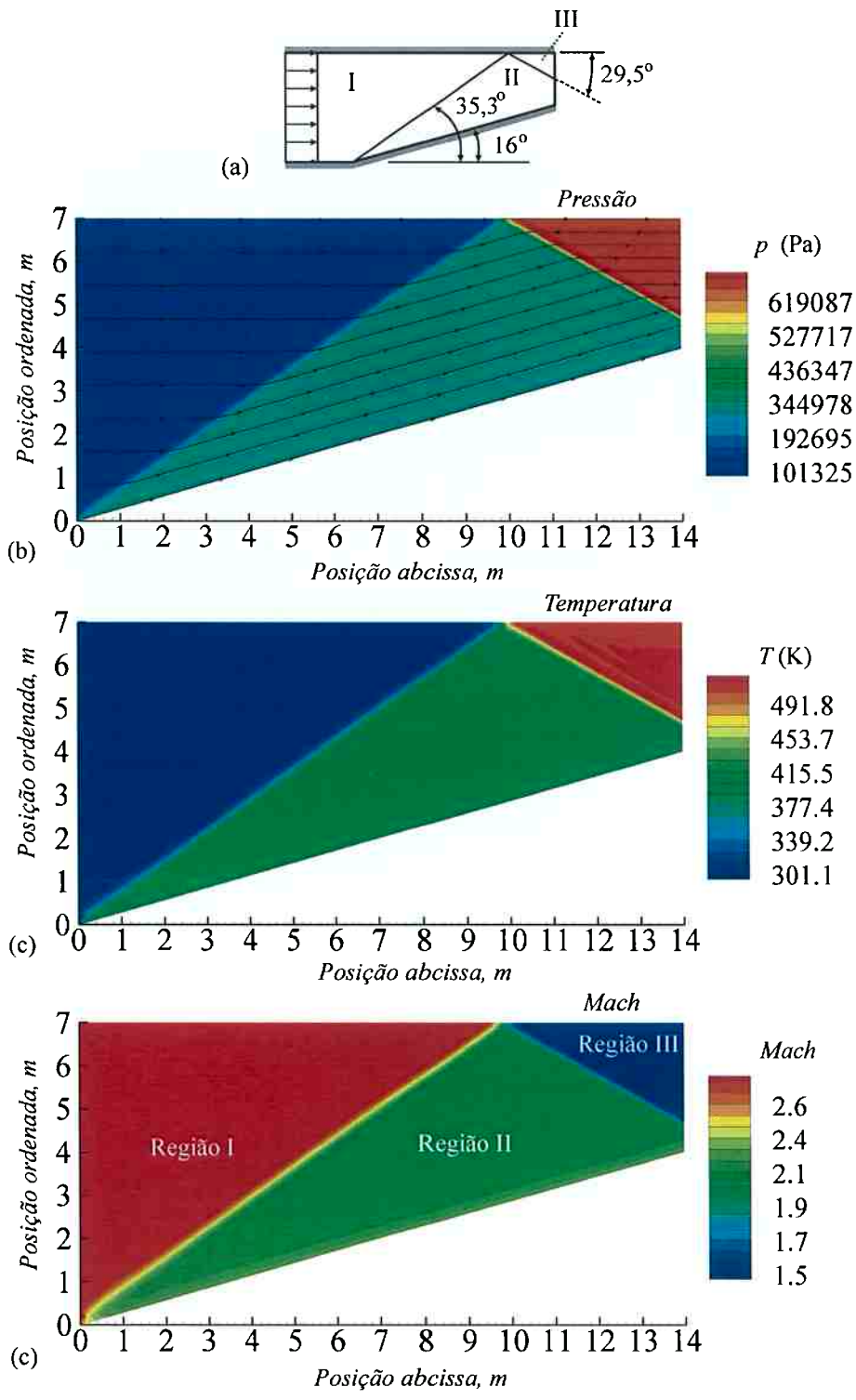


Figura IV.1 Solução do modelo para o caso 1.

A Fig.IV.2 (a e b) ilustra a solução para o segundo caso proposto, ou seja, o escoamento sobre um canto (expansão de Prandtl-Meyer) ao contrário da Fig.IV.1 não são mostrados os mapas de cores para a temperatura e número de Mach, apenas de pressão evitando repetições. No leque de expansão formado a partir do canto, o primeiro ângulo é de $41,68^\circ$ (se determinado analiticamente $41,81^\circ$) e o último é de $6,87^\circ$ (se determinado analiticamente $6,95^\circ$). As condições à montante do canto são $p_I = 81396$ Pa, $T_I = 255,55$ K, $M_I = 1,5$ e o ângulo de expansão é de 20° . As condições à jusante obtidas pelo modelo são $p_{II} = 27624,1$ Pa, $T_{II} = 188$ K, $M_{II} = 2,2$ se determinadas analiticamente (Anderson, 1990) $p_{II} = 27641,6$ Pa, $T_{II} = 187,7$ K e $M_{II} = 2,2$.

A Fig.IV.2 (c e d) ilustra a solução para o terceiro caso proposto, o escoamento sobre um corpo em forma de diamante cuja simetria permite a simulação de apenas sua metade. As condições a montante à peça são $p_I = 101325$ Pa, $T_I = 273,15$ K, $M_I = 3,5$ e os ângulos estão cotados na figura. As condições nas regiões pós-onda de choque (Região II) e pós-leque de expansão (Região III) são respectivamente: $p_{II} = 311515$ Pa, $T_{II} = 393,34$ K, $M_{II} = 2,64$ e $p_{III} = 31611,3$ Pa, $T_{III} = 194,35$ K, $M_{III} = 4,51$. Segundo a solução analítica apresentada por Anderson (1990) os valores para o número de Mach são $M_{II} = 2,6$ e $M_{III} = 4,45$ (as demais propriedades podem ser determinadas analiticamente, mas não foram calculadas neste exemplo de Anderson). Os exemplos mostram que há acuidade do modelo.

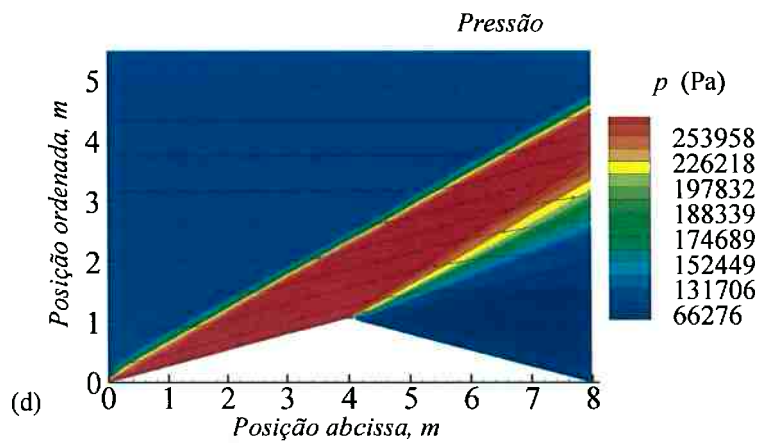
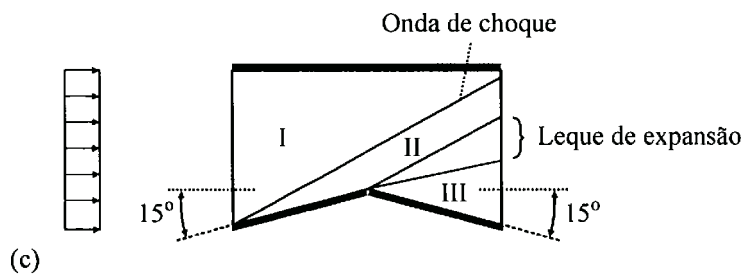
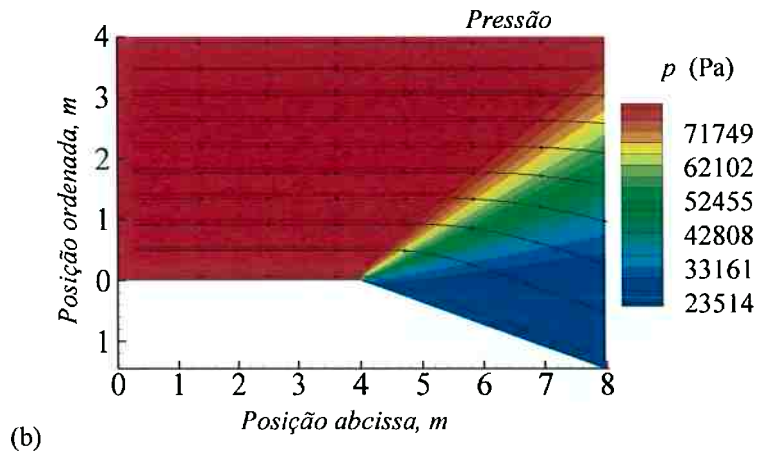
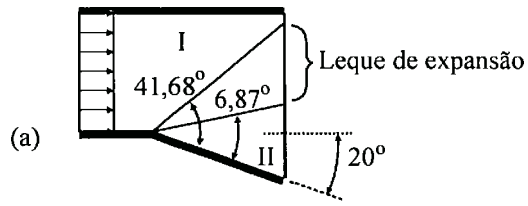


Figura IV.2 Solução do modelo para o caso 2 (a e b) e 3 (c e d).

APÊNDICE V. ESTUDO DA SENSIBILIDADE DO TAMANHO DA MALHA

A densidade da malha pode afetar a solução numérica, ou seja, dependendo do espaçamento entre os pontos é possível que possa ser encontrada uma solução que não é válida, ou ainda, que não possua acuidade. Portanto, neste apêndice é realizado um estudo sobre a densidade da malha para os escoamentos do jato evaporativo tendo em vista a geometria proposta do modelo e os tamanhos médios para as simulações apresentadas.

Um caso de Vieira (2004) foi selecionado (2349XXX), e foram testadas algumas densidades de malha. A malha para a região de expansão da mistura bifásica do jato evaporativo é estruturada, possui uma quantidade de pontos sobre o núcleo de líquido e a solução se dá em marcha espacial. Foram testadas as seguintes densidades para o caso em estudo: 25 x 60 (25 pontos sobre o núcleo de líquido e 60 passos no espaço totalizando 1500 pontos de cálculo), 55 x 125 (6875 pontos), 110 x 250 (27500 pontos) e 220 x 500 (110000 pontos). O tamanho da malha (dimensões), ou seja, as dimensões máximas para o domínio de cálculo foram (para comparação) fixadas. Para todos os casos se verifica a condição de estabilidade da marcha apresentada na Seção 7.9.

Os testes foram tomados para expansão no vácuo. A Fig.V.1a mostra a distribuição de pontos para a malha de 55 x 125. A solução para a malha de 25 x 60 não foi possível, pois no primeiro passo devido aos gradientes elevados das propriedades e grandezas nas proximidades do núcleo de líquido impossibilitou a solução (o procedimento de cálculo foi interrompido na decodificação na etapa de predição). Para os outros três casos de densidade de malha a solução foi possível. Foram feitos dois cortes (escolhidos aleatoriamente) no domínio (corte A-A e corte B-B) como pode ser visto na Fig.V.1 a e a variação da pressão pode, para esses cortes ser vista na Fig.V.1b para duas densidades de malha (55 x 125 e 110 x 250). Não é exposta na Fig.V.1b a distribuição de pressão nos cortes para a malha de (220 x 500), pois fica exatamente sobre a distribuição de pressões para os cortes obtida pela malha de 110 x 250.

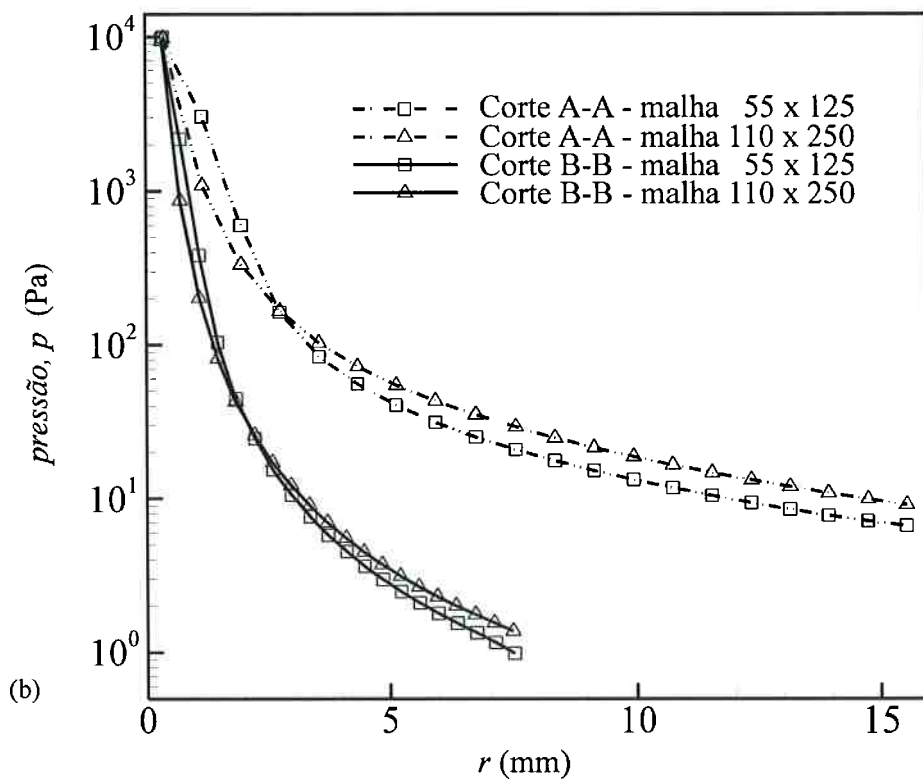
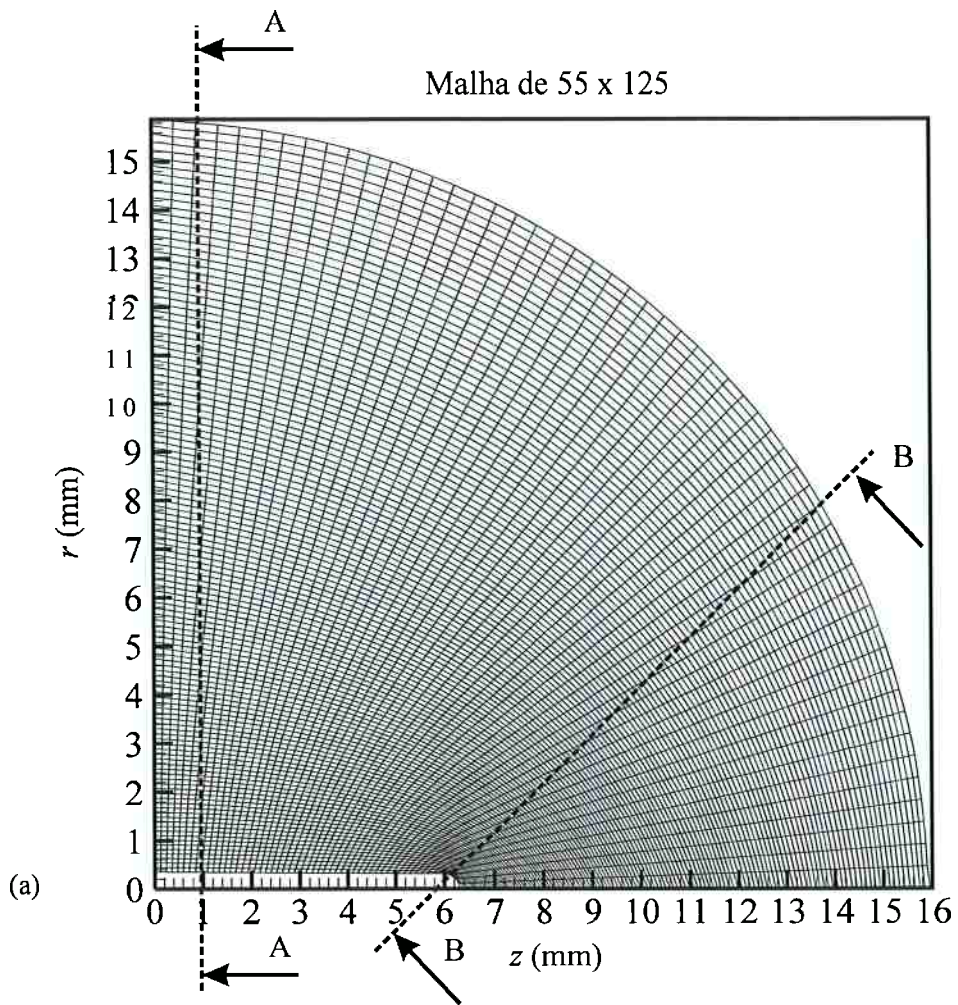


Figura V.1 Estudo da sensibilidade do tamanho da malha.

Essa observação leva a concluir que refinar a malha acima de 110 x 250 pontos para as dimensões dos casos testados para escoamento do jato evaporativo não obtém vantagens do ponto de vista da acuidade dos resultados.