

O Esquema DCD no Fenômeno da Expansão Bifásica

J. A. J. Avila

Departamento de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, DEMAT, UFSJ,
36307-904, São João del-Rei, MG
E-mail: avila_jaj@ufsj.edu.br

Resumo: *O esquema de captura de choque: “Dispersion-Controlled Dissipative” (DCD) é aplicado no fenômeno estacionário da evaporação rápida de jatos de líquidos metaestáveis num domínio axissimétrico 2D, correspondente à região bifásica. As equações que governam o fenômeno são as equações de conservação da massa, conservação da quantidade de movimento e conservação da energia, mais a equação de estado de Lee-Kesler.*

Palavras-chave: *Evaporação rápida. Escoamento bifásico. Onda de choque. Leis de conservação. Esquema DCD. Esquema de captura de choque.*

1 Introdução

O fenômeno de evaporação rápida em jatos de líquidos metaestáveis é importante em aplicações industriais e tecnológicas. Diversas pesquisas teóricas, experimentais e computacionais têm sido desenvolvidas no intuito de conhecer e prever o comportamento dos fluidos durante o processo de mudança de fase de líquido para vapor. Algumas aplicações deste fenômeno estão presentes nos acidentes industriais Ogle et al. [8], em injeção de combustível MacPhee et al. [7], em válvulas de segurança e alívio Rochette et al. [9].

No que se refere ao estudo teórico-experimental dos jatos de líquidos superaquecidos com formação de onda de choques, Vieira [14] constrói um arranjo experimental para estudar o comportamento dos jatos evaporativos com controle de pressão e temperatura de injeção constante. Com relação ao estudo numérico deste fenômeno, Simões-Moreira [10] analisa o problema da onda de choque que ocorrem em associação com os jatos evaporativos empregando uma abordagem 1D. Para o caso permanente e em um domínio axissimétrico 2D, Angelo [1] implementa o fenômeno por diferenças finitas e lança a primeira versão do código computacional: *ShoWPhasT-2D v1*. Avila et al. [2] melhoram o código anterior, lançando a segunda versão do código computacional *ShoWPhasT-2D v2* que reduz o tempo computacional e aproxima melhor o formato da onda de choque. Avila et al. [3] ajustam melhor estes últimos resultados. Por outro lado, nenhum dos códigos estudados anteriormente captura a onda de choque diretamente, sendo assim, Avila [4] implementa um novo código computacional o *DCD-2D v1* (“Dispersion-Controlled Dissipative - Two-Dimensional version 1”), baseado no esquema “Dispersion-Controlled Dissipative” (DCD) de Jiang [5], que captura diretamente a onda de choque (esquema “shock-capturing”) e resolve, em geral, fenômenos não estacionários.

2 Fenômeno de Evaporação Rápida

A evaporação rápida (ou “flashing”) de jatos evaporativos de líquidos altamente superaquecidos é um fenômeno não estacionário 3D, porém, com algumas simplificações obtemos uma abordagem 2D. Para um melhor estudo, este fenômeno divide-se em duas regiões formadas por estados: região pré-bifásica e região bifásica. A Figura 1a mostra a fotografia de onda de choque obtida experimentalmente por Vieira [14]. A Figura 1b representa esquematicamente a onda de choque,

e a Figura 1c mostra a curva de saturação para um diagrama $P \times v$ (pressão \times volume específico) e os estados termodinâmicos envolvidos no fenômeno. Mais detalhes em [1], [2], [3] e [4].

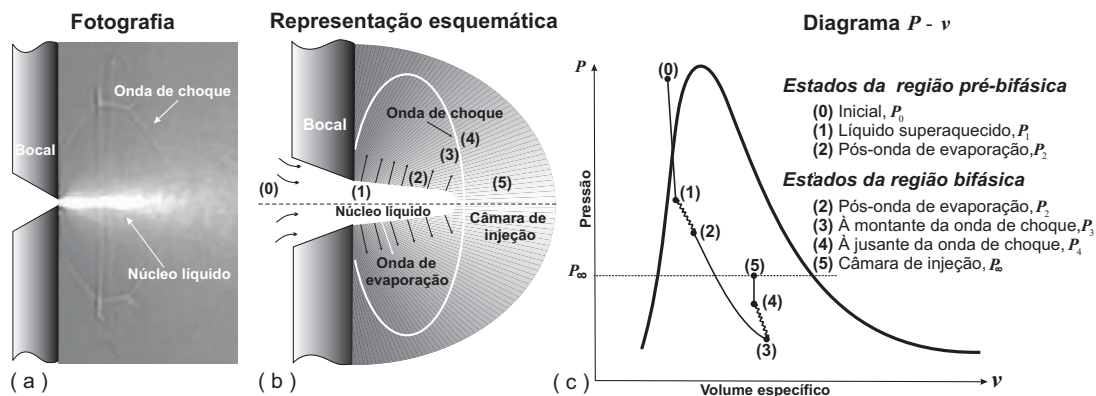


Figura 1: (a) Fotografia de uma onda de choque, [14]. (b) Representação esquemática do fenômeno. (c) Comportamento termodinâmico no diagrama $P \times v$.

3 Região Bifásica

A região bifásica é uma região axissimétrica do plano 2D. Estudaremos o fenômeno de evaporação rápida de jatos de líquidos metaestáveis na região bifásica como sendo estacionário, ou seja, quando o fenômeno atingiu o regime permanente.

3.1 Domínio físico e malha física

O domínio físico é a região bifásica cujo contorno é dado por $\Gamma = \bigcup_{i=1}^4 \Gamma_i$, veja Figura 2a. Com a finalidade de se obter uma malha para o domínio físico usamos a teoria de transformações conformes, o qual, gera uma malha elíptica (Figura 2b), mais detalhes em [4].

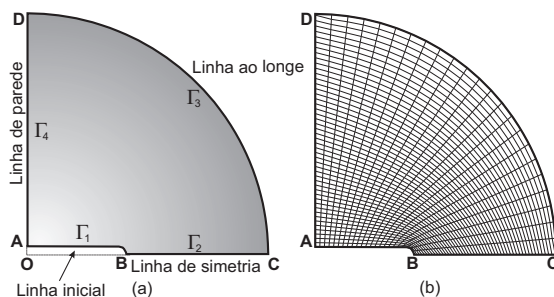


Figura 2: (a) Domínio físico. (b) Malha elíptica.

3.2 Equações governantes

As equações que governam o fenômeno da expansão bifásica, para o caso de um fluido invíscido é modelado pelas seguintes equações de leis de conservação: conservação da massa, conservação da quantidade de movimento e conservação da energia. Este sistema formado por quatro equações apresenta cinco incógnitas ou variáveis primitivas, a saber: $\{\rho, u, v, p, e\}$ densidade, vetor velocidade na direção x , vetor velocidade na direção y , pressão e energia interna específica, respectivamente. Esta energia interna específica satisfaz: $E = \rho e + 0,5\rho V^2$, onde E é a energia total, e $V = \sqrt{u^2 + v^2}$ o módulo do vetor velocidade. A equação de estado usado neste trabalho é de Lee-Kesler, veja Avila [4].

3.3 Em coordenadas cartesianas

As leis de conservação vetorial 2D, formam um sistema de equações em derivadas parciais quase-lineares de primeira ordem, dadas por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{S}{y} = 0 \quad (1)$$

onde

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{bmatrix} \quad G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ (E + p)v \end{bmatrix} \quad (2)$$

sendo U o vetor incógnita das variáveis de estado (variáveis conservadas), F e G funções vetoriais de fluxo (ou simplesmente vetores de fluxo) e S representa o termo fonte.

3.4 Em coordenadas curvilíneas ortogonais

Transformaremos as equações de leis de conservação dadas em coordenadas cartesianas (x, y) para as coordenadas curvilíneas ortogonais (ξ, η) . Como resultado desta transformação temos o domínio computacional que é o quadrado unitário 2D nas coordenadas (ξ, η) , cujo contorno é dado por $\Gamma' = \bigcup_{i=1}^4 \Gamma'_i$, como mostrado na Figura 3a.

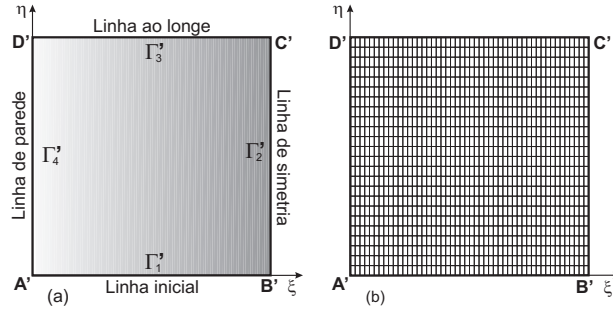


Figura 3: (a) Domínio computacional. (b) Malha computacional.

As métricas nas coordenadas curvilíneas ortogonais (ξ, η) do plano 2D são:

$$\xi_x = Jy_\eta \quad \xi_y = -Jx_\eta \quad \eta_x = -Jy_\xi \quad \eta_y = Jx_\xi \quad (3)$$

onde o Jacobiano é dado por:

$$J = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x \quad (4)$$

O sistema de leis de conservação no domínio computacional é:

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{G}}{\partial \eta} + \hat{S} = 0 \quad (5)$$

$$\hat{U} = \frac{U}{J} \quad \hat{F} = \frac{1}{J}(\xi_x F + \xi_y G) \quad G = \frac{1}{J}(\eta_x F + \eta_y G) \quad \hat{S} = \frac{S}{Jy}$$

onde \hat{U} é o vetor das variáveis conservadas, \hat{F} e \hat{G} os vetores de fluxo e \hat{S} o termo fonte.

3.5 Condições de contorno

No domínio físico as únicas condições de contorno conhecidas são: na *linha inicial* (velocidade, número de Mach, M , pressão, temperatura, densidade e título, \mathbf{x}), na *linha de simetria* (condição de impermeabilidade), na *linha ao longe* (pressão ao longe, p_∞) e na *linha de parede* (condição de impermeabilidade). A continuação as condições de contorno:

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : u &= \left[\frac{W_2}{\text{sen}(\theta + \beta)} \right] \cos \theta, & v &= \left[\frac{W_2}{\text{sen}(\theta + \beta)} \right] \text{sen} \theta, & M &= 1, & p &= p_2, & T &= T_2, & \rho &= \frac{1}{v_2}, & \mathbf{x} &= \mathbf{x}_2 \\ \Gamma_2 : u &\neq 0, & v &= 0, & \Gamma_3 : p &= p_\infty, & \Gamma_4 : u &= 0, & v &\neq 0 \end{aligned} \quad (6)$$

onde W_2 é a componente normal do vetor velocidade da onda de evaporação oblíqua, β o ângulo de onda, θ o ângulo de giro, e v_2 o volume específico. O subscrito “2” indica os valores termodinâmicos para o estados pós-onda de evaporação, como mostrado em [2]. As outras propriedades termodinâmicas nos contornos Γ_2, Γ_3 , e Γ_4 , são obtidas pelas condições de contornos numéricas de ordem zero e um.

4 Solução Numérica: Método não Estacionário

4.1 Separação de vetores de fluxo

Para aplicar o esquema numérico à equação (5) precisamos obter as matrizes jacobianas dos vetores de fluxo \hat{F} e \hat{G} , para isto, usamos o método de separação de vetores de fluxo. Este método tem sido utilizado nas leis de conservação hiperbólicas e usa o princípio de homogeneidade e a teoria de autovalores nos vetores de fluxo, veja Steger e Warming [11].

4.2 Esquema “Dispersion - Controlled Dissipative” (DCD)

O esquema “Dispersion-Controlled Dissipative” (DCD) é um esquema de segunda ordem e pertence à classe dos esquemas “non-oscillatory shock-capturing”. Esta classe é diferente dos esquemas convencionais baseados em dissipação, no qual, os termos dissipativos das equações modificadas não são considerados na construção dos esquemas, podendo assim evitar oscilações não-físicas que ocorrem em simulações de ondas de choques. Este esquema é uma combinação dos esquemas de Lax-Wendroff e Beam-Warming com função limitadora de fluxo *minmod*. Jiang [6] tem realizado estudos sistemáticos sobre o princípio “dispersion-controlled” desde 1993, e tem publicado as condições de dispersão para esquemas “non-oscillatory shock-capturing”. O princípio “dispersion-controlled” visa remover as oscilações não-físicas empregando características da dispersão em vez de adicionar a viscosidade artificial para dissipar as oscilações como fazem os esquemas convencionais. Aplicações foram feitas em diferentes problemas, por exemplo, ondas de choques toroidais em câmaras cilíndricas (Teng et al. [12]), ondas de choques em combustão de gases (Teng et al. [13]), por citar alguns.

O esquema DCD foi implementado em Fortran e o código computacional é chamado de: *DCD-2D v1* (“Dispersion-Controlled Dissipative - Two-Dimensional version 1”).

4.2.1 Formulação por diferenças finitas

No domínio computacional, a formulação por diferenças finitas da equação (5), discretizada espacialmente usando o esquema DCD (Jiang [5]), são dadas em sua forma semi-discreta por:

$$\left[\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right]_{i,j}^n = -\frac{1}{\Delta \xi} \left(\hat{H}_{i+1/2,j}^n - \hat{H}_{i-1/2,j}^n \right) - \frac{1}{\Delta \eta} \left(\hat{P}_{i,j+1/2}^n - \hat{P}_{i,j-1/2}^n \right) - \hat{S}_{i,j}^n$$

onde $\{\Delta \xi, \Delta \eta\}$ são as dimensões dos elementos da malha computacional, Figura 3b, e

$$\begin{aligned} \hat{H}_{i+1/2,j}^n &= \hat{F}_{i+(1/2)L,j}^+ + \hat{F}_{i+(1/2)R,j}^- & \hat{H}_{i-1/2,j}^n &= \hat{F}_{i-(1/2)L,j}^+ + \hat{F}_{i-(1/2)R,j}^- \\ \hat{P}_{i,j+1/2}^n &= \hat{G}_{i,j+(1/2)L}^+ + \hat{G}_{i,j+(1/2)R}^- & \hat{P}_{i,j-1/2}^n &= \hat{G}_{i,j-(1/2)L}^+ + \hat{G}_{i,j-(1/2)R}^- \end{aligned}$$

onde \hat{F}^\pm e \hat{G}^\pm são os fluxos numéricos, e os subscritos R, L designam, respectivamente, à direita e à esquerda do nó em questão, dado por \hat{H} ou \hat{P} . Para uma explicação mais detalhada revise Avila [4]. Com respeito à discretização temporal foi usado o método de Runge-Kutta de segunda ordem.

5 Resultados Numéricos: Modelo Falso Transiente

Antes de resolver o fenômeno da expansão bifásica, segundo o modelo de falso transitório, testamos o código computacional *DCD-2D v1*, no problema do bocal convergente-divergente.

Cada um dos testes foi executado num computador: AMD Atlon(tm) 64X2 Dual Core Processor 2.73 GHz.

5.1 Bocal convergente-divergente

O problema do bocal convergente-divergente (C-D) em regime permanente é quase 1D, cuja região é dada por:

$$D = \left\{ (x, y) \in \mathbf{R}^2 : 0 \leq x \leq 3, |y| \leq (1/8) \left[1 + 2, 2(x - 1, 5)^2 \right] \right\}$$

sendo a razão de áreas $A_s/A^* = 5,95$, onde A_s é área na saída e A^* é área na garganta do bocal. As condições de contorno, solução analítica e numérica são especificadas em [4]. O erro com relação à saída do bocal é para o número de Mach de 2,1%, para a razão de temperaturas de 1,1% e para a razão de pressões de 16,7%. A Figura 4 mostra uma malha para o domínio D . A Figura 5 corresponde ao perfil da pressão e figuras 6 e 7 representam os contornos de pressão e de número de Mach, respectivamente. A onda de choque está posicionada no ponto 2,15 m.

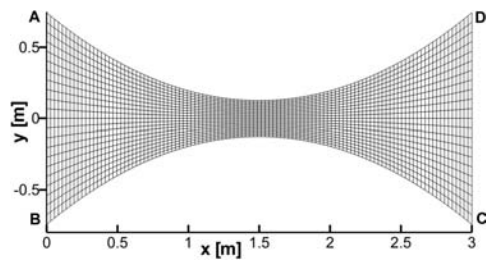


Figura 4: Malha do bocal C-D.

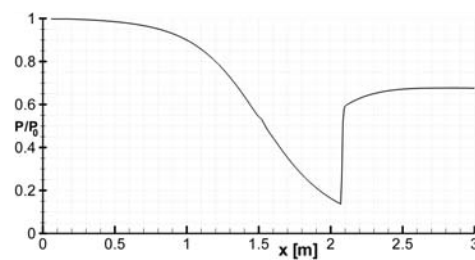


Figura 5: Perfil de pressão.

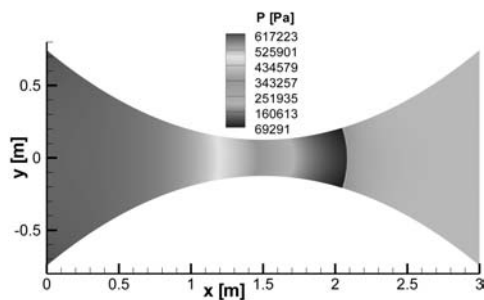


Figura 6: Contornos de pressão.

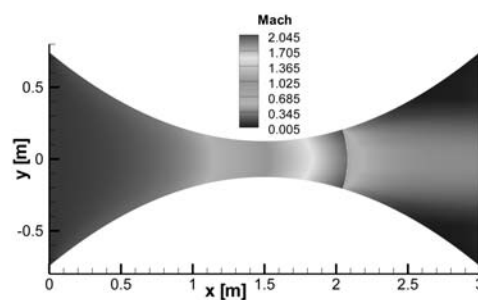


Figura 7: Contornos de número de Mach.

5.2 Fenômeno da expansão bifásica

No problema estacionário do fenômeno da expansão bifásica usamos como fluido teste o iso-octano (C_8H_{18}) e, para a equação de estado, uma tabela das propriedades termodinâmicas na

saturação (gerada a partir da equação Lee-Kesler). A técnica do método numérico foi de falso transiente. O comprimento da onda de choque (c.o.c) está determinado pelo *comprimento radial* (projeção ortogonal do ponto máximo da onda de choque sobre o eixo x), denotado por r_1 , e pelo *comprimento axial* (da origem até a interseção da onda de choque com o eixo x), denotado por r_2 . Diferentes testes foram usados para este fenômeno. Neste trabalho, o teste que realizamos corresponde a uma região bifásica de raio: $R_f = 22E - 03 m$. A malha usada tem 12.397 nós. As condições de reservatório são: $P_0 = 503,4E + 03 Pa$ e $T_0 = 368,55 K$. Na *linha inicial* as condições de contorno são: $M = 1$; $T = 331,4 K$; $p = 26.862 Pa$; $x = 0,297$; $V = 73,7 m/s$ e na *linha ao longe* a pressão é de $8.000 Pa$. Os resultados numéricos para o c.o.c. foram: $r_1 = 16,2E - 03 m$ e $r_2 = 14,7E - 03 m$, num tempo CPU de 04 horas 48 minutos e 23 segundos.

As figuras 8 e 9 representam os contornos da pressão e número de Mach, respectivamente. Observe que nas extremidades da *linha inicial* a expansão é rápida, em quanto que na lateral da mesma a expansão é muito lenta formando um cone com vértice na entrada do bocal.

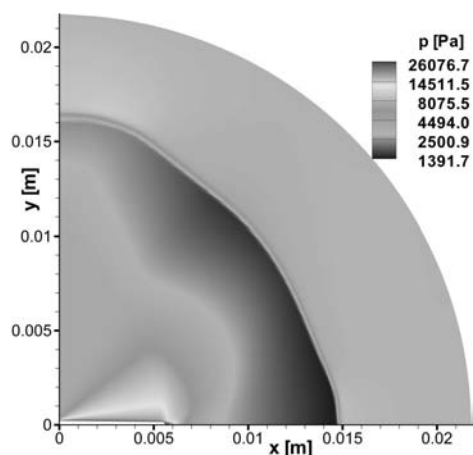


Figura 8: Malha do bocal C-D.

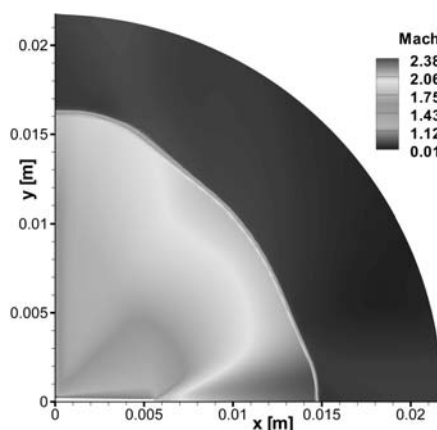


Figura 9: Perfil de pressão.

A Figura 10 mostra o estado permanente do nó (50, 184) da malha. Vemos que o estado de regime permanente atingiu após 24.000 iterações. A pressão nesse ponto toma o valor de $7.868,2 Pa$. E finalmente a Figura 11 mostra a superfície de contornos de pressão, visualizada em 3D.

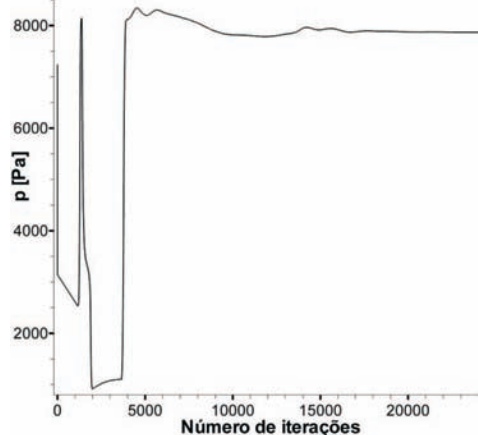


Figura 10: Pressão e número de iterações.

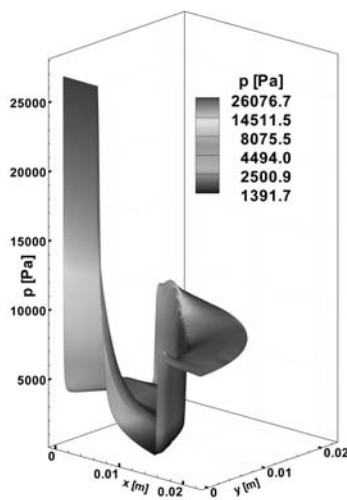


Figura 11: Contornos de pressão em 3D.

6 Conclusões

Para o modelo de falso-transiente do fenômeno estacionário da evaporação rápida de líquidos altamente metaestáveis, na região bifásica, o código *DCD-2D v1* captura diretamente a onda de choque sem nenhuma técnica adicional de pós-processamento, como faziam os outros códigos (*ShoWPhasT-2D v1* e *ShoWPhasT-2D v2*). Este método permitiu a determinação dos campos de velocidades e termodinâmicos através de toda região bifásica de escoamento.

Agradecimento

O autor agradece à FAPEMIG pelo apoio financeiro para a apresentação deste trabalho.

Referências

- [1] E. Angelo, “Análise Numérica da Dinâmica da Expansão de Líquidos Superaquecidos em Evaporação Rápida”. Tese de Doutorado, POLI, USP, São Paulo, SP, 2004.
- [2] J.A.J. Avila, M.M. Vieira, M.M. Pimenta, J.R. Simões-Moreira, Liquid Jet Flashing into a Low Pressure Environment: A Numerical Solution. “39th AIAA Thermophysics Conference”, Miami, FL, 25-28 June, 2007.
- [3] J.A.J. Avila, M.M. Pimenta, J.R. Simões-Moreira, Evaporação Rápida em Jatos de Líquidos Metaestáveis: Uma Abordagem Numérica. “In: CONEM 2008: V Congresso Nacional de Engenharia Mecânica”, Salvador-Bahia-Brasil, 25-28 de agosto de 2008.
- [4] J.A.J. Avila, “Solução Numérica em Jatos de Líquidos Metaestáveis com Evaporação Rápida”. Tese de Doutorado, POLI, USP, São Paulo, SP, 2008.
- [5] Z. Jiang, “Study on the Finite Difference Theory and Numerical Methods of Weak Solution Problems”. Ph.D Thesis, Peking University, Beijing, China, 1993.
- [6] Z. Jiang, On dispersion-controlled principles for non-oscillatory shock-capturing schemes. *Acta Mechanica Sinica*, **20**, No. 1, (2004), 1-15.
- [7] A.G. Macphee, et al, X-ray Imaging of Shock Waves Generated by High-Pressure Fuel Sprays. *Science*, **295**, No. 1261, (2002).
- [8] R.A. Ogle, M.V. Megerle, D.R. Morrison, A.R. Carpenter, Explosion Caused by Flashing Liquid in a Process Vessel. *Journal of Hazardous Materials*, **115**, (2004), 133-140.
- [9] D. Rochette, S. Clain, W.Bussièrre, F. Gentils, Two-dimensional modelling of internal arc effects in an enclosed MV cell provided with a protection porous filter. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **40**, (2007), 3137- 3144.
- [10] J.R. Simões-Moreira, “Aplicação da teoria das ondas de evaporação aos jatos evaporativos”. Tese de Livre Docência, POLI, USP, São Paulo, SP, 1999.
- [11] J.F. Steger, R.F. Warming, Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with applications to finite difference methods. *J. Comput. Phys.*, **40**, (1981), 263-293.
- [12] H. Teng, Z. Jiang, Z. Han, S.H.R. Hosseini, K. Takayama, Numerical investigation of toroidal shock wave focusing in a cylindrical chamber. *Shock W.*, **14**, No. 4, (2005), 299-305.
- [13] H. Teng, C. Wang, B. Deng, Z. Jiang, Ignition Characteristics of the Shock Wave focusing in Combustive Gases. *Chinese J. of Theoretical and Appl. Mech.*, **39**, No. 2, (2007), 171-180.
- [14] M.M. Vieira, “Estudo Experimental da Evaporação de Jatos de Iso-octano Superaquecido”. Tese de Doutorado, POLI, USP, São Paulo, SP, 2005.