



MODELAGEM DA CONDENSAÇÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO EM UM  
BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE

Tatiane Franco Machado

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

Orientadores: Luiz Fernando Lopes Rodrigues  
Silva  
Fabio Pereira dos Santos

Rio de Janeiro  
Setembro de 2019

MODELAGEM DA CONDENSAÇÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO EM UM  
BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE

Tatiane Franco Machado

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA  
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E  
BIOQUÍMICOS DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO  
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU  
DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE PROCESSOS QUÍMICOS  
E BIOQUÍMICOS.

Orientado por:

---

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

---

Prof. Fabio Pereira dos Santos, D.Sc.

Examinado por:

---

Prof. Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

---

Prof. João Felipe Mitre de Araujo, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
SETEMBRO DE 2019

## CIP - Catalogação na Publicação

M149m Machado, Tatiane Franco  
Modelagem da condensação de dióxido de carbono em um bocal convergente-divergente / Tatiane Franco Machado. -- Rio de Janeiro, 2019.  
128 f.

Orientador: Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva.  
Coorientador: Fabio Pereira dos Santos.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós Graduação em Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos, 2019.

1. Condensação. 2. Balanço populacional. 3. Escoamento supersônico. 4. OpenFOAM. I. Lopes Rodrigues Silva, Luiz Fernando, orient. II. dos Santos, Fabio Pereira, coorient. III. Título.

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente à Deus e Nossa Senhora por estarem sempre me guiando nessa jornada, ajudando a superar os obstáculos com persistência e fé. Agradeço aos meus pais, Dineia e Elson, por terem me motivado a estudar e por sempre serem o meu exemplo de determinação, e à minha irmã Thais pelas risadas e pelo apoio em meus projetos. Agradeço ao meu namorado, Alan, por toda a paciência, compreensão e carinho durante esse período difícil na realização desse projeto. Agradeço aos meus orientadores, Luiz Fernando e Fabio Pereira, não somente pelo rico aprendizado proporcionado por eles, mas também pelo apoio emocional e motivacional com muita paciência e carinho. Agradeço aos amigos do laboratório CFD (LabCFD) pelas dicas e pelo carinho, e aos amigos de faculdade, pelos bons momentos e pelo apoio.



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

## MODELAGEM DA CONDENSAÇÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO EM UM BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE

Tatiane Franco Machado

Setembro/2019

Orientadores: Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva  
Fabio Pereira dos Santos

Programa: Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos

Apesar da variedade de separadores existentes, poucos deles podem ser aplicados à separação de gases no processamento de petróleo e gás natural no fundo do mar. Dentre eles o separador supersônico apresenta-se como uma alternativa promissora, visto que, separa os componentes condensáveis, com custo operacional e necessidade espacial reduzidos. Dito isso, o objetivo principal deste trabalho é modelar o processo de condensação dentro de um separador supersônico. Os modelos foram implementados em *software* de código aberto (foam-extend-4.0) usando um algoritmo de soluções das equações baseado na densidade para a fase contínua. O acoplamento entre as fases é de uma via, onde a fase dispersa é resolvida através da equação do balanço populacional usando o método dos momentos fechados por quadratura. Primeiramente, foi realizado um estudo dos modelos de taxa de nucleação, obtendo-se um modelo híbrido para as simulações. Em seguida, foi simulado um caso para testar o código criado com vapor de água, obtendo-se resultados comparáveis qualitativamente e quantitativamente com a literatura. Por fim, efetuou-se algumas simulações do escoamento de gás contém dióxido de carbono puro com diferentes condições de entrada, a fim de avaliar alguns dos parâmetros de condensação, como super-resfriamento, supersaturação, taxa de nucleação e raio médio das gotas. Com isso, o programa não somente é capaz de fornecer resultados qualitativos consoantes com outros autores, mas também permite a localização do fenômeno ao longo do equipamento para diferentes condições de entrada.

**Palavras chave:** Condensação, Balanço populacional, Escoamento supersônico, OpenFOAM.

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

## MODELLING CONDENSATION OF CARBON DIOXIDE IN A CONVERGENT-DIVERGENT NOZZLE

Tatiane Franco Machado

September/2019

Advisors: Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva  
Fabio Pereira dos Santos

Department: Chemical Engineering

Despite the variety of separators available, few of them applies to gas separation in processing of oil and natural gas at subsea conditions. Among them, the supersonic separator is a promising choice, due to its efficiency in separation of the condensable components, with a small footprint. Therefore, the main purpose of this work is to model the condensation process within a supersonic separator. The models were implemented in open-source software (foam-extend-4.0) using a density-based approach for the continuous phase. The phase coupling is one-way, where the dispersed phase flow is represented through the population balance equation, using the quadrature method of moments. First, a study of nucleation rate models was performed, obtaining a hybrid model for further simulations. After that, a test case with steam was simulated to check the applicability of the new solver, attaining results with satisfying qualitative and quantitative agreement compared to literature. Finally, gas flow simulations containing pure carbon dioxide with different inlet conditions were carried out, in order to evaluate the main condensation parameters, such as supercooling, supersaturation, nucleation rate and mean droplet radius. As a result, not only the solver was able to provide similar qualitative results compared to other authors, but also allows to locate the phenomenon throughout the equipment for different input conditions.

**Keywords:** Condensation, Population Balance, Supersonic Flow, OpenFOAM.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiv</b>
<b>Nomenclatura</b>	<b>xv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Contexto e Motivação . . . . .	3
1.2 Objetivos . . . . .	5
1.2.1 Objetivo principal . . . . .	5
1.2.2 Objetivos específicos . . . . .	5
1.3 Organização . . . . .	5
<b>2 Revisão bibliográfica</b>	<b>7</b>
2.1 Separador supersônico . . . . .	7
2.2 Escoamento compressível . . . . .	9
2.3 Escoamento multifásico . . . . .	14
2.3.1 Abordagem Euleriana-Euleriana . . . . .	15
2.3.2 Fenômeno da condensação . . . . .	23
2.4 Metodologia Numérica . . . . .	39
2.4.1 Modelagem . . . . .	39
2.4.2 Fluidodinâmica computacional . . . . .	40
2.4.3 Algoritmo de solução das equações . . . . .	41
2.4.4 Métodos de discretização . . . . .	43
2.4.5 Técnicas numéricas para solução da equação de balanço po- pulacional . . . . .	53
<b>3 Metodologia</b>	<b>61</b>
3.1 Materiais . . . . .	61
3.2 Métodos . . . . .	61
3.2.1 Geometria para os testes com água . . . . .	62
3.2.2 Geometria para os testes com dióxido de carbono . . . . .	63

3.2.3	Malhas . . . . .	64
3.2.4	Condições de contorno . . . . .	64
3.2.5	Esquemas numéricos para solução das EDP's . . . . .	68
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>70</b>
4.1	Convergência de malha para caso com $CO_2$ . . . . .	70
4.2	Comparação entre os modelos para taxa de nucleação . . . . .	71
4.2.1	Avaliação para água . . . . .	72
4.2.2	Avaliação para dióxido de carbono . . . . .	76
4.3	Caso teste para água . . . . .	82
4.4	Caso teste para dióxido de carbono . . . . .	90
4.4.1	Características do escoamento da fase contínua . . . . .	90
4.4.2	Características do escoamento da fase dispersa . . . . .	95
<b>5</b>	<b>Conclusões e recomendação para trabalhos futuros</b>	<b>105</b>
5.1	Apêndice . . . . .	106
5.1.1	Apêndice I . . . . .	106
5.1.2	Apêndice II . . . . .	110
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>114</b>

# Lista de Figuras

2.1	Esquema de um separador supersônico. Adaptado de [40] . . . . .	7
2.2	Esquema de um separador supersônico modelo Twister-II. Adaptado de [10] . . . . .	8
2.3	Esquema de um separador supersônico modelo 3S. Adaptado de [40] .	9
2.4	Diagrama esquemático mostrando variação de $\Delta G$ com $r$ . Adaptado de BAKHTAR <i>et al.</i> [79] . . . . .	26
2.5	$\Delta G$ vs. $r$ para diferentes supersaturações. Adaptado de FAKHARI [80]	27
2.6	Esquema do processo dinâmico da nucleação. Adaptado de HAN <i>et al.</i> [82] . . . . .	29
2.7	Modelo de Langmuir e a distribuição de temperatura ao redor da gota. Adaptado de FAKHARI [80] . . . . .	35
2.8	Comparação entre o modelo de crescimento de gota com dados experimentais PETERS e PAIKERT [93] . . . . .	37
2.9	Distribuição de pressão axial em um bocal convergente-divergente com condensação espontânea. Adaptado de HASINI <i>et al.</i> [95] . . . .	38
2.10	Esquema de alocação do campo de variáveis na malha: (a) centrado no vértice ; (b) centrado na célula. Adaptado de [111] . . . . .	45
2.11	Esquema de interpolação <i>Upwind</i> . . . . .	46
2.12	Onda de choque à esquerda, onda de rarefação à direita e onda de contato . . . . .	48
3.1	Geometria do bocal de Barschdorff [145] . . . . .	62
3.2	Geometria da simulação de água com malha de 100 nós . . . . .	63
3.3	Geometria do bocal convergente-divergente por Arina (Adaptado de ARINA [45]) . . . . .	63
3.4	Perfil de pressão estática de PANDEY e SINGH [83] . . . . .	65
3.5	Perfil de temperatura de PANDEY e SINGH [83] . . . . .	65
3.6	Perfil do número de Mach de PANDEY e SINGH [83] . . . . .	66
3.7	Diagrama de fases do $CO_2$ com condições de entrada para as simulações (Adaptado de TOOLBOX [146]) . . . . .	67

4.1	Teste de malha para taxa de nucleação. . . . .	70
4.2	Teste de malha para raio médio. . . . .	71
4.3	Malha uni-dimensional de 600 nós . . . . .	71
4.4	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $H_2O$ com dados experimentais [88] à temperatura constante de $220K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado . . . . .	73
4.5	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $H_2O$ com dados experimentais [88] à temperatura constante de $230K$ . . . . .	73
4.6	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $H_2O$ com dados experimentais [88] à temperatura constante de $240K$ . . . . .	74
4.7	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $H_2O$ com dados experimentais [88] à temperatura constante de $250K$ . . . . .	74
4.8	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $H_2O$ com dados experimentais [88] à temperatura constante de $260K$ . . . . .	74
4.9	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $H_2O$ com dados experimentais [148] à taxa de nucleação constante de $J = 10000cm^{-3}.s^{-1}$ . . . . .	75
4.10	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $CO_2$ à temperatura constante de $220K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado. . . . .	77
4.11	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $CO_2$ à temperatura constante de $230K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado. . . . .	78
4.12	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $CO_2$ à temperatura constante de $240K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado. . . . .	79
4.13	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $CO_2$ à temperatura constante de $250K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado. . . . .	80
4.14	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $CO_2$ à temperatura constante de $260K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado. . . . .	81
4.15	Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para $CO_2$ à taxa de nucleação constante de $J = 10000cm^{-3}.s^{-1}$ . . . . .	82
4.16	Perfil de supersaturação calculado pelo programa <i>condensationFoam</i> .	83
4.17	Comparação dos perfis da taxa de nucleação calculados pelo programa <i>condensationFoam</i> , por Pandey [151] e por Dykas [152] . . . . .	84
4.18	Perfil axial de super-resfriamento calculado pelo <i>condensationFoam</i> .	84

4.19	Comparação dos perfis do número de gotas calculados pelo programa <i>condensationFoam</i> , por Pandey [151] e por Dykas [152] . . . . .	85
4.20	Comparação dos perfis da fração mássica de líquido calculados pelo programa <i>condensationFoam</i> , por Pandey [151] e por Dykas [152] . . . . .	85
4.21	Comparação dos perfis do raio médio calculados pelo programa <i>condensationFoam</i> , por Pandey [151] e por Dykas [152] . . . . .	86
4.22	Perfil do termo de crescimento de gota para água . . . . .	86
4.23	Comportamento da distribuição de gotas. . . . .	87
4.24	Comportamento das variáveis da fase contínua ao longo do bocal. . . . .	88
4.25	Comportamento das variáveis da fase dispersa ao longo do bocal. . . . .	88
4.26	Comportamento dos fluxos de massa(superior) e calor (inferior) ao longo do bocal. . . . .	89
4.27	Perfis de temperatura ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão contante de 4.0 MPa. . . . .	90
4.28	Perfis de pressão ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura contante de 282K. . . . .	91
4.29	Perfis do número de Mach ao longo do bocal. . . . .	91
4.30	Perfis de super-resfriamento ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa. . . . .	92
4.31	Perfis de super-resfriamento ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K. . . . .	93
4.32	Perfil de super-resfriamento ao longo do bocal da simulação IX . . . . .	93
4.33	Perfis de supersaturação ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa. . . . .	94
4.34	Perfis de supersaturação ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K. . . . .	94
4.35	Perfil de supersaturação ao longo do bocal da simulação IX . . . . .	95
4.36	Perfis dos raios críticos ao longo do bocal à pressão constante de 4.0MPa . . . . .	96
4.37	Perfis dos raios críticos ao longo do bocal à temperatura constante de 282K . . . . .	96
4.38	Perfis das taxas de nucleação ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa. . . . .	97
4.39	Perfis das taxas de nucleação ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K. . . . .	97
4.40	Perfil da taxa de nucleação ao longo do bocal da simulação IX . . . . .	98
4.41	Perfis do número de gotas ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa. . . . .	99
4.42	Perfis do número de gotas ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K. . . . .	99

4.43	Perfil do número de gotas ao longo do bocal da simulação IX. . . . .	100
4.44	Perfis dos raios médios ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa . . . . .	100
4.45	Perfis dos raios médios ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K . . . . .	101
4.46	Perfil do raio médio ao longo do bocal da simulação IX . . . . .	101
4.47	Perfis da fração mássica de líquido ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa . . . . .	102
4.48	Perfis do crescimento de gota ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa . . . . .	103
4.49	Perfis do crescimento de gota ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K . . . . .	103



# Lista de Tabelas

3.1	Características da geometria usada nas simulações . . . . .	64
3.2	Condições de contorno de pressão e temperatura na entrada do equipamento usadas nas simulações . . . . .	67
3.3	Configurações para simulação dos casos com $CO_2$ e $H_2O$ . . . . .	68

# Nomenclatura

## Siglas

CFD *Computational Fluid Dynamics*

DTP Distribuição do Tamanho de Partículas

EBP Equação de Balanço Populacional

MUSCL *Monotone Upstream-centred Scheme*

PSD *Particle Size Distribution*

QMOM *Quadrature Method of Moments*

## Letras Gregas

$\Delta$  Variação de uma certa grandeza física

$\hat{\phi}$  Valor analítico da variável

$\lambda_g$  Condutividade térmica do gás,  $W.m^{-1}.K^{-1}$

$\lambda_i$  Autovalor

$\mu_g$  Viscosidade dinâmica do gás,  $kg.(m^{-1}.s^{-1})$

$\mu_j$  Momento  $j$  da distribuição

$\omega$  Fator Acêntrico,  $[-]$

$\phi$  Variável genérica

$\rho$  Massa específica,  $kg.m^3$

$\sigma$  Tensão superficial,  $N.m^{-1}$

$\tau$  Temperatura adimensional,  $[-]$

$\theta$  Tensão superficial adimensional,  $[-]$

$\tilde{\phi}$  Variável média de Roe

$\xi$  Fator de Lamanna, [-]

### Letras Romanas

$\dot{M}$  Taxa de transferência de massa,  $kg.s^{-1}$

$\dot{Q}$  Taxa de transferência de calor convectiva,  $W$

$\dot{q}$  Taxa de calor gerada,  $J.s^{-1}$

**B** Matriz genérica

**F** Fluxo genérico

**g** Aceleração da gravidade,  $m.s^{-2}$

**K** Autovetor

**n** Vetor normal

**q** Fluxo de calor,  $(J.m).s^{-1}$

**U** Vetor variáveis conservadas

**v** Vetor velocidade,  $m.s^{-1}$

$\omega$  Fator acêntrico

$\bar{V}$  Volume específico,  $m^3.kg^{-1}$

$a_0$  Área superficial da molécula,  $m^2$

$C_g$  Taxa molecular de condensação de um g-mero

$Co$  Número de Courant, [-]

$E$  Energia total por volume,  $J.m^{-3}$

$e$  Energia interna específica,  $J.kg^{-1}$

$E_g$  Taxa molecular de evaporação de um g-mero

$f(r)$  Função de distribuição genérica

$f_g$  Concentração de g-meros em vapor supersaturado

$G$  Energia livre de Gibbs,  $J$

$g$	Número de moléculas do cluster
$g(r)$	Função de crescimento de gota, $m.s^{-1}$
$h$	Entalpia específica, $J.kg^{-1}$
$J$	Taxa de nucleação, $m^{-3}.s^{-1}$
$k_b$	Constante Boltzmann, $[J.K^{-1}]$
$K_r$	Coefficiente de transferência de calor, $W.m^{-1}.K^{-1}$
$l$	Caminho livre médio das moléculas de vapor
$m_g$	massa da molécula de gás, $kg$
$n_g$	Concentração dos g-meros em vapor superaquecido
$p$	Pressão, $Pa$
$P_c$	Pressão crítica, $Pa$
$r$	Raio, $m$
$R_g$	Constante dos gases específica $[J.kg^{-1}.K^{-1}]$
$S$	Supersaturação, $[-]$
$S_\phi$	Termo-fonte
$t$	Tempo, $s$
$T_c$	Temperatura crítica, $K$
$V$	Volume molar, $[m^3.mol^{-1}]$
$W$	Variável de conservação genérica
$w$	Pesos da Quadratura
$y$	Fração mássica, $[-]$
$Z_{RA}$	Fator de compressibilidade, $[-]$
$c$	Velocidade do som, $m.s^{-1}$

### **Superescritos**

$n$	Passo de tempo atual
-----	----------------------

$n + 1$  Passo de tempo seguinte

### **Subscritos**

\* Condição de aglomerado crítico

$b$  Ebulição na condição normal

$c$  Propriedade Crítica

$CL$  Modelo clássico

$g$  Fase Gasosa

$i$  Contador genérico

$ICCT - \xi$  Modelo Modificado Internamente Consistente com correção de Lamanna

$j$  Número de momentos

$l$  Fase Líquida

$m$  Propriedade de mistura

$p$  Partícula

$r$  Propriedade Reduzida

$s$  Saturação

$v$  Volumétrica ou de campo

$x$  Direção x

$y$  Direção y

$z$  Direção z

# Capítulo 1

## Introdução

A presença de  $CO_2$  no gás natural possui alguns efeitos negativos, dentre eles estão: (a) redução do poder calorífico do gás natural, (b) o aumento da corrosão dos tubos e, portanto, materiais resistentes à corrosão devem ser usados, aumentando o custo de instalação, (c) em altas concentrações requer outro processo de separação, além de enormes instalações de armazenamento [1]. Portanto, várias tecnologias e processos para a remoção desse  $CO_2$  do gás natural, são avaliados e utilizados pela indústria. Dito isso, as tecnologias mais difundidas para remoção de  $CO_2$  do gás natural envolvem a separação por absorção [2, 3], por adsorção [4, 5], criogênica [6] e por membranas [7]. Dentre os métodos existentes, a absorção química é o mais usada para a separação de  $CO_2$ . Este método pode efetivamente remover o  $CO_2$  a um nível aceitável, mas com um intenso gasto energético atrelado à necessidade de grandes instalações. Além disso, o uso de soluções alcalinas como líquidos de absorção apresenta várias limitações, como alto consumo de energia para regeneração, a alta taxa de corrosão do equipamento e a possibilidade de um elevado impacto ambiental [8].

Neste contexto, surgem os separadores supersônicos, cuja aplicação principal é separar determinados componentes de uma mistura gasosa [9]. Uma das vantagens da separação supersônica está associada à sua eficiência na extração de impurezas presentes no gás natural. Ademais, a unidade de separação supersônica é viável devido à sua estrutura compacta, além de exigir menor custo operacional relativo. Existem vários modelos de separadores supersônicos, dentre eles, dois são considerados os mais recentes e eficientes, denominados 3S e Twister [10, 11]. Uma revisão mais detalhada da literatura referente aos dispositivos citados é apresentada no próximo capítulo.

A tecnologia de separação supersônica baseia-se no resfriamento através da expansão dentro da seção divergente do equipamento, o que levará à condensação dos componentes de interesse. Como consequência do campo rotacional, as gotas formadas são direcionadas para a parede do equipamento e formam um filme líquido

encaminhado para uma seção de coleta [12]. Portanto, uma das condições fundamentais da separação está relacionada à possibilidade de prever e controlar o processo de condensação do  $CO_2$  no gás natural.

A transição de fase na condensação está associada à formação da nova interface entre a fase vapor e a líquida. Para formá-la, uma barreira de energia precisa ser ultrapassada. A condensação do vapor é iniciada, em princípio, assim que o estado termodinâmico do fluido cruza a linha de saturação no diagrama de Mollier [13]. No entanto, este não é o caso em aplicações práticas, como a condensação homogênea em bocais transônicos ou supersônicos. Quando o fluido se expande através de um bocal supersônico, devido ao rápido resfriamento, a fase gasosa se afasta do equilíbrio. Portanto, o vapor não condensará imediatamente e atingirá um alto grau de supersaturação, indicando que a fase atingiu um estado de equilíbrio metaestável [14]. Dito isso, a transição para o estado líquido é precedida pela nucleação, que ocorre no estado metaestável, e pode ser definida como a formação de pequenos aglomerados de fase líquida dentro do vapor. O processo de nucleação é, portanto, crucial para a compreensão da dinâmica da transição de fase.

A nucleação pode ocorrer de duas formas diferentes, denominadas homogênea e heterogênea, e diferenciadas pela maneira como são iniciadas. A nucleação homogênea produz seus próprios aglomerados estáveis (núcleos) de gotas quando, no vapor supersaturado, eles ultrapassam a barreira energética mínima (energia livre de Gibbs). No caso da nucleação heterogênea, requer a introdução de partículas externas, que atuam como núcleos de condensação, para ativar o processo [15]. É importante destacar que a barreira energética mínima associada à nucleação heterogênea é muito menor que a da nucleação homogênea. Como consequência, a nucleação heterogênea é geralmente encontrada na natureza, como na formação de nuvens atmosféricas.

O período de duração do estado metaestável dependerá do grau de supersaturação que o fluido alcançou. Os aglomerados metaestáveis formados, quando excedem um tamanho crítico, resultam no crescimento das gotas e na volta ao estado de equilíbrio. Durante o processo de crescimento de gotas, uma quantidade significativa de calor latente é liberada no escoamento. Esta liberação de calor resulta em efeitos compressíveis que levam ao aparecimento de um choque, interrompendo assim o processo de nucleação e, finalmente, formando uma fase líquida estável. O crescimento dessas gotas ocorre através do fluxo constante de moléculas capturadas do vapor supersaturado. Isso causará uma diminuição da pressão de vapor e uma diminuição correspondente da supersaturação. A liberação do calor latente causa o aumento tanto da temperatura da gota quanto da temperatura do vapor [15] e, consequentemente, pode causar um forte impacto no padrão de escoamento. O tamanho das gotas abrange uma ampla faixa de escalas, começando no tamanho nanométrico

( $10^{-9}m$ ), até alcançar a escala de micrômetros ( $10^{-6}m$ ).

## 1.1 Contexto e Motivação

Como uma das fontes de energia mais seguras e limpas, o gás natural desempenha um papel cada vez mais importante no suprimento de energia. A ExxonMobil projetou que a demanda global por gás natural aumentará 45% e ultrapassará o carvão até 2040 [16]. O gás natural é uma mistura de múltiplos componentes, com metano ( $CH_4$ ) como constituinte primário, vapor de água, gases inertes, dióxido de carbono ( $CO_2$ ), sulfeto de hidrogênio ( $H_2S$ ) e outras impurezas. A presença de  $CO_2$  diminuirá o poder calorífico do gás natural e causará a corrosão de componentes do processo na presença de água. Portanto, ele deve ser removido do gás natural para atender aos requisitos de qualidade do encanamento segundo as especificações do gás comercial.

A tecnologia de separação supersônica se apresenta como uma escolha promissora para separação de  $CO_2$ , com alta eficiência e ocupando pouco espaço. Os separadores supersônicos combinam as propriedades de resfriamento de um bocal convergente-divergente com os princípios da separação centrífuga. O conceito foi desenvolvido há mais de meio século e foi modificado nas décadas subsequentes. Atualmente, esta tecnologia tem sido amplamente estudada para desidratação de gás natural, recuperação de hidrocarbonetos [10, 17, 18] e também para a liquefação de gás natural [19]. Apesar de sua importância, a quantidade de estudos sobre o processo de condensação ainda é insuficiente, dada a complexidade do fenômeno em escoamentos supersônicos, ademais, a maioria dos estudos são voltados para vapor de água. GYARMATHY [20] e YOUNG [21] estudaram o fenômeno de crescimento de gotas e criaram um modelo matemático considerando o efeito do gás não condensável. Depois disso, a caracterização experimental do processo de condensação homogênea no escoamento supersônico foi relatada por LAMANNA [22], que, além de propor aprimoramentos para metodologias experimentais, também apresentou uma correção para a taxa de nucleação proveniente do trabalho de GIRSHICK e CHIU [23] e avaliada para vapor de água. JIANG *et al.* [24] apresentou um estudo teórico e experimental da transferência de massa e calor com uma abordagem multi-componente, em escoamento supersônico, e constatou que existência de vapor de água acelera a condensação do vapor de nonano. Isso ocorre, visto que, o vapor de água atua como núcleo de condensação, permitindo o nonano condense à temperaturas mais baixas de super-resfriamento e super-saturação. CASTIER [25] realizou simulações numéricas do escoamento de gás natural dentro de um bocal convergente-divergente, considerando o equilíbrio de fases e concluiu que a técnica de CFD pode fornecer mais detalhes que a abordagem proposta pelo autor, apesar



dos bons resultados para casos unidimensionais, como posição da onda de choque e número de fases. MARTYUKOVA *et al.* [26] realizou uma investigação sobre as variações no tamanho e na composição de uma gota em uma mistura de dois vapores dentro de um gás carreador. Sua análise mostrou que o tamanho da gota pode diminuir na fase inicial do estabelecimento da concentração da solução estacionária dentro dela, a concentrações diferentes de vapores saturados dos componentes junto com a sub-saturação de um deles.

JAN HALAMA [27] apresentou três modelos eulerianos para o escoamento bifásico de vapor, com condensação em não-equilíbrio e conclui que o modelo de 0-equações é o mais promissor, quando comparado com a modelo de termo-fonte (2-equações) e com o modelo de 4-equações, apesar do primeiro superestimar o aumento de pressão na zona de nucleação. SUN *et al.* [28], YANG *et al.* [29] investigaram as características de condensação do gás com dois componentes e também analisaram os efeitos do gás carreador na distribuição dos parâmetros de condensação, dentro de um bocal supersônico. SUN *et al.* [28] conclui que o processo de condensação ocorre muito mais cedo, com a diminuição do número de gotas nas condições de menor temperatura de entrada, maior pressão de entrada e maior concentração de  $CO_2$ . Enquanto isso, maior fração mássica de líquido é alcançada na saída do bocal à medida que gotas maiores são formadas. No caso de YANG *et al.* [29], relatou que a condensação espontânea do vapor de água não aparecerá imediatamente quando o vapor atingir o estado de saturação. Em vez disso, ocorre depois da garganta do bocal, onde o vapor está no estado de supersaturação.

Apesar de todo o trabalho realizado, uma parte limitada deles considera a polidispersão de partículas. Os principais trabalhos incluem esse efeito são WHITE e HOUNSLOW [30], AFZALIFAR *et al.* [31], ZHU *et al.* [32] e mostram que apesar do problema relacionado ao surgimento de momentos não realizáveis, as previsões do choque de condensação no campo de pressão, e do diâmetro médio pelo modelo mono-disperso desviam consideravelmente dos previstos pela modelagem polidispersa. Além disso, AFZALIFAR *et al.* [31] conclui que a modelagem polidispersa resulta em valores muito mais próximos dos encontrados pelo método E-L tanto para os momentos, como para estimativas das distribuições de tamanho, especialmente na zona de nucleação, com um custo computacional inferior WHITE e HOUNSLOW [30]. Finalmente, os trabalhos que usam *software* de código aberto em seus estudos são ainda mais limitados. Dentre eles destacam-se [33–37], cuja aplicação é voltada para simular configurações de turbomáquinas sem utilizar balanço populacional para considerar a polidispersão das partículas.

## 1.2 Objetivos

### 1.2.1 Objetivo principal

O presente trabalho tem como objetivo principal implementar e avaliar o fenômeno da condensação dentro de um bocal convergente-divergente, usando uma abordagem *density-based*, com acoplamento de uma via. O efeito polidisperso das gotas formadas também é considerado através da equação de balanço populacional, por meio do método dos momentos com fechamento com quadratura. Todos os modelos e algoritmos supracitados são implementados em *software* de código livre.

### 1.2.2 Objetivos específicos

Seguem abaixo os objetivos específicos deste trabalho.

1. Avaliação de diferentes modelos da taxa de nucleação.
2. Implementação do modelo de crescimento de gota, do método dos momentos usando quadratura e acoplamento do algoritmo Chebyshev de inversão, dentro do programa foam-extend-4.0 FOAM-EXTEND [38].
3. Simular e avaliar um caso teste onde ocorre a condensação com água, usando o aplicativo criado.
4. Simular e avaliar o efeito de diferentes condições de temperatura e pressão  $CO_2$  na entrada de um bocal convergente-divergente, nas variáveis características da condensação.

## 1.3 Organização

Neste capítulo, o presente trabalho foi contextualizado e seus objetivos, apresentados.

No Capítulo 2, faz-se uma breve apresentação da modelagem matemática com ênfase na fluidodinâmica computacional e discute-se um pouco sobre os métodos numéricos utilizados para resolução do problema.

O Capítulo 3 explicita os materiais empregados no trabalho. Além disso, são exibidos as geometrias, malhas e métodos numéricos selecionados para realização das simulações.

Em seguida, no Capítulo 4, são apresentados e discutidos os resultados. Tal exibição é dividida em avaliação dos termos fonte da equação de balanço populacional com dados experimentais, simulação de um caso teste com água e avaliação da condensação para diferentes condições de entrada com dióxido de carbono puro.

Finalmente, o Capítulo 5 aborda uma breve conclusão, além de considerações finais, junto com algumas sugestões para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Revisão bibliográfica

### 2.1 Separador supersônico

No geral, o separador supersônico possui três partes, cada uma com suas respectivas função e importância para a eficiência do equipamento. A primeira é denominada seção de expansão, seguida da seção de separação e por último a seção de compressão [39], como podem ser observadas na Figura 2.1.

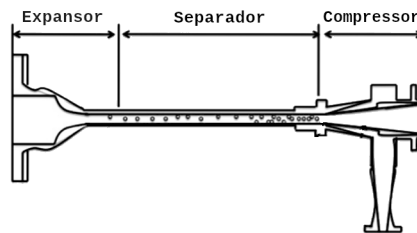


Figura 2.1: Esquema de um separador supersônico. Adaptado de [40]

Na primeira seção, onde o bocal convergente-divergente está localizado, o fluido entra com velocidade subsônica, cuja relação entre as velocidades do gás e do som (Número de Mach) assume valores inferiores à 1.0 na parte convergente do bocal. Em seguida, com a diminuição da área do bocal ao longo da trajetória, a velocidade do fluido aumenta enquanto a temperatura e a pressão diminuem, transformando energia potencial (pressão e temperatura) em energia cinética (velocidade), expandindo do fluido. Em seguida, o fluido escoar pela garganta localizada entre a seção convergente e divergente, onde a velocidade subsônica atinge alcança uma velocidade supersônica passando pela sônica, onde o valor do Mach será 1.0. A condição supersônica, junto com o aumento da área do bocal ao longo do escoamento, faz a velocidade do fluido aumentar, enquanto a pressão e a temperatura continuam diminuindo até atingir a temperatura de orvalho do gás, e a conseqüente condensação desse gás. Na seção seguinte, as gotas provenientes da condensação são direcionadas para parede, através de um campo centrífugo que pode atingir até 500000 vezes a

gravidade [41], formando um filme líquido. Finalmente, após a separação da corrente gasosa do filme líquido formado, com a finalidade de recuperar a pressão inicial do gás, uma onda de choque é gerada na última seção. Este efeito é alcançado por um rápido aumento do diâmetro do bocal, que acarretará na desaceleração do gás, aumento da temperatura e pressão de forma repentina[42], podendo recuperar cerca de 65-80% da pressão de entrada [43].

Os pioneiros dessa tecnologia são dois grupos separados, que desenvolveram seus projetos de forma paralela. O primeiro é denominado Twister BV com o modelo Twister, estudado por Prast [11], e o segundo, Translang Technologies com o separador 3S [10]. O separador Twister, que é baseado em um dispositivo de secagem de ar, foi originalmente desenvolvido pela Stork Product Engineering BV em 1989. Este modelo usou uma lâmina defletora na seção supersônica gerando o campo centrífugo necessário para a separação de partículas condensadas, sendo agora denominado Twister-I. No entanto, o projeto Twister possuía uma queda de temperatura em torno de  $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$  e uma queda de pressão correspondente de até 30%. Com isso, uma parte significativa do gás sai em forma de névoa, forçando o projeto a ter um separador secundário chamado vaso de desgaseificação. Além disso, o tempo de permanência das gotas também é curto, tornando o desempenho da separação muito baixo. Portanto, o bocal foi otimizado incluindo um corpo central e uma configuração de bocal anular [39]. No Twister-II a geração do campo centrífugo foi movida para a seção subsônica do bocal, para melhorar a eficiência de separação, como ilustrado na Figura 2.2

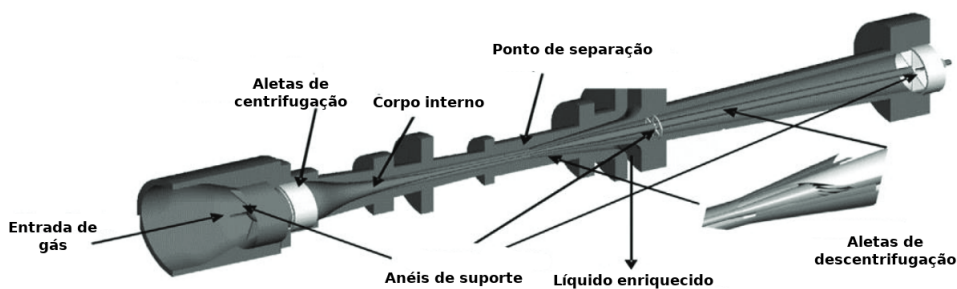


Figura 2.2: Esquema de um separador supersônico modelo Twister-II. Adaptado de [10]

O 3S apresenta uma abordagem híbrida dos dois dispositivos Twister. Este equipamento tem um gerador de campo centrífugo na entrada subsônica do bocal e não possui corpo central, como evidenciado na Figura 2.3

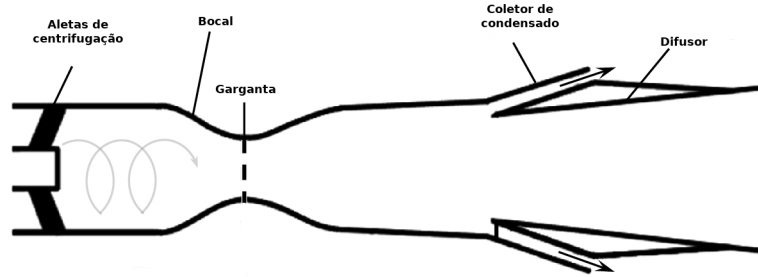


Figura 2.3: Esquema de um separador supersônico modelo 3S. Adaptado de [40]

O Separador 3S utiliza o princípio fundamental da expansão adiabática através de um bocal, porém, com um campo centrífugo incluído na região de separação para aumentar o efeito dessa força. Um direcionador de pás é outra característica que o diferencia de outros desenhos. Ele possui uma queda de temperatura de até  $-70\text{ }^{\circ}\text{C}$ , que é possível com números de Mach na faixa de 1.5 a 2. Devido à baixa temperatura, o uso potencial de 3S estende-se à diversas aplicações, como, produção de GNL, remoção de  $\text{CO}_2$ , recuperação de etano, com capacidade de operação na temperatura criogênica para gás natural. Ele é patenteado em muitos países, incluindo EUA, Canadá e Holanda [39].

Finalmente, como o objeto de estudo do presente trabalho é voltado para o fenômeno que ocorre, especificamente, no bocal convergente-divergente, uma revisão do tipo de escoamento nesse equipamento é realizada na próxima seção.

## 2.2 Escoamento compressível

Para a maioria dos escoamentos, pode-se desconsiderar os efeitos de compressibilidade e de variação da densidade do fluido. Dada a importância da velocidade do gás ( $v$ ) em relação a velocidade do som ( $c$ ), um parâmetro foi definido para uso nos estudos de escoamento compressível denominado número de Mach, esse é representado pela equação abaixo:

$$Ma \equiv \frac{v}{c}. \quad (2.1)$$

Normalmente, valores maiores que 0.3 são suficientes para considerar efeitos de compressibilidade do fluido segundo FOX *et al.* [44]. No equipamento de separação supersônica o número de Mach ultrapassa valores de 0.3, como observado na seção anterior.

Na modelagem de escoamentos compressíveis deve-se combinar a mecânica dos fluidos com a termodinâmica. Para o presente trabalho, foi assumido escoamento invíscido como em ARINA [45]. Em tais casos, as equações que descrevem a conservação do momento (sem um termo viscoso), a conservação de massa e a con-

servação de energia são simplificadas. Não há necessidade de um modelo de turbulência, uma vez que a viscosidade do turbilhão não é contabilizada. Nos casos em que negligencia-se a transferência de momento viscoso, geralmente, a transferência de calor por meio da condução nas equações de energia também é negligenciada [46].

As equações de conservação para escoamento invíscido, condutividade térmica insignificante e em condições adiabáticas são denominadas equações de Euler. Tais equações estão representadas de forma simplificada abaixo:

Continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.2)$$

Momentum:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + p) = 0, \quad (2.3)$$

Energia:

$$\frac{\partial \left[ \rho \left( e + \frac{v^2}{2} \right) \right]}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ \rho \mathbf{v} \left( e + \frac{u^2}{2} + p \right) \right] = 0, \quad (2.4)$$

onde  $e = \frac{p}{(1-\gamma)\rho}$ , com  $e$  sendo energia interna específica e  $\gamma$  a razão entre as capacidades caloríficas,  $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ .

A modelagem de escoamento com condensação requer propriedades termodinâmicas em condições metaestáveis, que normalmente são obtidas por extrapolação. Como não há dados experimentais disponíveis, nenhuma das equações de estado está devidamente validada nesta região [37]. Além disso, o *software* de código aberto utilizado como base para implementação não possui biblioteca para simulações com gás real, logo, a abordagem usada foi de gás ideal seguindo a formulação presente em FOX *et al.* [47].

Como a variação da densidade está relacionada a outras grandezas, sendo algumas delas variáveis de estado, é necessária uma revisão da termodinâmica associada ao fenômeno em questão. Com isso a relação entre densidade, pressão e temperatura é obtida pela equação de estado (EOS) abaixo:

$$p = \rho R_g T, \quad (2.5)$$

sendo:

$$R_g = \frac{Ru}{M_m}. \quad (2.6)$$

Ao definir a energia interna,  $u$ , em função do volume,  $v$ , e da temperatura,  $T$ ,

$(u(T, v))$ , utilizando a definição de calor específico a volume constante,  $c_v$ , tem-se:

$$de = c_v dT + \left( \frac{\partial u}{\partial v} \right)_T dv. \quad (2.7)$$

Outra variável de estado que precisa ser definida é a entalpia,  $h$ . Quando representada em função da temperatura e pressão torna-se:

$$dh = c_p dT + \left( \frac{\partial h}{\partial p} \right)_T dp. \quad (2.8)$$

No caso de gás ideal, como a energia interna depende da temperatura, logo, a entalpia também variará com a temperatura, dada a relação :  $h \equiv e + p/\rho$ .

Finalmente as duas variáveis serão representadas em função da temperatura através das equações abaixo:

$$de = c_v dT, \quad (2.9)$$

$$dh = c_p dT. \quad (2.10)$$

Outra variável importante é a entropia,  $s$ , pois sua conservação pode ser usada para determinar diversas variáveis em um determinado ponto do sistema partindo de outro conhecido.

A partir da 2ª lei da termodinâmica, onde  $Q$  é quantidade de calor do sistema:

$$ds \geq \left( \frac{\delta Q}{T} \right)_{rev}. \quad (2.11)$$

Quando aplicada em um processo reversível e adiabático, este torna-se isentrópico, logo:

$$ds = 0. \quad (2.12)$$

Se o processo for irreversível e adiabático tem-se:

$$ds > 0. \quad (2.13)$$

De forma análoga ao realizado para energia interna e entalpia, é possível determinar a relação entre pressão e volume específico para um processo isentrópico:

$$pv^\gamma = \text{const.} \quad (2.14)$$

A partir dessas expressões para as propriedades de estado e das equações oriundas dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia é possível modelar o escoamento compressível, que, no caso do presente trabalho, ocorre em um bocal



convergente-divergente. O primeiro parâmetro a ser calculado é a velocidade do som, pois servirá de base para o cálculo das outras propriedades. Assim, através da combinação das equações da continuidade e da quantidade de movimento obtém-se:

$$c = \sqrt{\frac{dp}{d\rho}}. \quad (2.15)$$

Caso o gás ideal estiver sendo considerado, então:

$$c = \sqrt{\gamma RT}. \quad (2.16)$$

Os valores das variáveis de interesse em um determinado ponto são relacionados com aqueles na condição de referência, através das relações abaixo, dado o escoamento isentrópico de um gás ideal:

$$\frac{p_0}{p} = \left[ 1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma^2 \right]^{\gamma/(\gamma-1)}, \quad (2.17)$$

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma^2, \quad (2.18)$$

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left[ 1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma^2 \right]^{1/(\gamma-1)}. \quad (2.19)$$

O número de Mach nas equações acima pode ser determinado a partir da aplicação das equações do escoamento em uma seção reta do bocal, sendo necessário saber como a área da seção reta varia ao longo do bocal.

Para o caso de gás ideal e escoamento isentrópico, as equações são apresentadas abaixo:

$$\frac{dp}{\rho v^2} = \frac{dA}{A} \frac{1}{1 - Ma^2}, \quad (2.20)$$

$$\frac{dv}{v} = - \frac{dA}{A} \frac{1}{1 - Ma^2}, \quad (2.21)$$

A área da seção em relação a uma área de referência também pode ser calculada em função do número de Mach, de forma análoga ao que é feito para temperatura e pressão, usando como referência a área em que  $Ma = 1$  (área crítica), têm-se:

$$\frac{A}{A^*} = \frac{1}{Ma} \left[ \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma^2}{\frac{\gamma+1}{2}} \right]^{(\gamma+1)/2(\gamma-1)}. \quad (2.22)$$

A partir dessas equações pode-se calcular as propriedades do escoamento em qualquer ponto do bocal convergente-divergente, considerando-se gás ideal e escoamento isentrópico. As equações para o escoamento isentrópico em um bocal convergente-

divergente podem ser aplicadas para qualquer ponto desde a entrada até a saída, no entanto, se houver um ponto no qual ocorre uma onda de choque, essas equações apenas podem ser aplicadas antes desse ponto, considerando o mesmo estado de referência da entrada. Se houver escoamento supersônico na secção divergente do bocal, e a pressão imposta na saída for maior que a atingida durante o escoamento supersônico, então em algum ponto deverá ocorrer o choque para elevar a pressão ao valor definido da saída. O choque é caracterizado por uma descontinuidade do escoamento, acompanhado de aumento de entropia. Essa variação leva a um novo estado de referência para aplicação das equações descritas anteriormente.

Com a premissa de gás ideal, as propriedades do escoamento podem ser escritas em função do número de Mach antes do choque, usando as equações:

$$\frac{p_{02}}{p_{01}} = \frac{\left[ \frac{\frac{\gamma+1}{2} Ma_1^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_1^2} \right]^{\gamma/(\gamma-1)}}{\left[ \frac{2\gamma}{\gamma+1} Ma_1^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right]^{1/(\gamma-1)}}. \quad (2.23)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_1^2\right) \left(\gamma Ma_1^2 - \frac{\gamma-1}{2}\right)}{\left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^2 Ma_1^2}. \quad (2.24)$$

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} Ma_1^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1}. \quad (2.25)$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{v_2}{v_1} = \frac{\frac{\gamma+1}{2} Ma_1^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_1^2}. \quad (2.26)$$

$$Ma_2^2 = \frac{Ma_1^2 + \frac{2}{\gamma-1}}{\frac{2\gamma}{\gamma-1} Ma_1^2 - 1}. \quad (2.27)$$

A posição da onda de choque pode ser determinada de forma iterativa, de maneira que a condição a após a onda de choque atenda a condição de contorno na saída do bocal.

Tal processo é classificado como irreversível devido à formação de onda de choque na seção divergente do separador supersônico. Com isso, CASTIER [25] descreve a modelagem do equipamento com uma abordagem unicamente termodinâmica através de balanços macroscópicos. Foram consideradas diferentes regiões do escoamento, nas quais a seção convergente e divergente são isentrópicas, exceto quando há a formação da onda de choque. No entanto, a metodologia de resolução do problema descrito é simplificada e limitada à casos específicos, quando comparada à metodologia de resolução via CFD. Na metodologia CFD não é necessário o uso de diferentes equações para cada seção do equipamento, além de possuir uma solução que abrange casos mais complexos.

YANG *et al.* [48] utiliza CFD para avaliar a diferença entre a abordagem de gás

ideal e gás real, com diferentes equações de estado cúbicas, em um separador supersônico. Os resultados mostram que há uma notável diferença entre a abordagem de gás ideal para gás real. Esse comportamento pode ser explicado pelo fato do separador supersônico trabalhar em altas pressões, logo, o gás tende a desviar da idealidade. Observam-se algumas oscilações em YANG *et al.* [48] não observadas em CASTIER [25]. Segundo MERRIAM [49], algumas oscilações espúrias estão presentes na solução numérica aplicada em CFD devido à destruição de entropia, violando a segunda lei da termodinâmica.

Na descrição do processo físico abordado neste trabalho, deve-se caracterizar o tipo de escoamento a ser estudado, no que tange à quantidade de fases envolvidas. Nos casos de escoamentos com uma fase, os modelos são mais simples, pois as equações de conservação da quantidade de movimento, conservação da massa e conservação da energia são resolvidas apenas para uma das fases. Contudo, como a maioria dos escoamentos na natureza são multifásicos, estes possuem um alto grau de complexidade. Portanto, modelos matemáticos para as outras fases presentes devem ser utilizados, acrescentando termos e equações constitutivas à modelagem.

## 2.3 Escoamento multifásico

A presença simultânea de várias fases diferentes em escoamentos externos ou internos é encontrada no meio ambiente e em numerosos processos industriais. Denominados escoamentos multifásicos, esses tipos de escoamento podem existir em diferentes formas, dependendo da respectiva distribuição de fase. De acordo com ISHII [50], escoamentos gás-liquido podem ser agrupados de acordo com a topologia da interface entre as fases em três classes distintas: escoamentos separados, mistos ou dispersos. Estes são detalhados abaixo [51]:

- Fases Separadas: Mais de um fluido imiscível em fases contínuas e separadas por uma interface.
- Fases Dispersas: Número finito de fases espalhadas pelo volume de fases contínuas, como gotas, partículas ou bolhas.
- Fases Mistas: Presença de fases separadas e dispersas.

No presente trabalho, o escoamento envolve a expansão do vapor puro através de um bocal convergente-divergente e a condensação não começa assim que a linha de saturação é cruzada. Sem superfícies sólidas presentes escoamento para promover a condensação (promotores de nucleação), uma barreira de energia livre para formar um grande número de gotas deve ser superada e o vapor torna-se supersaturado (ou super-resfriado). O estado metaestável é subsequentemente revertido para um

estado de equilíbrio através da formação e crescimento de gotas. Este processo caracteriza um escoamento multifásico disperso de gotas (fase dispersa) em um gás carreador (fase contínua).

Para determinar um modelo matemático apropriado, fatores como o processo físico e o regime de escoamento devem ser definidos com antecedência. Além disso, modelos complexos de difícil aferição, como os relacionados à turbulência, reação química ou transferência de massa, torna o problema ainda mais de complexo. Por esta razão, gerar modelos realistas e mais simples é o fator chave para simulações de escoamento multifásico [51].

Dentre as principais abordagens, duas destacam-se na literatura [52] e ambas calculam o campos da fase contínua usando a abordagem Euleriana, enquanto que o escoamento da fase dispersa pode ser calculado de modo Lagrangeano (entidades discretas), ou pela abordagem Euleriana-Euleriana, em que a fase dispersa é considerada contínua, em que todas as fases são meios interpenetrantes.

Por muito tempo, a prática comum era empregar o método Euleriano-Lagrangeano (E-L) para preservar a distribuição do tamanho de gotas [53–55]. Neste método, o referencial Euleriano é usado para resolver numericamente as equações de movimento relacionadas ao vapor, e a estrutura Lagrangeana, para rastrear a geração e o crescimento das gotas, armazenando as distribuições de tamanho das partículas de forma discreta. Entretanto, essa abordagem não é recomendada com o aumento do número de partículas, pois, a integração dos dois referenciais é difícil de alcançar [56]. Além disso, quando a abordagem supracitada é comparada com o método totalmente Euleriano, o último possui várias vantagens que foram descritas detalhadamente por YOUNG [53] em relação ao Lagrangeano. Logo, o desenvolvimento começou a se concentrar nos cálculos pela abordagem Euleriana-Euleriana (E-E), que será detalhada na próxima seção.

### 2.3.1 Abordagem Euleriana-Euleriana

A abordagem Euleriana-Euleriana modela o escoamento de todas as fases através da abordagem euleriana baseada na suposição interpenetrante do contínuo. Essa abordagem, é baseada na promediação das equações de conservação usando médias volumétricas temporal ou amostral, para descrever os perfis dinâmicos de ambas as fases em uma escala de tamanho superior à molecular. Se modelado corretamente, esta abordagem pode ser aplicada a escoamentos multifásicos com elevadas frações volumétricas da fase dispersa [57].

O modelo mais geral conhecido da abordagem E-E é denominado modelo multifluido. Ele trata cada fase como um fluido separado, e consiste em escrever equações de balanço para a massa, momento e energia de cada fase, juntamente com a troca

de termos entre as fases [37].

Com isso, as partículas da fase dispersa não são contaminantes passivos e a sua presença pode influenciar o escoamento da fase contínua. Quando o tamanho de partícula da fase dispersa é muito pequeno ou a carga de massa das partículas é pequena, a influência das partículas no campo da fase contínua pode ser desprezada. Isso é chamado de acoplamento de uma via. Quando a fração volumétrica da fase dispersa é aumentada, sua presença pode afetar significativamente a fase contínua. Isso é denominado de acoplamento de duas vias. Se a densidade do número de partículas for grande o suficiente para permitir interações diretas partícula-partícula, um acoplamento de quatro vias pode ser necessário: fase contínua-dispersa; fase dispersa-contínua; fase dispersa-dispersa (ida e volta).

### 2.3.1.1 Modelo multi-fluido

No modelo de dois fluidos, cada uma das fases é considerada como tendo uma fração de volume determinada separadamente (cuja soma é a unidade), que pode ser definida como a probabilidade de dada fase estar presente em certo instante de tempo em um ponto no espaço (média amostral). Além disso, cada fase também possui um campo de velocidade específico. Com isso, equações de conservação para o escoamento de cada espécie podem então ser escritas diretamente. Entretanto, devido à perda de informação ao considerar a promedição, termos adicionais aparecem nas equações de conservação de cada fase para representar os fenômenos que ocorrem em escalas menores que a escala da média necessitando de uma modelagem própria [58, 59].

As leis de conservação exatas incluem conservação de energia, conservação do momento linear, conservação do momento angular. Existem também muitas leis de conservação aproximadas, que se aplicam a quantidades como massa, por exemplo. Uma lei de conservação local é geralmente expressa matematicamente como uma equação de continuidade, uma equação diferencial parcial que dá uma relação entre a magnitude da quantidade e o transporte dessa quantidade. As equações instantâneas locais que descrevem ambas as fases podem então ser calculadas em média no volume, considerando a densidade aparente de cada uma das fases. Maiores detalhes sobre a teoria de formulação e modelagem multi-fluido e seus respectivos termos podem ser encontrados em diversos trabalhos [51, 58–61].

No contexto da condensação em escoamento supersônico, o modelo supracitado é muitas vezes simplificado para o modelo de mistura ou para o modelo de termos fonte [62], que serão detalhados a seguir. As equações que descrevem a fase líquida são simplificadas através de alguma hipóteses específicas para escoamentos com condensação. A primeira assume que somente a condensação homogênea ocorre, isso implica que o fenômeno a nucleação do processo é homogêneo, ou seja, sem partículas

externas. A segunda considera que as pressões das fases são próximas, com isso  $p \simeq p_g \simeq p_l$ . No caso da terceira hipótese, as gotas são consideradas tão pequenas, que se deslocam com a velocidade do vapor, logo, só uma equação de *momentum* necessita ser resolvida. Finalmente, a fração volumétrica não assume valores elevados, por isso o volume ocupado pelo líquido pode ser negligenciado. Essas hipóteses são, para maioria dos casos, uma excelente aproximação para escoamentos com nucleação homogênea [30]

### 2.3.1.2 Modelo Mistura

O modelo de mistura é um dos mais encontrados e utilizados, segundo STARZMANN *et al.* [63]. Nele, ao aplicar as hipóteses supracitadas, obtém-se um sistema de equações para a densidade, *momentum* e energia da mistura,  $m$ , com mais duas equações de transporte adicionais, uma para a fração mássica de líquido (Equação 2.31) e outra para o número de gotas por unidade de massa (Equação 2.32). Essas equações estão representadas abaixo, assumindo as hipóteses feitas nas equações de Euler:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}) = 0, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \rho_m \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v} \mathbf{v} + p \mathbf{I}) = \mathbf{0}, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial \rho_m E_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v} H_m) = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial \rho_m y}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v} y) = m_l, \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial \rho_m N}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v} N) = J. \quad (2.32)$$

Onde  $N$  é o número de gotas por unidade de massa,  $y$  é a fração mássica de líquido,  $m_l$  é a taxa mássica de líquido por unidade de volume,  $J$  é a taxa de nucleação baseada em massa.,  $E_m$  é a energia interna total da mistura e  $H_m$  é a entalpia total da mistura. O termos acima serão explicitados na seção de modelagem da fase dispersa. Nessa abordagem, o sistema de equações anterior é formulado em função das quantidades encontradas na mistura e o acoplamento das fases é baseado somente nas definições dessa mistura apresentadas abaixo:

$$\frac{1}{\rho_m} = \frac{1-y}{\rho_g} + \frac{y}{\rho_l}, \quad (2.33)$$

$$e = (1 - y)e_g + Y e_l. \quad (2.34)$$

Com  $e$  como energia interna específica e a pressão da mistura pode ser iterada de Equação 2.35

$$e - (1 - y)e_g(\rho_g, p) + y e_l(T_s(p), p) = 0 \quad (2.35)$$

Face ao exposto, apesar da simplicidade desse modelo, é necessário cautela ao usá-lo, pois, a dependência adicional de propriedades termodinâmicas, como a pressão na fração mássica de líquido influenciam na implementação na implementação vai influenciar no cálculo dos fluxos numéricos, na reconstrução e na derivação do jacobiano do fluxos advectivos. Além disso, adiciona-se um processo iterativo no cálculo [37].

### 2.3.1.3 Modelo de Termo-fonte

O outro modelo, também muito utilizado em diversos trabalhos [28, 64], é o modelo de termo-fonte. Nele as fases são acopladas diretamente por termos-fonte apropriados. São eles, fluxo de massa proveniente da condensação e as perdas associadas no momento e energia, onde a liberação de calor latente é contabilizada, são subtraídos das equações de transporte que caracterizam a fase gasosa. Assim, o sistema de equações é formulado em termos de propriedades de gás,  $g$ , e a pressão pode ser calculada diretamente a partir da equação de estado  $p = p(\rho_g, e_g)$ . Com isso, o sistema de equações assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}) = -m_l \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial \rho_g \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v} \mathbf{v} + p \mathbf{I}) = -m_l \mathbf{v} \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \rho_g E_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v} H_m) = -m_l (H_g - H_{lv}) \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial \rho_g y}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v} y) = m_l \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial \rho_g N}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v} N) = J \quad (2.40)$$

No geral, o modelo de termo-fonte possui a grande vantagem da fração mássica de líquido não influenciar diretamente o cálculo das propriedades termodinâmicas da fase gasosa e o cálculo do escoamento, logo, a reconstrução dos fluxos numéricos só devem ser estendidos para dois escalares.

Finalmente, ambos os modelos supracitados assumem que a distribuição de gotas pode ser adequadamente representada por uma mono-dispersão equivalente de tamanho médio seguindo a Equação 2.41:

$$\bar{r} = \left( \frac{3y}{4\pi\rho_l N} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.41)$$

Observa-se que nenhum dos modelos acima considera a polidispersão das gotas. O uso de uma modelagem que considere os efeitos da polidispersão de gotas pode ser justificado, não só devido ao crescente interesse em determinar a influência de bolhas de gás, gotas líquidas e partículas sólidas nos escoamentos, mas também, devido à necessidade de modelar o balanço da população de partículas (a micro-física que ocorre na meso-escala).

Como resultado, muita atenção foi concentrada na descrição da evolução espacial e temporal através da formação e destruição de aglomerados provenientes de interações entre as partículas discretas e redemoinhos em escoamentos turbulentos. A questão geral, especialmente usando a formulação macroscópica baseada nas propriedades médias das equações de transporte, é a determinação dos termos de transferência interfacial para fornecer o fechamento apropriado para as equações. Uma dessas abordagens é a equação de balanço populacional, especialmente para determinar a distribuição de tamanho local dos elementos discretos no espaço e no tempo[65]. A aplicação dessa abordagem em escoamentos com vapor úmido tem recebido cada vez mais atenção [66–68].

Alguns autores como BLONDEL *et al.* [69] e AFZALIFAR *et al.* [31] a usam para caracterizar a fase dispersa em escoamentos com condensação homogênea em escoamentos supersônicos. No caso de BLONDEL *et al.* [69] o método que considera a polidispersão é capaz de capturar adequadamente o choque de condensação, distribuição de gotas e até mesmo a frequência de um fenômeno instável, como a oscilação de uma onda de choque na presença de condensação. AFZALIFAR *et al.* [31] obteve resultados semelhantes comparando as duas modelagens, já que, o modelo monodisperso não prevê com precisão a localização e as propriedades corretas do ponto de Wilson. O ponto de Wilson pode ser definido como a localização da pressão mais baixa, maior taxa de nucleação (ou maior supersaturação).

Por conseguinte, a modelagem através da equação de balanço populacional foi escolhida para caracterização da fase dispersa no presente trabalho. Diante disso, a próxima seção é dedicada à formulação da mesma.

#### 2.3.1.4 Balanço populacional

O balanço populacional é especificamente utilizado para considerar um balanço na população das partículas, além dos balanços de *momentum*, massa e energia. O aco-



plamento do modelo de fluidodinâmica computacional para escoamentos multifásicos com modelos apropriados de balanço populacional é cada vez mais empregado para prever a evolução da distribuição de tamanho de partículas e, conseqüentemente, para melhorar os processos de cristalização, precipitação, condensação e polimerização de materiais, para uma ampla variedade de aplicações. Em essência, o balanço populacional de qualquer sistema é um registro do número de bolhas, gotas e partículas sólidas, cuja presença afeta o comportamento geral do sistema multifásico em consideração. O registro desses elementos discretos depende dinamicamente dos processos de nascimento, morte e crescimento, que criam novos elementos discretos e eliminam as partículas existentes dentro de um espaço definido. Como escoamentos multifásicos, geralmente contêm milhões ou bilhões de partículas discretas que estão variando simultaneamente no espaço e ao longo do tempo, a viabilidade da simulação numérica direta na resolução de tais escoamentos ainda está muito além da capacidade dos recursos computacionais existentes. O balanço populacional, que registra o número de partículas discretas como uma função média através da equação de balanço populacional (EBP), tem se mostrado extremamente promissor no tratamento da complexidade do escoamento, devido à seus requisitos computacionais comparativamente mais baixos [65].

Nesse contexto, a população de partículas pode ser tratada não apenas como sendo distribuída no espaço físico, mas também em um espaço de propriedades das partículas. Então, as variáveis dependentes desse sistema podem existir em duas coordenadas diferentes: coordenadas internas e externas [70]. O espaço contendo as coordenadas interna e externa é referido como o espaço de fase da partícula. Nesse contexto, as coordenadas externas são referentes ao movimento através do espaço físico, e as coordenadas internas, através do espaço de propriedades da partícula. Em outras palavras, as coordenadas externas referem-se à localização espacial de cada partícula no espaço físico, enquanto as coordenadas internas estão relacionadas principalmente com as propriedades internas das partículas, como tamanho, área de superfície, volume, composição e assim sucessivamente. Neste espaço, a quantidade de interesse básico, que é útil para a caracterização de bolhas distintas, partículas sólidas ou gotas, é a função de densidade numérica (FDN). O balanço populacional pode, portanto, ser considerado como o transporte para esta densidade e o balanço numérico para partículas de um estado particular. A evolução da FDN dentro do sistema deve considerar as várias maneiras pelas quais as partículas de um estado específico podem ser criadas, eliminadas ou modificadas no sistema.

Segundo RAMKRISHNA [70], é conveniente definir a função de densidade numérica como  $f_1(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$ , que é denotada como o número de partículas por unidade de volume da fase das partículas no tempo  $t$ , nas coordenadas internas  $\mathbf{r} \equiv (r_1, r_2, \dots, r_n)$ , onde  $n$  representa o número de variáveis diferentes associadas

à partícula, e nas coordenadas externas  $\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, x_3)$  que podem ser empregadas para indicar o vetor de posição da partícula. Esta função  $f_1(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$  é considerada suave para que possa ser diferenciada em relação a qualquer um dos seus argumentos tantas vezes quantas forem necessárias. O vetor de estado de partículas é responsável pelas coordenadas internas e externas; o domínio da coordenada interna é tomado como  $\mathbf{V}_r$ , e o domínio das coordenadas externas é  $\mathbf{V}_x$ .

Para facilitar a derivação da equação do balanço populacional, é conveniente designar um de espaço contínuo de partículas que permeia o espaço de coordenadas internas e externas. Em retrospectiva, este contínuo pode deformar-se no espaço e no tempo de acordo com o campo  $\mathbf{v}_x(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$  e  $\mathbf{v}_r(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$  relativo à coordenadas fixas. Com base nesta suposição de continuidade, cada fase de partícula deve ser considerada como um fluido contínuo.

**Equação de Balanço Populacional:** A equação de balanço populacional com coordenadas internas contínuas pode ser representada em sua forma diferencial explicitada abaixo [70]:

$$\frac{\partial(f_1(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t))}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) f_1(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) f_1(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = S_{f_1}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t), \quad (2.42)$$

onde  $\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$  é o vetor velocidade da coordenada externa e  $\dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$  da coordenada interna. O termo no lado esquerdo da equação,  $\frac{\partial f_1(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)}{\partial t}$ , representa a mudança local na função de densidade numérica de partículas com o tempo. A forma do divergente  $\nabla_{\mathbf{x}}$  representa o divergente (para coordenadas internas fixas) em qualquer sistema de coordenadas externas, enquanto que, o divergente  $\nabla_{\mathbf{r}}$ , é aplicado mantendo o vetor de coordenadas externas constante. Finalmente, o termo  $S_{f_1}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$  é composto pelos termos de surgimento de partículas (nucleação), quebra e coalescência. Em seguida, considerando um sistema aberto com domínio  $V_x$ , com um fronteira  $S_x$  que admite  $S_{x,e}$  como área de entrada de uma mistura partícula-fluido no sistema e  $S_{x,s}$  como área de saída do sistema. Logo, a Equação 2.42 é integrada no domínio de coordenadas externas e o teorema da divergência também é utilizado, originando a forma [70]:

$$\frac{\partial(\int_{V_x} f_1 dV_x)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int_{V_x} \dot{\mathbf{R}} f_1 dV_x + \int_{S_{x,e}} \dot{\mathbf{X}} f_1 dS_{x,e} + \int_{S_{x,s}} \dot{\mathbf{X}} f_1 dS_{x,s} = \int_{V_x} S_{f_1} dV_x \quad (2.43)$$

As simplificações subsequentes são aplicadas por autores que trabalham com modelagem da condensação dentro de bocais supersônicos [30, 31, 69]. A primeira consiste em considerar a população de partículas uniformemente distribuída no espaço  $V_x$ , desse modo, a função de densidade numérica não depende das coordenadas ex-

ternas e a Equação 2.43 assume a forma:

$$\frac{\partial(f_1 V_x)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \langle \dot{\mathbf{R}} \rangle f_1 V_x + f_{1,e} \int_{S_{x,e}} \dot{\mathbf{X}} dS_{x,e} + f_{1,s} \int_{S_{x,s}} \dot{\mathbf{X}} dS_{x,s} = \langle S_{f_1} \rangle V_x, \quad (2.44)$$

com as médias especiais definidas como:

$$\langle \dot{\mathbf{R}} \rangle = \frac{1}{V_x} \int_{V_x} \dot{\mathbf{R}} dV_x$$

e

$$\langle S_{f_1} \rangle = \frac{1}{V_x} \int_{V_x} S_{f_1} dV_x$$

Geralmente as funções  $\dot{\mathbf{R}}$  e  $S_{f_1}$  herdam a uniformidade espacial de  $f_1$ , logo  $\langle \dot{\mathbf{R}} \rangle = \dot{\mathbf{R}}$  e  $\langle S_{f_1} \rangle = S_{f_1}$ . Quando assume-se que não existe movimento relativo entre a fase contínua e as partículas, as integrais de superfície no domínio da entrada e saída do sistema são as vazões volumétricas do conjunto partículas-fluido na entrada e saída respectivamente. Em outra consideração, assume-se uma densidade de partículas uniforme devido à agitação vigorosa em um escoamento supersônico, nas seguintes regiões [70]:

- no interior do domínio  $V_x$ , excluindo a pequena região (volume negligenciável) próxima à superfície de entrada ( $S_{x,e}$ ), onde a função de densidade numérica assume o valor de  $f_{1,e}$ .
- na área de saída  $S_{x,s}$

A primeira hipótese justifica o uso da teorema da divergência aplicado na Equação 2.42. Já a segunda hipótese implica em  $f_1 = f_{1,s}$ , com  $f_{1,s}$  sendo a função de densidade numérica na saída.

No presente trabalho, a forma unidimensional para coordenada interna da Equação 2.42, foi utilizada. Escolheu-se o raio da partícula,  $r$ , como coordenada interna, para caracterizar a fase dispersa. Ambas as escolhas foram baseadas na literatura vigente, uma vez que é a forma mais utilizada para representar a polidispersão em escoamentos supersônicos com condensação [30, 31, 69]

A equação de balanço populacional, para escoamentos compressíveis, após todas as simplificações supracitadas, assume a forma diferencial abaixo:

$$\frac{\partial(\rho f(r))}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho f(r) \mathbf{v}) + \frac{\partial}{\partial r} (\rho f(r) g(r)) = \rho J \quad (2.45)$$

onde  $g(r)$  é a velocidade da coordenada interna (antes representada por  $\dot{\mathbf{R}} = \frac{\partial r}{\partial t}$ ), que pode ser caracterizada como a taxa de crescimento,  $J$  é a taxa de surgimento

de partículas (termo-fonte antes representado por  $S_{f_1}$ ) caracterizada pela fenômeno da nucleação e  $f(r)$  é distribuição de tamanho de partícula ( $f_1$ ) sendo transportada,  $\rho$  a densidade,  $\mathbf{v}$  o vetor velocidade das coordenadas externas,  $\nabla \cdot$ , o divergente das coordenadas externas  $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$  e  $\frac{\partial}{\partial r}$  como divergente das coordenadas internas  $(\nabla_{\mathbf{r}} \cdot)$ .

## 2.3.2 Fenômeno da condensação

Nesta seção, são introduzidos os aspectos termodinâmicos inerentes ao processo de condensação em um bocal supersônico. Em seguida, uma discussão detalhada sobre a teoria de nucleação e a teoria do crescimento de gotas, que são parte integrante do processo de condensação, está apresentada.

### 2.3.2.1 Aspectos termodinâmicos da condensação

A condensação do vapor é iniciada em princípio assim que o estado termodinâmico do fluido cruza a linha de saturação no diagrama de entalpia-entropia (Mollier). Entretanto, este não é o caso em aplicações práticas, por exemplo, condensação homogênea em escoamentos supersônicos. Quando o fluido se expande através de um bocal supersônico, devido ao resfriamento rápido, a fase de vapor se afasta das distribuições de fase do equilíbrio. Com isso, a fase de vapor não condensará imediatamente, atingindo um alto grau de supersaturação, considerado um estado de equilíbrio metaestável [22].

Assim, o processo de condensação ocorre sob condições de não-equilíbrio e sua reversão ao estado de equilíbrio acontece através da formação e crescimento de gotas. O intervalo de tempo do estado metaestável dependerá do grau de supersaturação que o fluido alcançou. Durante este período, o vapor irá expandir-se como vapor supersaturado seco. Logo, para que ocorra a nucleação homogênea, o fluido precisa atingir um alto grau de supersaturação (por exemplo, para vapor de água é necessário um super-resfriamento em torno de 30 - 40 °C). Nenhuma perturbação no escoamento é observada durante o processo de nucleação. Os aglomerados metaestáveis formados com a nucleação, quando excedem algum tamanho crítico, iniciam o processo de crescimento.

Durante o processo de crescimento de gotas, uma quantidade significativa de calor latente é liberada no escoamento. Esta liberação de calor resulta em efeitos compressivos que levam ao aparecimento de um choque, interrompendo o processo de nucleação e, finalmente, levando à formação de uma fase líquida estável. O crescimento dessas gotas ocorre de forma determinística, como resultado do fluxo constante de moléculas de vapor em condição supersaturada na direção do aglomerado de moléculas. Esse fenômeno causará uma diminuição na pressão de vapor e uma

diminuição correspondente da supersaturação. A liberação do calor latente causa o aumento da temperatura da gota e do vapor [15] e, portanto, tem um impacto no padrão de escoamento.

### 2.3.2.2 Taxa de nucleação

A nucleação pode ocorrer de duas formas diferentes, denominadas homogênea e heterogênea, e diferenciadas pela maneira como são iniciadas. A nucleação homogênea produz seus próprios aglomerados estáveis (núcleos) de gotas líquidas, ultrapassando a barreira energética mínima (energia livre de Gibbs), no vapor supersaturado. No caso da nucleação heterogênea, requer partículas externas, que atuam como núcleos de condensação, para ativar o processo[3]. É importante notar que a barreira energética mínima associada à nucleação heterogênea é muito menor que a da nucleação homogênea [15]. Como consequência, a nucleação heterogênea é geralmente encontrada na natureza ao nosso redor, como na formação de nuvens atmosféricas.

Historicamente, as teorias de nucleação homogênea se desenvolveram em duas linhas. A abordagem termodinâmica-cinética clássica, que está associada à nomes como RICHARD e WERNER [71], ZELDOVICH [72] e outros. A segunda linha de abordagem é baseada na mecânica estatística e originada da necessidade de erradicar as incertezas carregadas pela teoria clássica. A última está ligada aos nomes como os de DUNNING [73], FORD [74].

Estudos experimentais de nucleação e crescimento de gotas são realizados principalmente em bocais convergentes-divergentes. Originalmente, os únicos dados disponíveis eram medições da distribuição de pressão da linha central [75, 76] e esses eram usados para deduzir o limite de supersaturação em escoamentos de alta velocidade com nucleação. Nas décadas de 1960 e 1970 foram desenvolvidas técnicas ópticas para medir o tamanho das gotas STEIN [77]. Um novo desenvolvimento proposto por WYSLOUZIL *et al.* [78] é o uso de espalhamento de nêutrons de pequeno ângulo, para medir o tamanho e a estrutura das gotas em nanoescala. A técnica ainda é prematura, mas mantém a promessa de fornecer informações mais precisas sobre os aglomerados de moléculas formadas pela nucleação, que podem ser usadas para validar suas teorias.

O primeiro aspecto a ser avaliado no detalhamento da nucleação é o termodinâmico. O trabalho reversível necessário para formar uma única gota esférica de raio  $r$  proveniente de um vapor supersaturado, mantido a uma pressão constante  $p$  e temperatura  $T_g$ , é igual a variação na energia livre de Gibbs ( $\Delta G$ ) durante esse processo de formação. Se o vapor se comporta como um gás ideal, a expressão clássica

para  $\Delta G$  em função de  $r$  é:

$$\Delta G = 4\pi r^2 \sigma - \frac{4}{3}\pi r^3 \rho_l R_g T_g \ln S, \quad (2.46)$$

onde  $\sigma$  é a tensão superficial do líquido,  $\rho_l$  é a densidade do líquido e  $R_g$  é a constante específica do gás. A variável  $S = \frac{p}{p_s(T_g)}$ , denominada supersaturação, é a relação entre a pressão de vapor saturado,  $p_s$ , em  $T_g(p_s(T_g))$  com a pressão do vapor. A mudança na energia livre acontece em cinco passos descritos a seguir:

1. Na formação das primeiras  $n$  moléculas provenientes do vapor superaquecido não gera mudança na energia livre durante esse processo:

$$\Delta G_1 = 0$$

2. Na segunda etapa ocorre uma expansão isotérmica da pressão  $p$  para pressão de saturação  $p_s(T_g)$ :

$$\Delta G_2 = \frac{4\pi r^3}{3} \rho_l \int_p^{p_s} \frac{1dp}{\rho_g} = -\frac{4\pi r^3}{3} \rho_l R_g T_g \left( \frac{p}{p_s(T_g)} \right)$$

3. O terceiro passo é a condensação de  $n$  moléculas de vapor à pressão de saturação com temperatura do gás constante ( $T_g$ ) em uma fase líquida, e a criação de uma superfície plana. Levando em conta que as duas fases estão em equilíbrio, com isso, seus potenciais químicos são iguais, e conseqüentemente, a energia livre permanece inalterada:

$$\Delta G_3 = 0$$

4. A formação de gotas com raio  $r$  e uma superfície de área,  $4\pi r^2$ , a mudança na energia livre da gota aumenta para:

$$\Delta G_4 = 4\pi r^2 \sigma$$

5. As gotas formadas são isotermicamente comprimidas da pressão de saturação,  $p_s$ , para a pressão do vapor  $p$ . O volume e o raio da gota não mudarão, assumindo que o fluido é incompressível. Logo, a mudança na energia livre é :

$$\Delta G_5 = \frac{4\pi r^3}{3}(p - p_s)$$

Essa última contribuição para energia livre é negligenciada por possuir uma magnitude insignificante quando comparada com as outras [79].

Somando todas as energias supracitadas tem-se a Equação 2.46.

Para um vapor supersaturado ou super-resfriado,  $S > 1$ , e o segundo termo do lado direito da equação 2.46 é negativo. O primeiro termo é sempre positivo, sendo dominante até mesmo para pequenos valores do raio, como mostrado pelas curvas de  $\Delta G$  versus  $r$  na Figura 2.4.

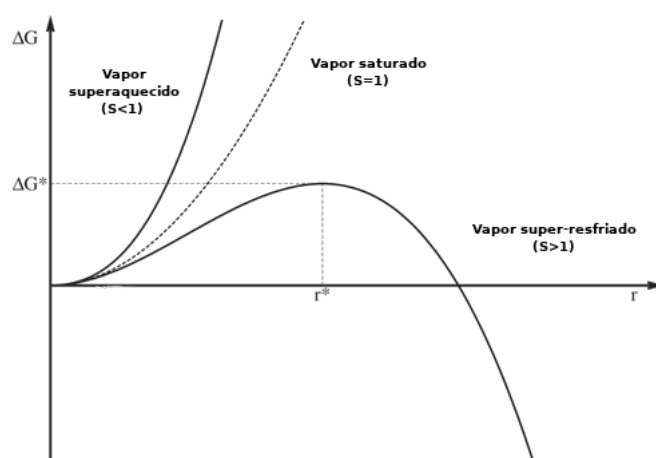


Figura 2.4: Diagrama esquemático mostrando variação de  $\Delta G$  com  $r$ . Adaptado de BAKHTAR *et al.* [79]

Observa-se que, para um dado valor de  $S$ ,  $\Delta G$  aumenta com o raio até um máximo valor determinado por  $\Delta G_*$ , o raio crítico  $r_*$ . Uma gota com  $r > r_*$  pode reduzir a energia livre do sistema capturando moléculas e, conseqüentemente, crescendo. O oposto é verdadeiro para uma gota com  $r < r_*$ . Finalmente, a gota que possui raio crítico está, portanto, em equilíbrio instável com a fase vapor, e nessas condições, obtêm-se as expressões para  $r_*$  e  $\Delta G_*$  através da diferenciação da Equação 2.46 em relação a  $r$  e igualando a zero. Se a tensão superficial e a densidade do líquido dependem apenas da temperatura e não de  $r$ , e considerando que o vapor se comporta como um gás perfeito, verifica-se que:

$$r_* = \frac{2\sigma}{\rho_l R_g T_g \ln S}, \quad (2.47)$$

sendo assim:

$$\Delta G_* = \frac{4\pi r_*^2 \sigma}{3} = \frac{16\pi \sigma^3}{3(\rho_l R_g T_g \ln S)^2}. \quad (2.48)$$

Outra observação importante é a relação entre a supersaturação e o raio crítico que é ilustrada na Figura 2.5. Nela, observa-se, de forma qualitativa, vários graus de supersaturação representados em um gráfico da energia livre de Gibbs pelo raio de gota. Pode-se observar que conforme o grau de supersaturação aumenta, o valor do raio crítico reduz, e conseqüentemente, a energia livre de Gibbs para alcançá-lo também.

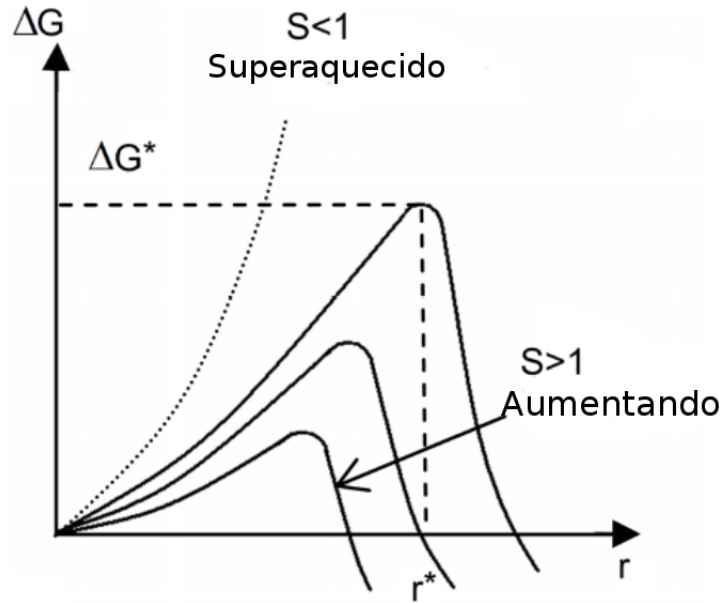


Figura 2.5:  $\Delta G$  vs.  $r$  para diferentes supersaturações. Adaptado de FAKHARI [80]

O segundo aspecto a ser avaliado na formulação da teoria clássica da nucleação é o cinético. Nele, a mesma energia livre  $\Delta G$  pode ser explicitada em termos de  $g$  ao invés de  $r$ . Para isso, considera-se uma gota de raio  $r$  que contém  $g$  moléculas é chamada de  $g$ -mero. Se  $m_g$  é a massa de uma molécula, a massa de uma gota esférica é  $\frac{4\pi r^3 \rho_l}{3} = gm_g$ , e sua área superficial é  $4\pi r^2 = a_0 g^{\frac{2}{3}}$ , onde  $a_0^3 = 36\pi \left(\frac{m_g}{\rho_l}\right)^2$ . Substituindo as transformações na Equação 2.46, tem-se:

$$\frac{\Delta G}{k_b T_g} = \frac{a_0 \sigma}{k_b T_g} g^{\frac{2}{3}} - g \ln S, \quad (2.49)$$

onde  $k_b = m_g R_g$  é a constante de Boltzmann. Geralmente, na bordagem cinética, é mais fácil trabalhar com a Equação 2.49 do que com a Equação 2.46, pois, a primeira usa variáveis definidas pela teoria cinética, como  $g$  e  $k_b$ , por exemplo.

Conforme a explicação do aspecto termodinâmico, a formulação da teoria inicia-se em um vapor superaquecido,  $S < 1$  e ambos os termos no lado direito da Equação 2.46 são positivos, por isso, a formação de aglomerados com raio crítico (escala macroscópica) é inviável energeticamente. Entretanto, pequenos aglomera-



dos de moléculas estão sendo continuamente formados e destruídos pelos processos de colisão molecular. As identidades dos aglomerados individuais mudam o tempo todo, mas a distribuição de tamanho permanece estável. Com isso, essa distribuição de tamanhos, no estado estacionário, segue a lei de Boltzmann: [81] :

$$n_g \cong n_1 \exp\left(\frac{-\Delta G}{k_b T_g}\right), \quad (2.50)$$

onde  $n_g$  e  $n_1$  são os números por unidade de volume de g-meros e monômeros ( $g = 1$ ), respectivamente. Assim, para que as concentrações do aglomerado permaneçam estáveis, o princípio do equilíbrio deve ser respeitado. Para isso, assume-se que a condensação e a evaporação ocorrem pela aquisição ou perda de moléculas individuais. Uma expressão para os aglomerados em um estado de equilíbrio (Equação 2.51) também pode ser obtida a partir de considerações cinéticas.

$$C_g n_g = E_{(g+1)} n_{(g+1)} \quad (2.51)$$

Para a equação supracitada,  $C_g$  é a taxa na qual um g-mero adquire uma molécula (taxa de condensação) e  $E_{(g+1)}$  é a taxa na qual um (g+1)-meros perde uma molécula (taxa de evaporação).

As expressões para  $C_g$  e  $E_{(g+1)}$  são dadas abaixo:

$$C_g = q_c a_0 g^{\frac{2}{3}} \frac{p}{\sqrt{2\pi m_g k_b T_g}}, \quad (2.52)$$

$$E_g = q_e a_0 g^{\frac{2}{3}} \frac{p_s(T_l)}{\sqrt{2\pi m_g k_b T_l}} \exp\left(\frac{2\sigma}{\rho_l R T_l r}\right), \quad (2.53)$$

com  $q_c$  e  $q_e$  como coeficiente de condensação e coeficiente de evaporação respectivamente. Mais detalhes na formulação desses termos podem ser encontrados em BAKHTAR *et al.* [79].

No caso de um vapor supersaturado, os processos de formação e destruição de aglomerados ocorrem de maneira semelhante, porém, caso os aglomerados excedam o tamanho crítico, eles encontram um gradiente favorável de crescimento. O estado estacionário descrito pelas equações anteriores não é mais aplicável, porque as taxas nas quais os aglomerados crescem e diminuem não estão mais equilibradas. Para explicitar a diferença, o símbolo  $f_g$  é usado para a concentração de g-meros nessas condições. A taxa líquida por unidade de volume na qual os g-meros crescem para (g+1)-meros é denominada corrente de nucleação,  $J_g$ , e pode ser expressa como:

$$J_g = C_g f_g - E_{(g+1)} f_{(g+1)} \quad (2.54)$$

A taxa de variação temporal da concentração de g-meros, ou seja, o quanto que

a concentração de g-meros varia no tempo, é dada por:

$$\frac{\partial f_g}{\partial t} = -[(C_g f_g - E_{g+1} f_{g+1}) - (C_{g-1} f_{g-1} - E_g f_g)] = \frac{-(J_g - J_{g-1})}{\Delta g} \cong -\frac{\partial J_g}{\partial g}, \quad (2.55)$$

com  $\Delta g = g - (g - 1) = 1$ . As transformações de perda e ganho de moléculas no aglomerado e a representação das correntes de nucleação são ilustrados na Figura 2.6

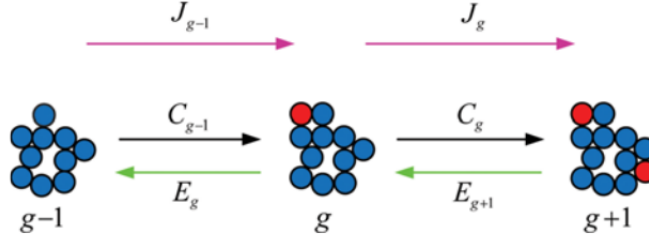


Figura 2.6: Esquema do processo dinâmico da nucleação. Adaptado de HAN *et al.* [82]

A solução da equação Equação 2.55 sob condições isotérmicas pode prosseguir por dois caminhos distintos. O ponto de partida mais óbvio é substituir diretamente as equações de  $E_g$  e  $C_g$ . Este método é descrito por FORD [74] e possui a vantagem da transparência, mas a desvantagem da complexidade. A teoria clássica original empregou uma abordagem que leva ao mesmo resultado. Em vez de usar a substituição direta, a Equação 2.51 é usada para eliminar  $E_{g+1}$  da Equação 2.54 originando:

$$\frac{J_g}{C_g f_g} = \frac{f_g}{n_g} - \frac{f_{g+1}}{n_{g+1}} \cong -\frac{\partial \left( \frac{f_g}{n_g} \right)}{\partial g}, \quad (2.56)$$

A expressão final é uma aproximação diferencial para a forma discreta. Na Equação 2.56,  $n_g$  é definido pela Equação 2.50, mas com  $\Delta G$  avaliado em condições supersaturadas. É importante observar que  $n_g$  não representa uma distribuição real e que a substituição da Equação 2.51 é simplesmente um truque matemático conveniente. Eliminando  $J_g$  das equações Equação 2.55 e Equação 2.56, a taxa de variação da concentração de g-meros é aproximada na forma diferencial por:

$$\frac{\partial f_g}{\partial t} = -\frac{\partial J_g}{\partial g} = \frac{\partial \left( C_g n_g \frac{\partial \left( \frac{f_g}{n_g} \right)}{\partial g} \right)}{\partial g} \quad (2.57)$$

Dito isso, a equação acima é a equação de transporte que descreve a nucleação isotérmica (não considera a diferença de temperatura entre a gota a o vapor). A

solução para essa equação é feita de duas formas, a solução transiente e a solução estacionária. ABRAHAM [81] indica que a taxa de nucleação pode atingir o estado permanente em menos de  $1\mu s$ , com isso, o estado transiente pode ser ignorado. Portanto, a solução permanente da Equação 2.57 é obtida integrando a Equação 2.56 em ambos os lados:

$$J_{CL} \int_{g=1}^{\infty} \frac{dg}{C_g n_g} = \int_{g=1}^{\infty} -d \left( \frac{f_g}{n_g} \right), \quad (2.58)$$

com  $J_{CL}$  como a taxa de nucleação clássica por volume. Avaliando a integral do lado direito da Equação 2.58, tem-se:

$$J_{CL} = \left[ \int_{g=1}^{\infty} \frac{dg}{C_g n_g} \right]^{-1}. \quad (2.59)$$

A integral da equação acima possui solução analítica da forma:

$$J_{CL} = \left[ \int_{g=1}^{\infty} \frac{1dg}{C_g n_1 \exp\left[\frac{-\Delta G}{k_b T_g}\right]} \right]^{-1} \quad (2.60)$$

Uma formulação mais detalhada pode ser encontrada em PANDEY e SINGH [83]. Como o fenômeno da nucleação é responsável pelo surgimento de núcleos de condensação no vapor supersaturado, por conseguinte, afeta diretamente a distribuição de partículas no escoamento. Dito isso, estudar os diferentes modelos taxa de nucleação é a chave para entender as propriedades do vapor úmido [79]. Os principais modelos para taxa de nucleação e suas respectivas correções estão expostos a seguir.

- Modelo Clássico

O modelo de nucleação clássica assume que as temperaturas de todas as gotas são a mesma da fase gasosa e não considera o calor latente de condensação produzido pela transformação de fase. A taxa de nucleação clássica por unidade de volume é a solução da Equação 2.60 adquirindo a seguinte forma [72]:

$$J_{CL} = q_c \frac{\rho_g^2}{\rho_l} \left( \frac{2\sigma}{\pi m_g^3} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{-16\pi\sigma^3}{3k_b T_g^3 R_g^2 \rho_l^2 (\ln S)^2} \right) \quad (2.61)$$

Courtney [84] propôs a primeira correção para a teoria clássica da nucleação apresentada na Equação 2.62. Ele observou que o efeito da pressão parcial dos aglomerados, com mais de uma molécula, foi omitido da teoria clássica. A correção de Courtney divide a expressão para a taxa de nucleação clássica por  $S$ . A forma clássica para  $\Delta G$  é inconsistente com a lei de ação em massa, enquanto que, a revisada por Courtney é consistente.

- Modelo com correção de Courtney:

$$J_{CN} = \frac{1}{S} J_{CL} \quad (2.62)$$

A teoria clássica é baseada na hipótese isotérmica, isto é, a temperatura do vapor e da gota são iguais. Entretanto, durante a condensação, o calor latente das moléculas de vapor no aglomerado é liberado. Este calor deve ser transferido para o vapor circundante, e é realizado por colisões cinéticas com gás e não por condução térmica macroscópica. Isso acontece devido ao tamanho dos núcleos críticos ser menor que o comprimento médio do caminho, logo, o processo ocorre na região dinâmica do gás. Com isso, existe uma diferença de temperatura entre o núcleo (embrião líquido) e o vapor circundante, que é dependente da quantidade de moléculas que condensam ou evaporam, alterando o equilíbrio térmico e conseqüentemente a nucleação[85]. Assim, KANTROWITZ [86] formulou uma correção simples para a teoria clássica, expressa na Equação 2.63.

- Modelo com correção correção Não-isotérmica :

$$J_{NI} = \frac{J_{CL}}{1 + \eta} \quad (2.63)$$

Onde:

$$\eta = \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma + 1} \frac{H_{lv}}{R_g T} \left( \frac{H_{lv}}{R_g T} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.64)$$

- Modelo modificado internamente consistente

Girschik e Chu propuseram um método de modificação da Equação 2.49 internamente consistente, pois quando  $g = 1$ , a energia livre durante a agregação molecular é  $\Delta G = a_0 \sigma$  e não  $\Delta G = 0$  [23]. Sendo assim a Equação 2.49 torna-se:

$$\frac{\Delta G}{k_b T_g} = \frac{a_0 \sigma}{k_b T_g} g^{\frac{2}{3}-1} - (g - 1) \ln S = \theta (g^{\frac{2}{3}} - 1) - (g - 1) \ln S, \quad (2.65)$$

$$\text{com } \theta = \frac{a_0 \sigma}{k_b T_g}.$$

Originando a equação 2.66 abaixo:

$$J_{ICCT} = \frac{1}{S} J_{CL} \exp(\theta) \quad (2.66)$$

Após a modificação por este método, o modelo de nucleação possui um fator

de modificação adicional de  $\frac{e^\theta}{S}$ , que juntamente com a correção de Lamanna ( $\xi = 0.01$ ) [22] originam o modelo de nucleação modificado é representado pela expressão abaixo:

$$J_{ICCT-\xi} = \xi J_{CL} \frac{\exp(\theta)}{S} \quad (2.67)$$

Foram escolhidos alguns modelos presentes na literatura para os parâmetros físicos e termodinâmicos envolvidos. O modelo usado para a densidade líquida de  $CO_2$  está explícito abaixo [87] :

$$\rho_l = \left( \frac{R_g T_c Z_{RA}^{(1+(1-T_r)(\frac{2}{7}))}}{p_c} \right)^{-1}, \quad (2.68)$$

com as seguintes definições para  $CO_2$  puro:

- $R_g = 188.92$  ; Constante dos gases específica [ $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ]
- $p_c = 7.3825$  ; Pressão Crítica [ $MPa$ ]
- $Z_{RA} = 0.2736$  ; Fator de Compressibilidade [-]
- $T_c = 304.20$  ; Temperatura crítica [ $K$ ]
- $T_r = \frac{T}{T_c}$  ; Temperatura reduzida [-]

Para a água foi utilizado o modelo representado pela Equação 2.69 abaixo [88]

$$\rho_l = 0.08 \tanh(x) + 0.7415 t_r^{0.33} + 0.32 \text{ [g/cm}^3\text{]}, \quad (2.69)$$

onde  $x = \frac{(T - 225)}{T_c}$  e  $t_r = \frac{(T_c - T)}{T_c}$ .

No caso da tensão superficial de  $CO_2$  (Equação 2.70) e  $H_2O$  (Equação 2.71) as equações estão representadas a seguir [88, 89]:

$$\sigma = k_b T_c \left( \frac{N_A}{V_c} \right)^{\left( \frac{2}{3} \right)} (4.35 + 4.14\omega) \tau^{1.26} (1.0 + 0.19\tau^{0.5} - 0.25\tau), \quad (2.70)$$

com as seguintes definições:

- $N_A = 6.02 \times 10^{23}$  ; número de Avogadro [ $mol^{-1}$ ]
- $V_c = 0.0919 \times 10^{-3}$  ; Volume molar crítico [ $m^3.mol^{-1}$ ]
- $k_b = 1.3807 \times 10^{-23}$  ; constante Boltzmann [ $J.K^{-1}$ ]

- $\omega = 0.239$  ; Fator Acêntrico [-]
- $\tau = 1 - \frac{T}{T_c}$  ; Temperatura adimensional [-]

$$\sigma = 93.6635 + 0.009133T - 0.000275T^2 \text{ [mN/m]} . \quad (2.71)$$

Finalmente, os modelos de pressão de saturação e temperatura de saturação foram calculados a partir das equações abaixo [90, 91] para  $CO_2$ :

$$\ln p_s = A - \frac{B}{T_g + C} \quad (2.72)$$

e

$$T_s = \frac{B}{A - \ln p_s} - C, \quad (2.73)$$

com suas respectivas constantes calculadas a partir das equações abaixo:

$$D = \frac{(1 + \omega)(1 - T_{br}) \ln 10}{\ln \left( \frac{p_c}{101325.0} \right)},$$

$$C = \frac{T_c(0.7D - 0.3T_{br})}{(0.3 - D)},$$

$$B = \frac{T_c \left( 1 + \frac{C}{T_c} \right) \left( T_{br} + \frac{C}{T_c} \right) \ln \left( \frac{p_c}{101325.0} \right)}{1 - T_{br}},$$

$$A = \ln 101325.0 + \frac{\frac{B}{T_c}}{T_{br} + \frac{C}{T_c}},$$

$$T_{br} = \frac{T_b}{T_c}.$$

E para a água explicitado na Equação 2.74 [88]:

$$p_s = \exp\left(77.34491 - \frac{7235.42465}{T} - 8.2 \ln T + 0.0057113T\right) \text{ [mN/m]} \quad (2.74)$$

### 2.3.2.3 Lei do crescimento de gota

Os pequenos aglomerados de líquido, partindo do raio crítico, podem crescer no vapor superesfriado, à medida que mais moléculas de vapor condensam em sua superfície. O fluxo de massa (moléculas de vapor) em direção à gota e fluxo de energia (liberação de calor latente) para o vapor são comportamentos característicos do processo de crescimento de gotas [22] . Essa transferência de calor latente faz com

que a temperatura do vapor suba instantaneamente. Assim, a taxa de crescimento de uma gota é uma função da taxa de transferência de calor entre a gota e o vapor, e depende fortemente da taxa de condução do calor que é perdido pelas gotas [80]. Esses mecanismos de transferência de calor e fluxo de massa dependem em grande parte do número de Knudsen ( $Kn$ ). O número de Knudsen é definido como a relação entre o percurso livre médio das moléculas de vapor e o tamanho das gotículas (diâmetro da gota), e pode ser expresso como:

$$Kn = \frac{l}{2r}, \quad (2.75)$$

onde  $l$  é o caminho livre médio das moléculas de vapor dadas pela expressão:

$$l = \frac{3\mu_g}{p} \left( \frac{\pi R_g T_g}{8} \right)^{0.5}, \quad (2.76)$$

com  $\mu_g$  sendo a viscosidade dinâmica do gás.

O número de Knudsen desempenha um papel principal no coeficiente de transferência de calor, devido à existência de uma ampla faixa de raios de gotas formados durante o processo de condensação. Para um número muito pequeno de Knudsen ( $Kn < 1$ ), a hipótese do contínuo é aplicável e o processo de transferência é governado pela difusão. Enquanto que, para um número de Knudsen alto ( $Kn > 1$ ), a teoria cinética dos gases é aplicável (efeitos de gás rarefeito) e o processo é governado pelo pela cinética proveniente do impacto das moléculas de vapor com as gotas [22]. Apesar da vasta literatura sobre modelos de crescimento, com diferentes níveis de complexidade, para aplicação em diversas faixas do número de Knudsen. Entretanto, um modelo de crescimento universalmente aplicável não foi formulado. Diferentes modelos de crescimento propostos por vários autores podem ser amplamente classificados em efeitos de gases rarefeitos, para crescimentos transicionais ou controlados por difusão. Com isso, o modelo de Langmuir é uma teoria interessante que leva em conta tanto os efeitos do gás contínuo, quanto os de rarefeito. Como mostrado na Figura 2.7, a região ao redor da gota é dividida em duas zonas, denominadas, região externa e a região interna.

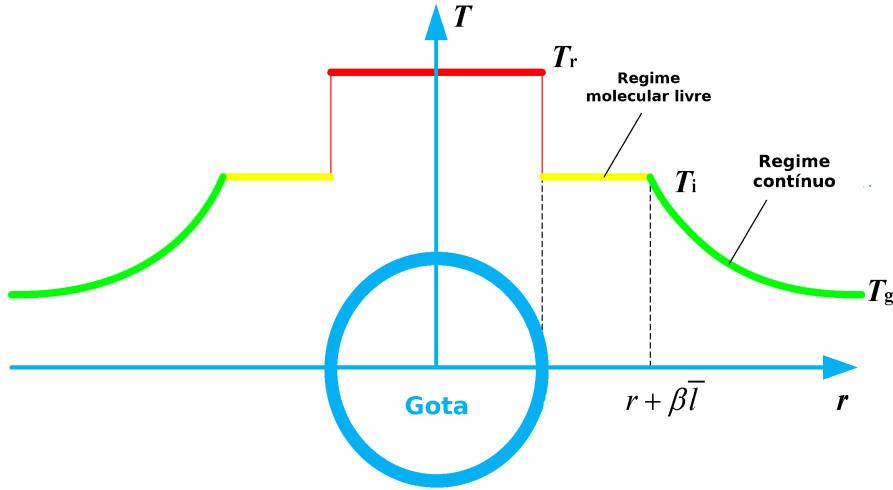


Figura 2.7: Modelo de Langmuir e a distribuição de temperatura ao redor da gota. Adaptado de FAKHARI [80]

Na região externa, as equações da mecânica do contínuo são aplicadas, enquanto que na região interna, denominada camada de Knudsen, os processos de transferência são governados pela teoria cinética dos gases. Para o escoamento em bocal convergente-divergente, o número de Knudsen varia em uma ampla faixa. Sendo assim, o modelo de Langmuir consiste em uma boa aproximação nessas aplicações. A Figura 2.7 mostra a camada de Knudsen em um raio  $(r + \beta l_g)$ , que separa o regime contínuo do regime molecular livre, onde  $\beta$  é uma constante da ordem unitária [80]. Para formular a taxa na qual as gotas crescem, é importante considerar o acoplamento entre massa e energia. Assim, um balanço de energia em torno de uma gota esférica de raio  $r$  é feito:

$$m \frac{dh_r}{dt} = -(h_g - h_l) \dot{M} - \dot{Q}. \quad (2.77)$$

Na Equação 2.77, o termo no lado esquerdo é chamado de fluxo de calor sensível, que geralmente é pequeno, devido ao tamanho reduzido das gotas, e, portanto, pode ser negligenciado. O primeiro termo do lado direito da Equação 2.77 é o fluxo de calor latente a ser removido da gota. O segundo termo é a taxa de transferência de calor convectiva.  $\dot{M}$  é a taxa de transferência em massa dada por:

$$\frac{dm_r}{dt} = -\dot{M}, \quad (2.78)$$

com  $m_r$  sendo a massa de uma única gota esférica expressa como:

$$m_r = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_l. \quad (2.79)$$



Substituindo Equação 2.78 e Equação 2.79 em Equação 2.77 obtemos:

$$(h_g - h_l) \frac{dm_p}{dt} = \frac{4}{3} \pi r^2 K_r (T_l - T_g). \quad (2.80)$$

O termo  $\frac{dm_p}{dt}$  é a taxa de condensação em massa sobre a superfície da gota, e a diferença  $(h_g - h_l)$  é o calor latente local por unidade de massa, como consequência,  $(h_g - h_l) \frac{dm_p}{dt}$  é a taxa de calor latente a ser removida da gota. Uma parte do calor latente é perdida para o vapor, enquanto a parte restante é usada para elevar a temperatura da gota. Na expressão acima,  $T_l$  representa a temperatura do líquido e é assumido como sendo igual à temperatura de saturação ( $T_s$ ) à pressão de vapor correspondente. Simplificando a Equação 2.80, e substituindo o valor de  $m_p$ , o crescimento de gotas pode ser expresso como:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{K_r (T_s - T_g)}{(h_g - h_l) \rho_l}. \quad (2.81)$$

Para as pequenas gotas que são geradas devido à nucleação homogênea, o coeficiente de transferência de calor  $K_r$  deve ser modificado para considerar os efeitos do número de Knudsen ( $Kn$ ). Um coeficiente de transferência de calor que inclui essa dependência, apropriado para o vapor, foi desenvolvido por MOORE e SIEVERDING [56] e é expresso como:

$$K_r = \frac{Nu \lambda_g}{2r} \quad (2.82)$$

Uma expressão para o crescimento de uma gota de raio  $r$  baseada na lei de GYARMATHY [92] é:

$$\frac{dr}{dt} = g(r) = \frac{\lambda_g \left(1 - \frac{r^*}{r}\right) (T_s - T_g)}{\rho_l H_w r \left(1 + 2 \left(\sqrt{\frac{8\pi}{1.5 Pr_g}}\right) \left(\frac{\gamma}{\gamma + 1} Kn\right)\right)}. \quad (2.83)$$

As equações complementares são:

$$Kn = \frac{1.5 \mu_g (RT_g)}{2rp} \quad (2.84)$$

e

$$Pr_g = \frac{\mu_g c_p}{\lambda_g}. \quad (2.85)$$

O comportamento do modelo de crescimento de gota escolhido, em relação ao raio da gota, é comparado com dados experimentais de [93], e pode ser observado na Figura 2.8

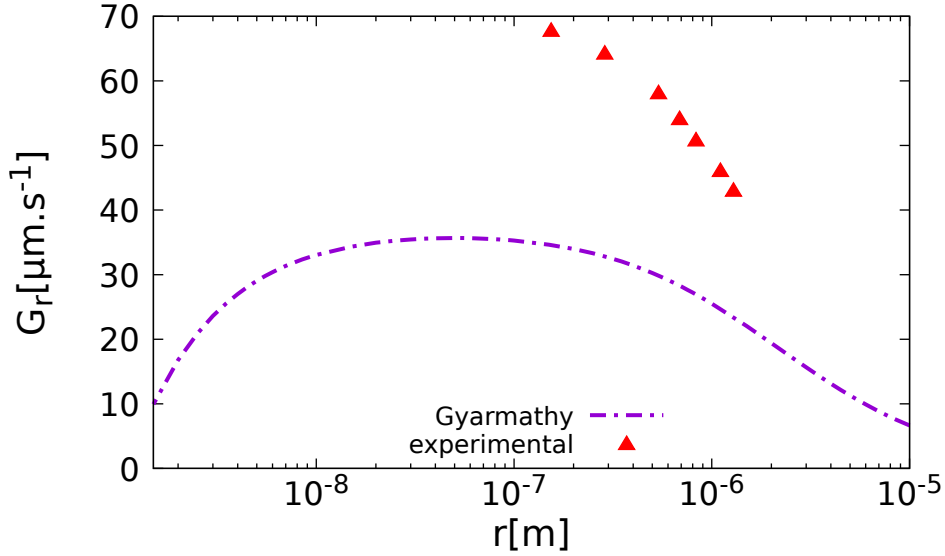


Figura 2.8: Comparação entre o modelo de crescimento de gota com dados experimentais PETERS e PAIKERT [93]

Apesar do modelo subestimar os valores experimentais para água, é amplamente utilizado na literatura [28, 64]. Portanto, foi escolhido para o presente trabalho exploratório, pois além de ser o mais simples quando comparado com modelo de Young [94], também existe uma incerteza associada à medida experimental deste termo.

#### Massa e calor de condensação:

Outra etapa importante para a modelagem da condensação consiste em explicitar os termos de transferência de calor e massa da fase dispersa para a fase contínua, não só para investigar a necessidade de acoplamento, mas também, obter equações constitutivas para os termos fonte da fase contínua [28]. O termo de transferência de massa possui a forma expressa na Equação 2.86:

$$m_l = \frac{4\pi r_*^3 \rho_l J}{3} + 4\pi r^2 \rho_g M_0 \frac{dr}{dt}. \quad (2.86)$$

O termo de transferência de calor latente é proveniente do termo mássico e possui a forma abaixo:

$$Q_l = m_l H_{lv}. \quad (2.87)$$

Em resumo, a Figura 2.9 mostra a expansão em um bocal convergente-divergente típico, começando das condições de vapor superaquecido até as condições de vapor úmido.

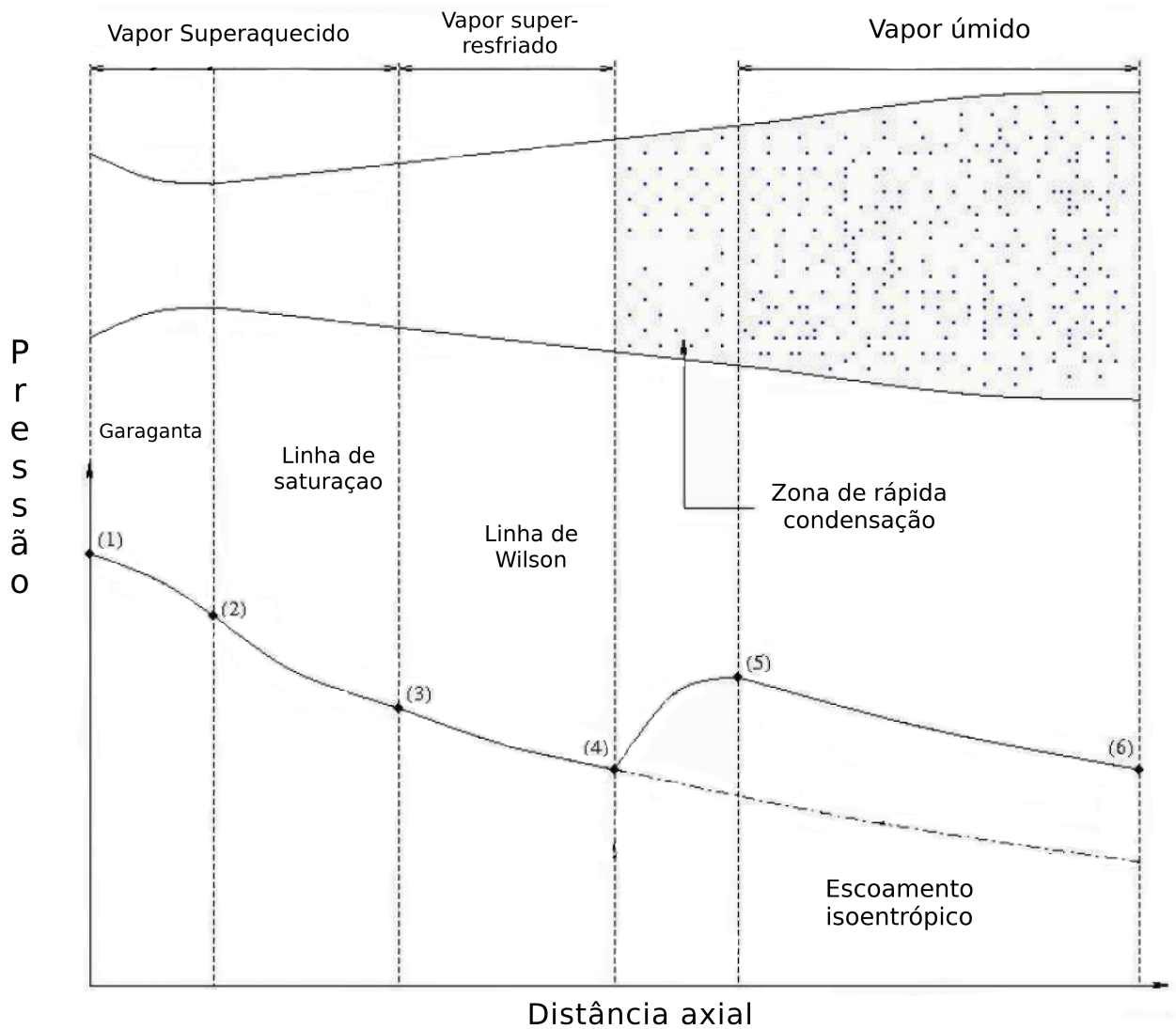


Figura 2.9: Distribuição de pressão axial em um bocal convergente-divergente com condensação espontânea. Adaptado de HASINI *et al.* [95]

No intervalo do ponto (1) ao ponto (2), o vapor entra no bocal na condição superaquecida, e é expandido para condições sônicas, sem cruzar a linha de saturação, devido à geometria divergente do bocal. Somente no ponto (3) que a linha de saturação é cruzada podendo ocorrer antes ou depois da garganta, dependendo da geometria e da taxa de expansão. Os aglomerados moleculares começam a surgir e colapsar nessa região com uma taxa de nucleação muito baixa e, portanto, o vapor continua a se expandir como vapor seco em um estado metaestável. A taxa de nucleação aumenta instantaneamente e atinge seu máximo no ponto (4). Este pico de nucleação ocorre quando a supersaturação e super-resfriamento máximos são alcançados, indicada pela linha de Wilson. O Super-resfriamento é definido como a diferença entre a temperatura de saturação  $T_s(p)$  e a temperatura do vapor  $T_g$  como indicado na Equação 2.88. Ademais, uma relação aproximada útil entre a supersaturação e o super-resfriamento pode ser obtida através da equação

de Clausius-Clapeyron, originando a Equação 2.89.

$$\Delta T = T_s(p) - T_g. \quad (2.88)$$

$$\ln S \cong \frac{H_{lv}\Delta T}{R_g T_s(p) T_g} \quad (2.89)$$

Após o ponto (4), o fenômeno da nucleação efetivamente acaba, e o número de gotas no escoamento permanece constante. Somente no intervalo entre os pontos (4) e (5) que esses núcleos crescem rapidamente, até o sistema a alcançar o equilíbrio termodinâmico. Ao atingir o equilíbrio termodinâmico estável através de uma mudança da fase, ocorre uma liberação de calor latente para a fase de vapor proveniente da fase líquida, provocando um aumento na pressão entre os pontos (4) e (5) indicando que o processo de condensação ocorreu. Finalmente, a expansão do escoamento entre os pontos (5) e (6) ocorre perto das condições de equilíbrio.

Em resumo, a fase contínua irá fornecer o campo de velocidade, temperatura e pressão para a equação de balanço populacional caracterizando um acoplamento de uma via, no qual a influência da fase dispersa, no escoamento da fase contínua, pode ser negligenciada. Ademais, devido ao esforço computacional extra para a solução da PBE, o desenvolvimento de métodos numéricos eficientes e precisos para resolvê-la juntamente com as outras equações diferenciais parciais, tornar-se muito importante.

## 2.4 Metodologia Numérica

### 2.4.1 Modelagem

A modelagem tem como objetivo auxiliar os projetos de equipamentos na indústria química através de duas principais abordagens distintas. Uma delas usa a modelagem tradicional que é fortemente baseada em modelos empíricos ou semi-empíricos. Esses modelos geralmente funcionam muito bem para operações unitárias conhecidas, mas não são confiáveis para novas condições de processo. Além disso, o desenvolvimento de novos equipamentos e processos depende da experiência dos especialistas, e a ampliação do laboratório para a escala completa é muito demorada e difícil. Novas equações de projeto e novos parâmetros presentes em modelos existentes devem ser determinados ao mudar o equipamento ou as condições do processo fora da faixa conhecida. A segunda abordagem consiste em usar fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics - CFD*) para analisar o escoamento, combinando com a transferência de massa e calor, além de avaliar o desempenho no projeto de novos equipamentos e processos. Ferramentas modernas de CFD po-

dem simular diversos fenômenos físicos, como o transporte de espécies químicas, as reações químicas, a combustão, a evaporação, a condensação e a cristalização [96]. Ambas as abordagens coexistem, porém, com os recursos computacionais cada vez mais baratos e disponíveis, logo estas duas linhas se fundirão em uma única linha de simulação e projeto de equipamentos [96].

## 2.4.2 Fluidodinâmica computacional

A fluidodinâmica computacional faz parte da área de Mecânica Computacional que, por sua vez, está incluída na grande área de Simulação. Essa abordagem é conhecida como o conjunto das técnicas de simulação computacional usadas para prever os fenômenos físico-químicos que ocorrem em escoamentos.

Uma vantagem da técnica supracitada encontra-se na possibilidade de obter informações locais detalhadas sobre o sistema simulado, que ajudará na construção de uma compreensão qualitativa e quantitativa do processo. Ademais, quando associada com um estudo de parâmetros da simulação pode revelar informações adicionais como gargalos e limites operacionais do equipamento. Os programas CFD disponíveis possuem muitas configurações padrão e fornecem resultados a partir das simulações, mas, para obter resultados confiáveis, o modelo deve ser escolhido com uma metodologia lógica. Sem uma compreensão adequada dos programas que aplicam CFD, junto com a teoria da modelagem por trás dele, os resultados não representam o fenômeno físico estudado. Outro ponto a ser destacado é o alto custo de experimentos, que são a única alternativa à simulação, quando são possíveis. Apesar das vantagens das simulações em relação aos experimentos, estes não podem ser desconsiderados, pois fornecem o único modo de comparação com a realidade.

A fluidodinâmica computacional fornece uma previsão qualitativa e quantitativa dos escoamentos de fluidos através das seguintes etapas:

- Descrição do processo físico, e a especificação do escoamento;
- Modelagem matemática na qual os modelos são estabelecidos com base nas equações de conservação da quantidade de movimento, de massa e de energia. Estas equações diferenciais parciais, quando submetidas a condições de contorno e iniciais apropriadas, representam matematicamente um problema particular [97];
- Métodos numéricos para obtenção da solução aproximada ao se analisar problemas reais, já que a solução analítica destas equações somente é possível para escoamentos muito simples, e
- Ferramentas de *software* com aplicativos e utilitários de pré e pós-processamento, para obtenção das informações características do escoamento.

A metodologia numérica é aplicada na solução das equações de conservação do problema, além da equação de estado para a completa caracterização da física dos separadores supersônicos. Na fluidodinâmica computacional existem dois tipos de algoritmos mais empregados para resolução das equações de conservação para o escoamento, chamados *pressure-based* e *density-based*

### 2.4.3 Algoritmo de solução das equações

No algoritmo *pressure-based* sequencial, as equações de transporte são resolvidas de maneira sequencial, isto é, as equações de transporte para variáveis como:  $u, v, w, p, T$ , são resolvidas uma após a outra. Existe outro algoritmo *pressure-based* denominado acoplado, cujas equações de quantidade de movimento e continuidade são resolvidas simultaneamente. Com isso, as equações de conservação são resolvidas de maneira acoplada e outras equações escalares são resolvidas de forma segregada. Ademais, sua taxa de convergência da solução é superior quando comparada com o algoritmo sequencial. Entretanto, em termos de memória, os acoplados precisam de mais requisitos de memória do que sequenciais. O algoritmo *pressure based* é, usualmente, mais aplicado em escoamentos incompressíveis e compressíveis na ausência de ondas de choque [98, 99].

Para o cálculo de um escoamento estritamente incompressível ( $Ma = 0$ ), a equação de Poisson para pressão pode ser obtida manipulando as equações de continuidade e *momentum*, com isso, ele resolve essa equação de maneira implícita. Por conseguinte, ao executar essa manipulação, negligencia-se completamente as escalas de tempo acústicas. Portanto, o algoritmo *pressure-based* calcula o passo de tempo com base na velocidade do escoamento, que é muito menor que a velocidade acústica para escoamentos incompressíveis, isso reduz o custo computacional para simulações desse tipo de escoamento quando comparado com o algoritmo *density-based*. A principal causa do elevado custo computacional para o algoritmo *density-based* em escoamentos incompressíveis deve-se ao fato desse tipo de algoritmo utilizar a escala de tempo acústico para o cálculo do passo de tempo. Logo, no caso de escoamentos com número Mach baixos ( $Ma < 0.3$ ), a velocidade do som é muito alta (quase se aproximando do infinito). Portanto, para garantir a estabilidade de um algoritmo *density-based*, é necessário um passo de tempo muito baixo.

Apesar do algoritmo *pressure-based* não ser desenvolvido inicialmente para escoamentos compressíveis, os *softwares* comerciais ANSYS-CFX e Fluent disponibilizam essa metodologia como uma alternativa, utilizada em diversos trabalhos de separadores supersônicos em CFD [17, 100]. Entretanto, mesmo contendo validação com dados experimentais, a dificuldade de acesso às adaptações realizadas e aos códigos implementados em *softwares* comerciais, complica o seu uso para representação da

física presente nos separadores supersônicos.

Apesar dos esforços para desenvolvimento de uma metodologia *pressure-based* aplicável à escoamentos compressíveis com uma ampla faixa de número de Mach, encontrados na literatura [98, 99, 101, 102], não há um consenso para um método de captura da onda de choque. Apenas o trabalho de Xiao *et al.* [102] possui essa validação para o bocal convergente-divergente. Além disso, alguns resolvem as equações de transporte de maneira acoplada, diferente da forma sequencial tradicional do *pressure-based*. Isso implica na redução da velocidade de convergência em simulação conduzida no ANSYS-CFX [103]. Na verdade, a vantagem de calcular o passo de tempo com base nas escalas do tempo do escoamento só funciona bem até números Mach moderados. À medida que o número Mach aumenta, a velocidade do escoamento e as velocidades acústicas tornam-se comparáveis. Consequentemente, o custo computacional para os dois tipos de algoritmos tornam-se semelhantes. Além disso, a aproximação do escoamento incompressível não é mais justificada com números moderados de Mach. Com isso, além do custo computacional adicionado, o algoritmo *pressure-based* também começará a gerar resultados errados com números Mach mais altos [34].

Face ao exposto, o algoritmo *density-based* foi desenvolvido, a princípio, para escoamentos compressíveis com alto número de Reynolds com objetivo de capturar ondas de choque. Ele não faz uso de uma equação extra para pressão, visto que a equação da continuidade é resolvida em termos de densidade, as de conservação de momento em termos de velocidade e as de conservação de energia em termos de temperatura. Com isso, a pressão é atualizada no final do algoritmo pela equação de estado adotada. Além disso, esses tipos de algoritmos respeitam a forte interdependência das variáveis do escoamento através da atualização delas sequencialmente a cada passo de tempo. Portanto, isso resulta em uma solução robusta e precisa, em comparação com métodos que resolvem as equações de maneira segregada. Isso proporcionou a motivação para a seleção deste algoritmo no presente trabalho. Ele segue a estrutura de resolução dos problemas de Riemann, caracterizado por equação diferencial parcial com condição inicial descontínua, similar à descontinuidade que caracteriza ondas de choque, descrita por TORO [104]. A característica desse algoritmo que a permite capturar os efeitos da descontinuidade na solução é a resolução das equações de conservação usando as variáveis em sua forma conservada, em função da massa específica ( $\rho$ ), do momento linear ( $\rho\mathbf{v}$ ) e da energia total ( $E = \rho \left( \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 + e \right)$ ), ao invés da forma primitiva tradicional, em termos de massa específica ( $\rho$ ), velocidade ( $\mathbf{v}$ ) e temperatura ( $T$ ) [104]. Com isso, mesmo que a onda de choque ocorra em dado volume de controle do domínio e as variáveis primitivas (temperatura, velocidade e massa específica) exibam valores descontínuos, os fluxos de entrada e saída das variáveis conservadas se mantém, algo que torna a

solução mais estável numericamente.

#### 2.4.4 Métodos de discretização

A solução numérica de uma equação diferencial parcial tem como objetivo de transformar sistemas de equações diferenciais em sistemas de equações algébricas e consiste em separar os valores da variável dependente em pontos especificados a partir dos quais sua distribuição sobre o domínio de interesse pode ser construída. Esses pontos são chamados de elementos de malha, e resultam da discretização do domínio, proveniente de geometria original, em um conjunto de elementos discretos não sobrepostos.

Um dos métodos de discretização das equações de conservação provenientes da modelagem é o método das diferenças finitas. Neste método, as derivadas parciais espaciais e temporais que aparecem nas equações são aproximadas através da série de Taylor. Embora não haja restrição formal, as diferenças finitas são geralmente empregadas em geometrias cartesianas. O segundo método é o de elementos finitos são muito flexíveis em termos de geometria e elementos de malha. Em cada elemento da malha é usada uma função base para descrever localmente a solução da equação governante a ser aproximada. O método dos elementos finitos visa minimizar a diferença entre a solução exata e a coleção de funções básicas. Entretanto, problemas na área de mecânica dos fluidos são geralmente regidos pela conservação local que não é necessariamente uma propriedade do método dos elementos finitos, uma vez que a diferença entre as funções básicas e a solução exata é minimizada globalmente, portanto, o método não tem sido tanto usado para fluidodinâmica computacional [96].

Finalmente, o terceiro método para discretizar as equações é o dos volumes finitos baseado na conservação local, e esta é a principal razão da sua predominância em CFD [96]. Para resolver as equações numericamente com o método dos volumes finitos, todo o domínio computacional é dividido em sub-volumes menores denominados células. Empregando a lei de Gauss, as derivadas parciais que expressam um princípio de conservação, podem ser reescritas em cada célula como uma contribuição algébrica. A equação de conservação, expressa nas equações diferenciais parciais, é reformulada, em cada célula computacional, em um conjunto de equações algébricas lineares. A discretização do domínio origina um erro numérico na solução. É importante controlar a magnitude do erro após uma solução ter sido obtida, pois o erro tende a desaparecer à medida que o tamanho da célula se aproxima de zero. Por outro lado, reduzir demais o tamanho da célula criará um número desnecessariamente grande de células, o que aumentará o esforço computacional. A metodologia numérica aplicada na discretização das equações no programa de código aberto uti-



lizado é baseada no método dos volumes finitos. [105, 106]

#### 2.4.4.1 Método dos volumes finitos

A Equação 2.90 abaixo é utilizada para melhor descrição desse método e representa a conservação de uma propriedade genérica  $\phi$ . Essa variável genérica pode ser descrita como qualquer variável de conservação (massa, momento e energia).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi, \quad (2.90)$$

onde  $\Gamma_\phi$  é a difusividade da grandeza conservada, considerada, nesse caso, como uma grandeza escalar,  $S_\phi$  é um termo fonte genérico da equação de transporte e  $\mathbf{v}$  corresponde ao vetor velocidade do escoamento.

Em volumes finitos a discretização do domínio é realizada tanto no espaço físico quanto no tempo. O primeiro tipo de discretização considera a divisão do domínio espacial em um conjunto de volumes de controle interconectados entre si ou com o contorno do domínio. Analogamente, a discretização temporal é aplicada em problemas transientes partindo de uma condição inicial e subdivide seu domínio em um número finito de intervalos no tempo. Com isso, algumas definições geométricas precisam ser feitas [107].

##### **Discretização do domínio espacial:**

Cada célula é cercada por suas faces formando um padrão de malha em todo o domínio. Tradicionalmente, as malhas foram divididas em malhas estruturadas e não estruturadas. As malhas estruturadas são construídas a partir de elementos quadriláteros, mas não necessariamente retângulos. Enquanto isso, malhas não estruturadas são construídas a partir de elementos diferentes, elementos quadriláteros e triangulares em 2D e tetraedros, hexaedros, pirâmides, prismas em 3D. Normalmente, uma malha estruturada exigirá menos memória e possui propriedades numéricas melhores. No entanto, nem sempre é possível mesclar geometrias complexas usando malha estruturada, e hoje a maioria dos programas lidam com ambas as malhas[96].

No trabalho de definir a malha, também deve ser levado em consideração a alocação do campo de variáveis na malha, que pode ser centrado na célula ou centrado no vértice. Um algoritmo centrado na célula cria volumes de controle que são completamente idênticos à malha. Já um algoritmo centrado no vértice cria seus volumes de controle em torno dos vértices situados em cada intersecção das faces da célula. Ambas as configurações podem ser observadas na Figura 2.10. Contudo, problemas de oscilação e avaliação do gradiente de pressão podem aparecer no arranjo co-localizado (todas as variáveis no mesmo volume de controle) [108]. Porém, com os avanços das técnicas numéricas [109, 110] estes problemas foram resolvidos

e, desde então, o arranjo co-localizado é usado na maioria dos códigos CFD.

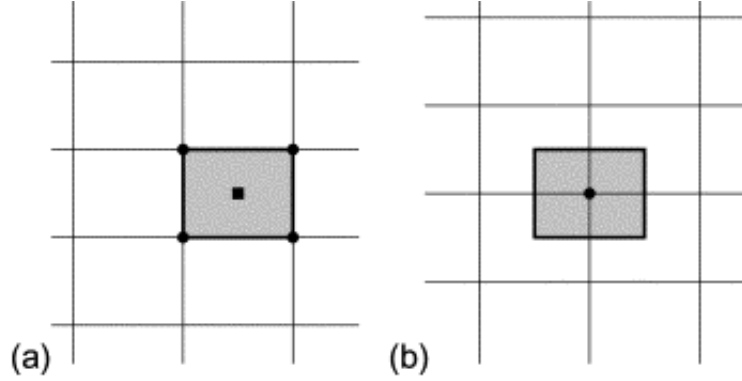


Figura 2.10: Esquema de alocação do campo de variáveis na malha: (a) centrado no vértice ; (b) centrado na célula. Adaptado de [111]

No processo de discretização espacial, as equações de conservação, que possuem a forma da Equação 2.90, são integradas nos volumes de controle,  $V_c$ , presentes no domínio, adquirindo a forma:

$$\int_{V_c} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) \right) dV_c = \int_{V_c} (\nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi) dV_c. \quad (2.91)$$

Em seguida, o teorema da divergência [112] é aplicado para converter as integrais volumétricas associadas ao operador divergente em integrais de superfícies do volume de controle. Logo, a equação é reescrita na forma:

$$\int_{V_c} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) + \sum_f \int_f (\phi_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f) dS = \sum_f \int_f ((\Gamma_\phi)_f \cdot \mathbf{n}_f) dS + \int_{V_c} (S_\phi) dV_c. \quad (2.92)$$

Posteriormente, as integrais presentes são aproximadas pelo método de quadratura gaussiana e são integradas numericamente. A quadratura faz uso de pontos de integração definidos geometricamente. Em seguida, um método de interpolação para as variáveis  $\phi_f$  e  $(\nabla \phi \cdot \mathbf{n})_f$  deve ser escolhido, pois os valores das variáveis, estão localizadas no centroide (co-localizada). Existem diversos métodos de interpolação descritos em livros clássicos de fluidodinâmica computacional [112, 113]. Dentre eles, o método *Upwind* é um exemplo clássico de esquemas de interpolação de primeira ordem descrito em PATANKAR e SPALDING [112]. Considerando a Figura 2.11, com os pontos  $P$  e  $N$  como centroide das células e  $f$  a face entre elas, o método de *Upwind* assume a seguinte forma:

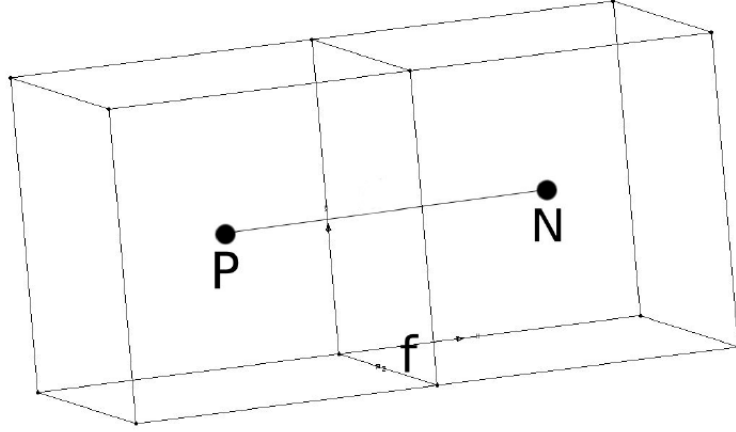


Figura 2.11: Esquema de interpolação *Upwind*.

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P ; (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_f > 0 \\ \phi_N ; (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_f < 0 \end{cases} \quad (2.93)$$

Uma importante característica do escoamento no interior do equipamento de separação supersônica que influencia na escolha da metodologia numérica é a onda de choque. Ela é formada durante o escoamento e impede o uso de funções de interpolações comumente usadas no método de volumes finitos, pois, a onda de choque é tratada como uma descontinuidade numérica. Por isso, a discretização por volumes finitos e o uso de um esquema de interpolação clássico acarretaria em problemas de convergência [114, 115]. Problemas que apresentam descontinuidades numéricas são classificados como problemas de Riemann e existem metodologias numéricas próprias para resolver problemas desta natureza. Por isso, a modelagem e as metodologias de aproximação de *solvers* de Riemann [114, 116] são detalhadas nas próximas seções. Maiores detalhes sobre a metodologia de discretização podem ser visto em JASAK [105], PATANKAR e SPALDING [112], FERZIGER e PÈRIC [113]

### Soluções numéricas para Problema de Riemann

Para resolver equações diferenciais parciais (EDP's) cujas soluções contêm descontinuidades, devemos nos voltar para métodos que não assumem a continuidade da solução. Um deles é o método de ], que foi um dos primeiros métodos numéricos que utilizou o conceito de volumes finitos para sistemas hiperbólicos não-lineares, como as equações de Euler usadas no presente trabalho. Sua formulação baseia-se no valor médio da solução sobre uma determinada célula  $C_i^{n+\frac{1}{2}}$  considerada entre o domínio espacial de  $x_{i-\frac{1}{2}}$  e  $x_{i+\frac{1}{2}}$  e o domínio temporal entre  $t_n$  e  $t_{n+1}$ . Com  $i$  sendo a localização da célula atual no tempo atual  $n$ . O valor médio da solução nesta célula

é expresso na Equação 2.94:

$$\mathbf{U}_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(\mathbf{x}, t_n) dx . \quad (2.94)$$

E o fluxo numérico  $\mathbf{F}$  é representado por:

$$\mathbf{F}_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{U}(x_i, t)) dt. \quad (2.95)$$

As Equações de Euler unidimensionais escritas em sua forma conservada (Equação 2.96 e Equação 2.97) estão representadas abaixo:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x = \mathbf{0}, \quad (2.96)$$

com  $U_t = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}$  e  $F(U)_x = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x}$  e os respectivos vetores das variáveis conservadas ( $\mathbf{U}$ ) e fluxo ( $\mathbf{F}$ ) iguais a:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}. \quad (2.97)$$

Integrando as equações na forma conservativa, e dividindo pelo volume total obtém-se:

$$\frac{1}{\Delta x \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dx dt + \frac{1}{\Delta x \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} dx dt = 0, \quad (2.98)$$

$$\frac{1}{\Delta x \Delta t} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} [\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n] dx - \frac{1}{\Delta x \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} [\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i-\frac{1}{2}})] dt = 0, \quad (2.99)$$

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\Delta t} + \frac{\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} = 0. \quad (2.100)$$

O método de Godunov é de primeira ordem e explícito no tempo, representado pela Equação 2.101, descrita em [104].

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^n - \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^n]. \quad (2.101)$$

O termo  $\mathbf{U}_i^{n+1}$  pode ser calculado segundo a metodologia iterativa da solução exata de Riemann descrita em detalhes em LEVEQUE [114] e TORO [116] para célula computacional. No entanto, os métodos iterativos apresentam alto custo

computacional por isso foram desenvolvidos diversos métodos de aproximação para o fluxo de Riemann para tornar mais simples o cálculo de  $\mathbf{U}_i^{n+1}$  [116]. Portanto, é necessário encontrar uma maneira de estimar os fluxos numéricos  $\mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}$  e  $\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}$  usando as informações da etapa anterior, para avançar a solução no tempo. As aproximações de fluxo de Riemann mais conhecidas são HLLC [117], Roe [118] e Roe-Pike [119]. Neste trabalho foi usado o método de Roe-Pike[18], pois, além de já estar implementado no programa de código aberto utilizado, também é o mais simples comparado com as demais metodologias para os cálculos dos fluxos[104].

As metodologias apresentadas neste trabalho são baseados na descrição feita em [104] para as equações de Euler multidimensionais, monofásicas e monocomponentes. Com isso, como solução do problema de Riemann são possíveis três tipos diferentes de ondas denominadas onda de contato, de rarefação e de choque [104, 114]. Para ilustração de umas das soluções obtidas no problema de Riemann (Gráfico  $x$  vs.  $t$ ) foi utilizada a Figura 2.12 onde a descontinuidade se propaga para a direita ( $\mathbf{U}_L$ ) como onda de choque e para esquerda( $\mathbf{U}_L$ ) como onda de rarefação separadas por uma onda de contato ( $\mathbf{U}_*$ ).

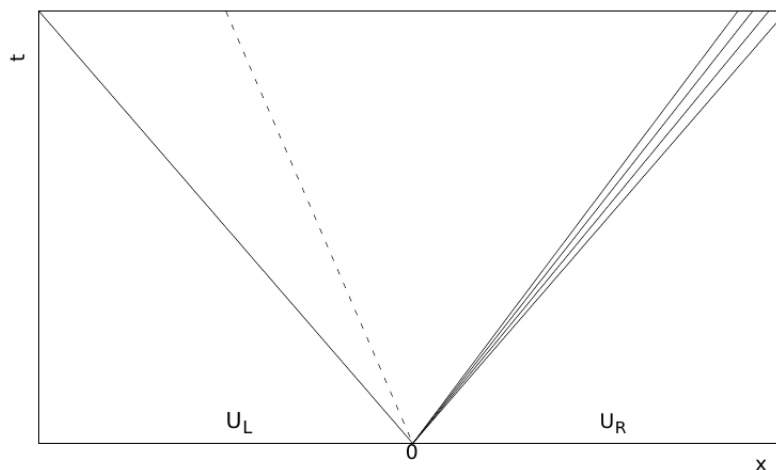


Figura 2.12: Onda de choque à esquerda, onda de rarefação à direita e onda de contato

A onda de contato representada pela linha pontilhada nas figura acima, divide a região estrela em duas regiões  $\mathbf{U}_{*L}$  e  $\mathbf{U}_{*R}$

A estruturação dos métodos é feita a partir do cálculo dos autovalores da matriz Jacobiana do vetor fluxo ( $\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}}$ ) denominados velocidades características do sistema. Quando é considerado gás ideal, são descritos como:  $\lambda_1 = u - a$ ,  $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = u$  e  $\lambda_5 = u + a$ . Cada autovalor está associado a uma onda do sistema, dentre as quais, a de choque [104]. A Equação 2.96 pode ser reescrita em termos da matriz Jacobiana do vetor fluxo ( $\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}}$ ), o que é representado pela

Equação 2.102:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{A}(\mathbf{U})\mathbf{U}_x = \mathbf{0}. \quad (2.102)$$

Uma descrição breve da metodologia de ROE e PIKE [119] é apresentada abaixo. Uma formulação mais detalhada dos métodos de aproximação dos fluxos de Riemann pode ser encontrada no Apêndice 5.1.1. TORO [104] apresentou o seguinte algoritmo para computar o fluxo entre células pela metodologia de ROE e PIKE [119] (Equação 5.13):

1. computar os valores médios de Roe de acordo com a Equação 2.103:

$$\tilde{\mathbf{W}} = \begin{cases} \tilde{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \\ \tilde{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{v} = \frac{\sqrt{\rho_L} v_L + \sqrt{\rho_R} v_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{w} = \frac{\sqrt{\rho_L} w_L + \sqrt{\rho_R} w_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{H}_m = \frac{\sqrt{\rho_L} H_m + \sqrt{\rho_R} H_m}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{a} = \left( (\gamma - 1) \left( \tilde{H}_m \frac{1}{2} |\tilde{\mathbf{u}}|^2 \right) \right)^{\frac{1}{2}} \end{cases} ; \quad (2.103)$$

2. calcular os autovalores  $\tilde{\lambda}_i$  usando as expressões analíticas para  $\hat{\lambda}_i$  em termos dos valores médios da Equação 2.103, onde :

$$\tilde{\lambda}_i = \begin{cases} \lambda_1 = \hat{u} - \hat{a} \\ \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = \hat{u} ; \\ \lambda_5 = \hat{u} + \hat{a} \end{cases} \quad (2.104)$$

3. computar os autovetores  $\hat{\mathbf{K}}^{(i)}$  usando a expressão analítica da Equação 2.105

em termos do valores médios da Equação 2.103

$$\hat{\mathbf{K}}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{u} - \hat{a} \\ \hat{v} \\ \hat{w} \\ \hat{H}_m \hat{u} \hat{a} \end{bmatrix}; \hat{\mathbf{K}}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{u} \\ \hat{v} \\ \hat{w} \\ \frac{1}{2} |\hat{\mathbf{u}}|^2 \end{bmatrix}; \hat{\mathbf{K}}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \hat{v} \end{bmatrix}; \hat{\mathbf{K}}^{(4)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \hat{w} \end{bmatrix}; \quad (2.105)$$

$$\hat{\mathbf{K}}^{(5)} = \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{u} + \hat{a} \\ \hat{v} \\ \hat{w} \\ \hat{H}_m \hat{u} \hat{a} \end{bmatrix}.$$

;

4. calcular as forças da onda baseadas na Equação 2.106 em termos dos valores médios da Equação 2.103:

$$\hat{\alpha}_i = \begin{cases} \hat{\alpha}_1 = \frac{1}{2\hat{a}} - [\Delta p - \hat{a}\hat{\rho}\Delta u] \\ \hat{\alpha}_2 = \Delta\rho - \frac{\Delta p}{\hat{a}^2} \\ \hat{\alpha}_3 = \hat{\rho}\Delta v \\ \hat{\alpha}_4 = \hat{\rho}\Delta w \\ \hat{\alpha}_5 = \frac{1}{2\hat{a}}[\Delta p + \hat{a}\hat{\rho}\Delta u] \end{cases}; \quad (2.106)$$

5. usar as quantidades previamente calculadas para calcular o fluxo entre células,  $\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}$ , de acordo com a Equação 2.107:

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_L + \mathbf{F}_R) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \tilde{\alpha}_i |\tilde{\lambda}_i| \tilde{\mathbf{K}}^{(i)}. \quad (2.107)$$

A metodologia de Roe-Pike [119] relatada está intimamente ligada à escolha de gás ideal como equação de estado, pois os autovalores e autovetores utilizados são deduzidos a partir dessa consideração [104].

### Discretização temporal

Também existem vários métodos de discretização do termo temporal,  $\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)$  da Equação 2.92, visto que, toda a equação também será integrada no tempo para uma simulação transiente. Um dos métodos utilizados no presente trabalho foi o de primeira ordem denominado Euler implícito. Ele foi escolhido pois é incondicionalmente limitado, apesar de ser mais lento do que o método explícito, visto que, o

último não possui necessidade de sub-iterar. O maior problema do método explícito é ser limitado condicionalmente, isso impõe uma restrição à escolha do intervalo de tempo, caso contrário, a solução geralmente diverge [96]. Os termos temporais das equações de conservação da fase contínua, provenientes da solução aproximado do problema de Riemann, são discretizados segundo o método Runge-Kutta de quarta ordem [120]. A ideia básica dele é calcular vários valores de  $\mathbf{U}_i^n$  no intervalo entre  $t$  e  $t + \Delta t$  e depois combiná-los para obter a aproximação de ordem mais alta de  $\mathbf{U}_i^{n+1}$ . O número de vezes que  $U_i$  é avaliado durante cada passo de tempo corresponde ao estágio do esquema Runge-Kutta. O *dbnsFoam* [38] utiliza o método Runge-Kutta de baixo armazenamento com 4 estágios (quarta ordem) de acordo com as equações abaixo:

$$\mathbf{U}_i^{(0)} = \mathbf{U}_i^{(n)}, \quad (2.108)$$

$$\mathbf{U}_i^{(1)} = \mathbf{U}_i^{(0)} - 0.11 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^{(0)} - \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^{(0)} \right], \quad (2.109)$$

$$\mathbf{U}_i^{(2)} = \mathbf{U}_i^{(1)} - 0.2766 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^{(1)} - \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^{(1)} \right], \quad (2.110)$$

$$\mathbf{U}_i^{(3)} = \mathbf{U}_i^{(2)} - 0.5 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^{(2)} - \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^{(2)} \right], \quad (2.111)$$

$$\mathbf{U}_i^{(4)} = \mathbf{U}_i^{(3)} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^{(3)} - \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^{(3)} \right], \quad (2.112)$$

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^{(4)}. \quad (2.113)$$

O esquema requer apenas o armazenamento da solução zero e a atualização mais recente do termo ao lado direito da equação. Portanto, apresenta uma considerável redução no consumo de memória em relação à discretização do Runge-Kutta de quarta ordem padrão [120]. O passo de tempo é determinado pelo número do Courant [115], caracterizado pela razão entre as velocidade física do escoamento e a velocidade numérica e determinado por:

$$Co = \frac{u \Delta t}{\Delta x}, \quad (2.114)$$

em que  $u$  é a velocidade do escoamento local,  $\Delta t$  o passo de tempo e  $\Delta x$  o comprimento do elemento da malha.



#### 2.4.4.2 OpenFOAM

Existem diversos programas disponíveis para solução de problemas da mecânica do contínuo, incluindo a fluidodinâmica computacional. Portanto, algumas considerações devem ser avaliadas antes da escolha de um pacote CFD como ferramenta, dentre elas estão: a curva de aprendizagem, a capacidade de construir geometrias e malhas, a robustez das técnicas numéricas apresentadas, além da variedade de problemas físicos que é capaz de resolver. Os pacotes mais desenvolvidos e intuitivos são comerciais, como ANSYS CFX e FLUENT [121]. Entretanto, os preços dos pacotes comerciais implicam em um custo elevado para o consumidor final, limitando seu uso. Outra limitação desse tipo de pacote, refere-se à detalhes insuficientes para explicar a implementação numérica de seus códigos, o que dificulta o controle do usuário sobre as capacidades do pacote.

Face ao exposto, os códigos CFD gratuitos disponíveis encontram-se em expansão no mundo conquistando cada vez mais espaço nas universidades e empresas. Neste contexto, o pacote de código livre OpenFOAM [122] surge como uma opção viável e muito interessante para a simulação e desenvolvimento de códigos CFD. Ele é um *software* baseado na linguagem C++ com os seus respectivos *solvers* e utilitários de pré e pós-processamento, no qual o usuário tem acesso a sua documentação completa e pode criar objetos personalizados, como condições de contorno ou modelos de turbulência. Eles funcionam de forma acoplada com os *solvers* existentes sem precisar modificar ou recompilar o código-fonte. Para simular diferentes cenários do escoamento de interesse, o programa de código aberto foam-extend-4.0 foi selecionado. Ele é uma extensão do projeto OpenFOAM, com o objetivo de incluir códigos criados pela comunidade de desenvolvedores no projeto original. Contudo, estes tipos de pacotes, normalmente, possuem áreas de aplicação muito restritas. Dito isso, suas principais desvantagens estão relacionadas com a curva de aprendizagem para utilizar o recurso *opensource*, que pode ser bem lenta, por exigir conhecimentos em programação orientada a objeto, além da ausência de uma interface gráfica integrada. Entretanto, como não possui o custo da licença anual atrelado, além de disponibilizar o código fonte do programa, este pacote funciona como uma alternativa promissora para o presente trabalho, no qual será necessária a implementação dos modelos para representação do fenômeno físico.

##### **Aplicativos com algoritmo *density-based*:**

Atualmente, o único aplicativo *density-based* na versão oficial do OpenFOAM é o *rhoCentralFoam* baseado no esquema de GREENSHIELDS *et al.* [123]. Outra biblioteca popular com a mesma abordagem, denominada *densityBasedTurbo* [124] é proveniente da versão estendida foam-extend-1.6. Ela contém as abordagens AUSM+ [125] e AUSM+-up [126] com esquemas do tipo Godunov [127], e esquema

de integração do tempo Runge-Kutta. As configurações supracitadas também estão presentes de forma semelhante no pacote **AeroFoam** [34]. Depois disso, os pacotes *dbnsFoam* e *dbnsTurbFoam* foram implementados a partir do *densityBasedTurbo* e adicionados ao foam-extend-3.1. O *solver* escolhido para resolver o escoamento dentro do separador supersônico foi o *dbnsFoam*. Nele é utilizada abordagem *density-based* com o método de Godunov de primeira ordem, em que para o cálculo do fluxo entre células, faz uso do método de Roe-Pike [119]. A discretização temporal é feita de forma explícita, com um método de Runge-Kutta de quarta ordem para solução. Apesar das simulações serem transientes, o interesse está no estado permanente delas.

### 2.4.5 Técnicas numéricas para solução da equação de balanço populacional

Assim como para as EDPs do escoamento referente à fase contínua, as equações que representam o fenômeno da dinâmica de partículas também são complexas, e consequentemente, possuem soluções analíticas apenas para casos nos quais os termos de agregação/ coalescência e quebra/ nucleação e crescimento são substancialmente simplificados [128]. Os métodos mais comuns são o método de Monte Carlo, o métodos dos momentos e suas variações, e o método das classes.

O método de Monte Carlo resolve a equação do balanço populacional com base em uma abordagem de conjunto estatístico, e possui como principais vantagens a flexibilidade e precisão para rastrear mudanças de partículas em sistemas multidimensionais. Entretanto, sua incorporação com escoamentos multifásicos não é um processo simples e a precisão do método é diretamente proporcional ao número de partículas simuladas. Fato que torna o tempo computacional exageradamente extensivo para um grande número de partículas. Além disso, o acoplamento do método com escoamentos multifásicos não é trivial.

O método de classes consiste na discretização da distribuição de tamanhos de partículas em classes, usando espaçamento entre os tamanhos de partículas constante ou variável. A distribuição é considerada constante dentro de cada classe. Com isso, para cada classe, a equação transporte da função de densidade numérica é resolvida para acomodar as mudanças populacionais causadas por quebra, coalescência, surgimento e crescimento de partículas. Todavia, considerando que uma ampla faixa de tamanhos de partículas pode ser necessária em um escoamento multifásico, o número de equações de conservação a serem resolvidas para cada tamanho de partícula (classe) pode ser impraticável [65].

Face ao exposto, os métodos supracitados podem demandar um elevado custo computacional, dependendo do número de partículas do sistema. Portanto, o método

dos momentos surge como uma boa alternativa para resolução da Equação de Balanço Populacional (EBP) comparado ao método de classes [129] e Monte Carlo. A ideia básica por trás do método dos momentos se baseia na transformação do problema em momentos de menor ordem da distribuição do tamanho de partículas.

A principal vantagem do método dos momentos encontra-se na redução drástica do número de equações a serem resolvidas, pois usa apenas a evolução de um pequeno número de momentos[130]. Tal fato torna-se crítico na modelagem de problemas com escoamentos complexos quando a faixa de tamanhos de partículas é muito grande e a dinâmica de partículas é fortemente acoplada a cálculos de elevado custo como os que envolvem turbulência. Outro aspecto significativo do método dos momentos é que ele não sofre nenhum erro de truncamento na aproximação da distribuição do tamanho de partículas.

#### 2.4.5.1 Método dos momentos

Nesse método são incluídos os termos referentes à nucleação e à lei de crescimento das gotas. Nesse sentido, os termos de quebra e coalescência são desprezados devido ao tamanho das partículas formadas em um escoamento supersônico. Logo, aplicando o esse método na Equação 2.45 que consiste em multiplicá-la por  $r^j$  e integrando em todo o domínio de coordenadas internas. Com isso, a equação assume a seguinte forma:

$$\int_0^\infty r^j \frac{\partial(\rho f(r))}{\partial t} dr + \int_0^\infty r^j \nabla \cdot (\rho f(r)v) dr + \int_0^\infty r^j \frac{\partial(\rho f(r)g(r))}{\partial r} dr = \int_0^\infty r^j \rho J dr \quad (2.115)$$

E assim, surge a variável momento ( $\mu_j$ ) dentro das derivadas parciais, visto que, elas não dependem da coordenada interna, exceto a do último termo do lado esquerdo da Equação 2.115. Ele é simplificado através do método de integração por partes onde  $r^j f(r)$  desaparece em  $r = 0, \infty$ . Em consequência disso, surge o sinal negativo no termo e obtem-se:

$$\frac{\partial(\rho\mu_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mu_j v) = \rho J_* r_*^j + j\rho \int_0^\infty r^{j-1} g(r) f(r) dr, \quad (2.116)$$

onde  $j$  corresponde ao número do momento. Esse pode ser representado em função da coordenada interna de comprimento ( $r$ ):

$$\mu_j = \int_{\Omega_r} r^j f(r) dr. \quad (2.117)$$

Em um separador supersônico, a taxa de nucleação ( $J$ ) pode ser considerada como uma função delta de Dirac em torno do raio crítico, e expressa na

Equação 2.118. Esta simplificação é feita devido ao tempo característico da função ser da ordem de  $10^{-7}$ s, enquanto o tempo característico do escoamento supersônico é da ordem de  $10^{-3}$ s [66].

$$J = J_* \delta(r - r_*) \quad (2.118)$$

Os momentos de ordem inferior têm um significado físico, que no caso do momento 0 é o número total de partículas por unidade de volume. O momento 1 pode ser definido como a soma de todos os raios de gotas por unidade de volume. Já o momento 2 caracteriza a área superficial total por unidade de volume. Finalmente, o momento 3 representa o volume total das gotas. Alguns desses momentos são usados para calcular o raio médio de gotas, a fração de massa líquida e o número total de gotas, pelas equações abaixo:

- Número de gotas:  $N = \mu_0$ ;
- Fração mássica de líquido:  $y = \frac{4}{3} \pi \rho_l \mu_3$ ;
- Raio médio de gotas (raio médio de Sauter):  $\frac{\mu_3}{\mu_2}$ .

Como pode ser observado, as propriedades são totalmente determinadas através de um pequeno número de momentos de baixa ordem. Isso acarreta em uma considerável diminuição do número de equações diferenciais parciais a serem resolvidas. Uma das maneiras mais simples de conseguir isso é a função de distribuição assumir a forma de uma função conhecida. Segundo JOHN *et al.* [131], algumas das funções mais empregadas para a reconstrução da distribuição de tamanho de partículas são Gaussianas (ou normais), log-normais, função- $\beta$  e função- $\gamma$ . O principal problema na solução das equações de transporte dos momentos é que, quando a função  $f$  não é conhecida, a integral do lado direito da Equação 2.116 não pode ser resolvida diretamente para uma forma arbitrária de  $g(r)$ . O método dos momentos convencional é forçado a aplicar suposições ou certas formas de  $g(r)$  que permitam um fechamento exato da Equação 2.116. Por exemplo, a equação de transporte de momento é fechada de maneira recursiva se a taxa de crescimento de gota for simplificada para a forma:

$$g(r) = a + br, \quad (2.119)$$

onde  $a$  e  $b$  são constantes que dependem apenas das propriedades do vapor, ou seja, são independentes de  $r$  [132]. Essa taxa de crescimento pode ser calculada para o raio médio da área da superfície,  $r_{20} = \left(\frac{\mu_2}{\mu_0}\right)^{\frac{1}{2}}$ . A modelagem do processo de crescimento com base no tamanho médio das gotas supracitado, resulta em taxas de crescimento imprecisas, considerando os escoamentos supersônicos de vapor úmido, onde os raios geralmente abrangem uma faixa muito ampla [30]. Em geral,

os modelos desenvolvidos para o crescimento de gotas são mais sofisticados do que as aproximações propostas na literatura [30]. O método de momentos com aproximação por quadratura (*QMOM-Quadrature method of moments*) foi introduzido como uma alternativa, permitindo contornar algumas das dificuldades que encontradas no fechamento das integrais para modelar os escoamentos multifásicos complexos. Dito isso, alguns trabalhos na literatura que fazem uso desse método AFZALIFAR *et al.* [31], GERBER e MOUSAVI [66], BLONDEL *et al.* [69], UPADHYAY [133] enfatizam a eficiência dele para cálculo da função de distribuição principalmente próximo à zona de nucleação [31], para prever distribuições bi-modais [66] e desatacam a precisão do modelo QMOM para capturar adequadamente o choque de condensação, a distribuição de gotas, e até mesmo, a frequência de um fenômeno instável, como a oscilação de uma onda de choque na presença de condensação [69]. Portanto, essa metodologia foi escolhida na análise da polidispersão do presente trabalho e será detalhada na próxima subseção

#### 2.4.5.2 Aproximação da integral por quadratura

Como a integral do lado direito da Equação 2.116 deve ser avaliada, mas a função de distribuição é desconhecida, surge uma alternativa proposta por MCGRAW [134] que é amplamente utilizada (principalmente em caracterização de aerossóis) e foi estudada em detalhe por JOHN e THEIN [135]. Este método é muito preciso, não só para representar processos como nucleação e crescimento, mas também coalescência e quebra [136]. Tal procedimento é denominado método dos momentos com quadratura e faz uso da quadratura Gaussiana de n-pontos para aproximar a distribuição de tamanho de partícula de acordo com um conjunto finito de funções de delta de Dirac. Logo, a integral da equação Equação 2.117 pode ser aproximada à uma soma do produto das abscissas  $(r_i)_{i=1..n}$  e pesos  $(w_i)_{i=1..n}$  como descrito na equação abaixo:

$$\int_0^{\infty} r^{j-1} g(r) f(r) dr \approx \sum_{i=1}^n r_i^{j-1} g(r_i) \omega_i \quad (2.120)$$

Na equação acima,  $f(r)$  é uma função de densidade numérica univariada com coordenada interna  $r$  a ser aproximada e  $g(r)$  é uma função genérica a ser explicitada. Uma forma de determinar os pesos e abscissas para uma aproximação preditiva da integral é utilizar as propriedades de polinômios ortogonais e suas respectivas relações de recorrência. A ideia é gerar uma sequência de polinômios que são ortogonais em relação à função de densidade numérica desconhecida, cujos momentos são conhecidos. Com isso, a função que está sendo integrada é aproximada usando um conjunto de polinômios ortonormais em um espaço funcional adequadamente definido [137]. Em particular, uma base ortonormal de polinômios pode ser escolhida para aproximar qualquer função suave.

Nesse contexto, existem várias maneiras pelas quais a base ortonormal pode ser criada. Um procedimento bem conhecido é usar o de ortogonalização de Gram-Schmidt para a sequência linearmente independente  $1, x, x^2, \dots, x^n, \dots$  [138]. Evidentemente, que a aplicação direta da ortogonalização de Gram-Schmidt requer uma manipulação considerável. Ademais, para polinômios de ordem superior, envolve o cálculo de determinantes de alta ordem, podendo ser uma operação muito mal condicionada. O método mais conveniente é usar as relações de recorrência de três termos que abrangem todos os polinômios ortogonais.

Dessa forma, um conjunto de polinômios  $P_0(r), P_1(r), \dots, P_i(r)$  com  $P_i(r) = k_{i,0}r^i + k_{i,1}r^{i-1} + \dots + k_{i,i}$  é ortogonal no intervalo de integração  $\Omega_r$ , em relação a função peso, se:

$$\int_{\Omega_r} f(r)P_i(r)P_\beta(r) dr \begin{cases} = 0, i \neq \beta \\ > 0, i = \beta \end{cases}, \quad (2.121)$$

E é dito ortonormal se:

$$\int_{\Omega_r} f(r)P_i(r)P_\beta(r) dr = \begin{cases} 0, i \neq \beta \\ 1, i = \beta \end{cases}, \quad (2.122)$$

Como consequência, qualquer conjunto de polinômios  $P_i(r)$  possui uma relação de recorrência relativa a quaisquer três polinômios consecutivos na sequência abaixo:

$$P_{i+1}(r) = (r - \alpha_i)P_i(r) - (\beta_i)P_{i-1}(r), \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (2.123)$$

com  $P_{-1}(r) = 0$  e  $P_0(r) = 1$ .

Os coeficientes  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  podem ser reescritos em termos dos momentos. Os coeficientes necessários para a construção de um polinômio de ordem  $n$  podem ser calculados a partir dos primeiros momentos  $2n - 1$  da função de distribuição numérica.

Por fim, para a Equação 2.116 ser uma aproximação por quadratura é necessário que seus nós  $r_i$  coincidam com as  $i$  raízes do polinômio  $P_{i+1}(r)$  da ordem  $i$  ortogonal em  $r$ , com relação à função de peso  $f(r)$ . O cálculo das raízes do polinômio é feito com um algoritmo de quadratura, conseqüentemente, a precisão do método depende claramente da precisão desses algoritmos. Os principais algoritmos de inversão utilizados nos trabalhos contendo com nucleação e crescimento de gotas são o algoritmo de Chebyshev modificado usado por AFZALIFAR *et al.* [31], também conhecido como algoritmo de Wheeler [139], o algoritmo original de Chebyshev [140] usado em UPADHYAY [133], e o algoritmo do Produto-Diferença (*PDA-Product-Difference Algorithm*) [141] usado por UPADHYAY e EZEKOYE [142].

### 2.4.5.3 Algoritmos de quadratura

Uma maneira eficiente de computar as raízes  $P_i(r)$  é usando a propriedade de recursão de polinômios ortogonais (Equação 2.123) representada por um sistema linear de equações na forma:

$$\begin{bmatrix} \left[ \begin{array}{cccccc} \alpha_0 & \beta_1 & \dots & \dots & \dots \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \beta_{i-1} & \alpha_{i-1} & \beta_i \\ \dots & \dots & \dots & \beta_i & \alpha_i \end{array} \right] - \mathbf{rI} & \begin{bmatrix} P_0 \\ P_1(r) \\ \dots \\ \dots \\ P_i(r) \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ \dots \\ 0 \\ P_{i+1} \end{bmatrix}. \end{bmatrix} \quad (2.124)$$

Isso significa que  $r_i$  é uma raiz do polinômio de grau  $i + 1$  somente se  $r_i$  for um autovalor de  $\tilde{\mathbf{A}}_i$ . Em resumo, o cálculo da regra de quadratura depende de dois passos:

1. O cálculo dos coeficientes de recorrência  $\boldsymbol{\beta}_i = [\beta_0, \dots, \beta_i]^T$  e  $\boldsymbol{\alpha}_i = [\alpha_1, \dots, \alpha_i]^T$ .
2. O cálculo dos autovalores e os autovetores de  $\tilde{\mathbf{A}}_i$ .

Vários algoritmos estão disponíveis na literatura para calcular os coeficientes de recorrência, dentre eles estão o *PDA* e o algoritmo de Chebyshev. As técnicas para calcular as abscissas e os pesos a partir dos momentos é geralmente uma operação mal condicionada. Isso significa que pequenos erros nos momentos mais altos podem levar a grandes erros nas abscissas e pesos da quadratura. Uma comparação entre os dois algoritmos para achar os pesos e abscissas usando quadratura Gaussiana pode ser encontrada em UPADHYAY [133] e evidencia que o algoritmo PDA não funciona para todos os tipos de distribuições e nem para quadraturas de ordem razoavelmente alta. Ademais, também mostra que o algoritmo Chebyshev é mais robusto que o algoritmo PDA e pode ser usado para uma classe mais ampla de problemas. O algoritmo de Chebyshev não resolve completamente o problema do mau condicionamento. Com isso, WHEELER [139] sugerem o uso dos momentos modificados em vez dos momentos originais para calcular os coeficientes de recursão. Entretanto, sua aplicação envolve a integração de funções de densidade e requer que a distribuição desconhecida seja "suficientemente próxima" de uma distribuição padrão, cujos coeficientes de recursão sejam conhecidos. Neste caso, o cálculo desses coeficientes para a distribuição desconhecida, usando os coeficientes da distribuição conhecida é uma operação muito estável e bem condicionada, com quase nenhuma perda de precisão. Além disso, o uso de momentos modificados em uma técnica como o QMOM apresenta várias dificuldades detalhadas em UPADHYAY [133]. A aplicação do QMOM à evolução dos momentos modificados é um tópico possível para uma investigação mais aprofundada. A principal limitação do algoritmo Chebyshev, além do

problema de mal condicionamento ainda existir, é que ele é aplicável apenas para funções de distribuição univariadas ou para funções de distribuição multivariada do tipo proveniente do produto de variáveis aleatórias independentes. É necessário investigar a extensão do algoritmo de Chebyshev dimensões maiores de coordenadas internas. Diante do exposto, como o presente é caracterizado por uma equação de balanço populacional univariada e com função de distribuição desconhecida, o algoritmo de Chebyshev original foi utilizado para inversão dos momentos. A formulação detalhada do PDA e do algoritmo de Chebyshev original são apresentadas no Apêndice 5.1.2.

Com este algoritmo, o número de abscissas computadas é  $n = \frac{j}{2}$  quando se usa  $j$  momentos.

Finalmente, a integral em Equação 2.116 é então aproximada por:

$$j \int_0^{\infty} r^{j-1} g(r) f(r) dr \approx j \sum_{i=1}^n r_i^{j-1} g(r_i) w_i \quad (2.125)$$

Supondo que  $f(r) \cong \sum_{i=1}^n w_i \Delta_{r-r_i}$  ( $\Delta_{r-r_i} = \delta(r - r_i)$ ). Usando Equação 2.125, a equação de transporte Equação 2.116 está agora escrita na forma:

$$\frac{\partial(\rho\mu_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\mu_j\mathbf{v})}{\partial x} = \rho J_* r_*^j + j\rho \sum_{i=1}^n r_i^{j-1} g(r_i) w_i \quad (2.126)$$

Face ao exposto, a abordagem usando quadratura Gaussiana aumenta as possibilidades de escolha da lei para avaliar o crescimento da fase líquida. Entretanto, a avaliação dos pesos e abscissas requer que os momentos da função de distribuição de partículas sejam diferentes de zero, o que não é o caso quando a nucleação ocorre pois representa o surgimento de partículas no sistema. Para superar esse problema, alguns autores propuseram adicionar sementes na entrada do domínio computacional [143]. No caso apresentado, isso não será necessário, pois, a utilização de uma distribuição não nula é o suficiente para a inicialização do algoritmo. Logo, os momentos foram inicializados partir dos momentos normalizados de uma função Gama ( $\Gamma$ ) e para dar dimensão aos mesmos, foi usada a dimensionalização MCCOY e MADRAS [128]. Pois, as equação de transporte também possuem dimensão. O procedimento de dimensionalização é detalhado no Apêndice 5.1.2.

A etapa a seguir descreve brevemente o algoritmo de solução para condensação de vapor polidisperso usando o Método de Momentos com Quadratura:

- Etapa 1: Dado os momentos iniciais.
- Etapa 2: Calcule pesos e abscissas a partir dos momentos dados.



- Etapa 3: Aproximar a integral que contém o termo fonte
- Etapa 4: Calcular o próximo passo de tempo para os momentos usando as equações de transporte
- Etapa 5: Repita da Etapa 2 à Etapa 4 até o final da simulação.

Cada etapa do procedimento acima será explicitada abaixo:

1. Etapa 1: Dado os momentos iniciais:

- Considerar inicialmente uma distribuição de tamanhos de gotas (Distribuição Gama)

2. Etapa 2: Calcule pesos e abscissas a partir dos momentos dados:

- Utilize um algoritmo de Chebyshev através dos momentos dados na etapa anterior
- As abscissas são iguais aos autovalores da matriz de Jacobi
- Os pesos vêm da primeira componente dos autovetores da mesma matriz

3. Etapa 3: Aproximar a integral que contém o termo não linear:

$$j\rho \int_0^\infty r^{j-1} g(r) f(r) dr = j\rho \sum_{i=1}^n (r_i^{j-1}) g(r_i) w_i$$

4. Etapa 4: Calcular o próximo passo de tempo para os momentos, usando as equações de transporte, onde  $J_*$  está explícito por unidade de volume, o que dispensa sua multiplicação pela massa da mistura:

$$\frac{\partial \rho \mu_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mu_j \mathbf{v}) = J_* r_*^j + j\rho \sum_{i=1}^n (r_i^{j-1}) g(r_i) w_i$$

5. Etapa 5: Entrar com os valores dos momentos calculados na etapa 2

6. Etapa 6: Repetir o procedimento de 2 a 4 até o fim da simulação.

# Capítulo 3

## Metodologia

### 3.1 Materiais

As etapas de construção de malha, simulação e pós-processamento, do presente trabalho, foram realizadas em um microcomputador com processamento intel *core* i7 de 3.30 GHz, memória RAM de 16 GB e disco rígido de 1050.5 GB. Quanto aos *softwares* usados no trabalho, a malha foi construída no Pointwise V18.1 R1 [144], a simulação feita em foam-extend 4.0, e o pós-processamento realizado no ParaView 5.4.1 em conjunto com com Gnuplot 5.2 e G3Data 1.5.2.

### 3.2 Métodos

Os aplicativo que serviu de base para implementação do código foi o *dbnsFoam* que foi alterado e renomeado para *condensationFoam*. As mudanças feitas tiveram como objetivo o cálculo dos termos-fonte da equação de balanço populacional e sua resolução através do método dos momentos com quadratura [134]. O algoritmo Chebyshev [140] de inversão dos momentos , implementado em C++ , foi acoplado ao aplicativo para obtenção dos pesos e abscissas.

Em análises preliminares (Capítulo 4), verificou-se que para temperaturas abaixo de  $240K$ , o modelo de nucleação que melhor se ajusta aos dados experimentais é o Clássico, enquanto que para temperaturas acima de  $240K$  é o com correção de Courtney. Portanto, uma junção entre os modelos com correção de Courtney e o modelo clássico foi apresentada por esta autora na Equação 3.1:

$$J_{HY} = J_{CL}(1 - \Theta) + J_{CN}\Theta \quad (3.1)$$

Com

$$\Theta = \frac{\max((T - 240), 0)}{\max((T - 240), 0)}$$

O modelo híbrido supracitado foi escolhido para o uso no presente trabalho, visto que, abrange uma parte considerável dos dados experimentais disponíveis para água, intercalando entre dois modelos existentes para diferentes faixas de temperatura. O valor de  $240K$  foi escolhido como valor intermediário para troca dos modelos, pois, dentre as temperaturas que contém dados experimentais, é nela que os dados começam a desviar da teoria Clássica.

### 3.2.1 Geometria para os testes com água

Com o objetivo de testar o programa implementado, um conjunto de perfis foram extraídos de PANDEY e SINGH [83] cujo bocal utilizado foi de Barschdorff representado na Figura 3.1.

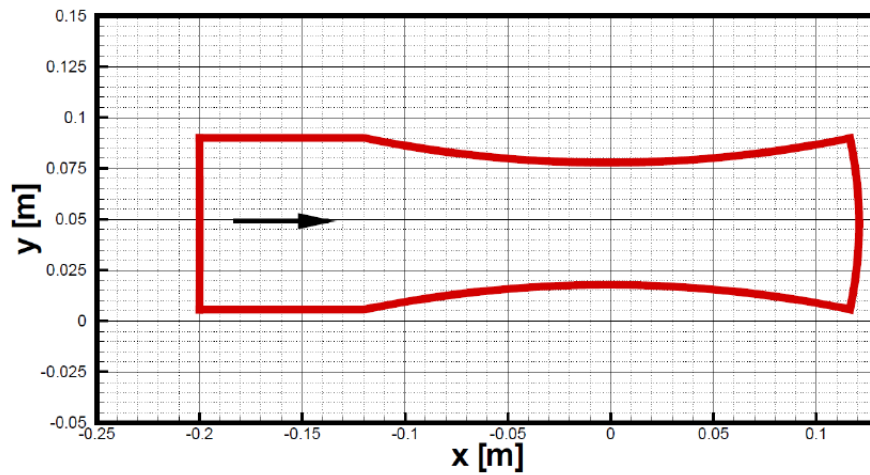


Figura 3.1: Geometria do bocal de Barschdorff [145]

Vale ressaltar que a geometria da Figura 3.1 foi utilizada no artigo de PANDEY e SINGH [83] em suas simulações, entretanto, no presente trabalho foram utilizados apenas os perfis obtidos pelo autor. Logo, foram utilizados como condição inicial neste trabalho, e, como o programa não possui acoplamento entre as fases, esses perfis não mudam ao longo da simulação. Por isso, esse perfis são simulados em uma geometria mais simples representada na Figura 3.2 com uma malha de 100 nós, para o cálculo das variáveis que caracterizam a condensação.

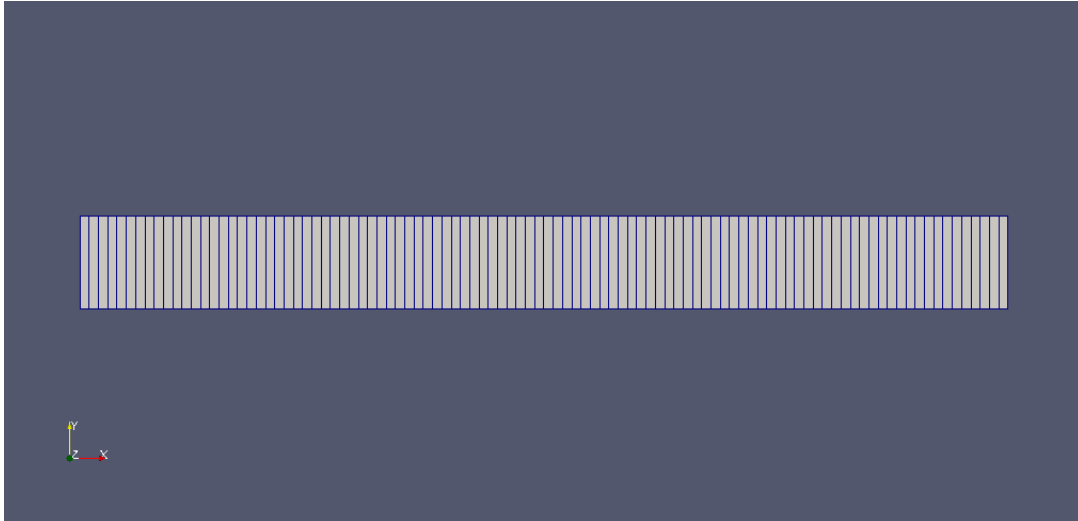


Figura 3.2: Geometria da simulação de água com malha de 100 nós

### 3.2.2 Geometria para os testes com dióxido de carbono

A geometria empregada no trabalho é a mesma do ARINA [45], cujos pontos da curva representada pelas equações 3.2 e 3.3 foram gerados por um *script* em Glyph dentro do Pointwise.

$$A(x) = 2.5 + 3 \left( \frac{x}{x_g} - 1.5 \right) \left( \frac{x}{x_g} \right)^2 ; x \leq x_g, \quad (3.2)$$

$$A(x) = 3.5 + \left( \frac{x}{x_g} \right) \left( 6 - 4.5 \left( \frac{x}{x_g} \right) + \left( \frac{x}{x_g} \right)^2 \right) ; x \geq x_g, \quad (3.3)$$

com  $x$  sendo a distância axial e  $x_g$  a distância da garganta. A geometria gerada pelas equações acima caracterizam o equipamento com uma entrada e uma saída conforme a Figura 3.3.

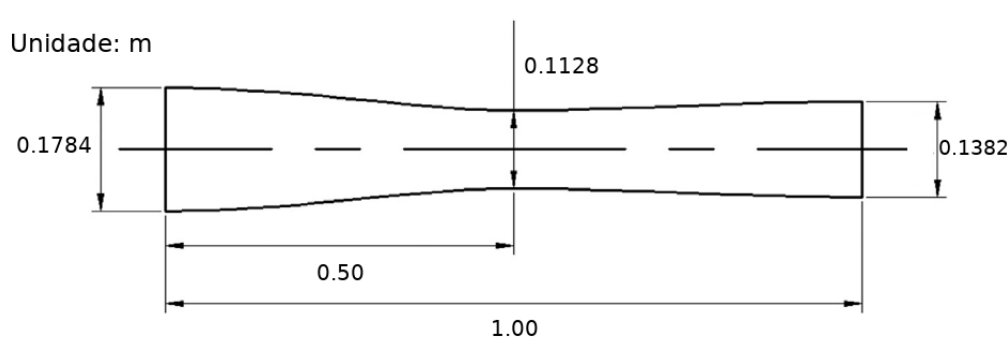


Figura 3.3: Geometria do bocal convergente-divergente por Arina (Adaptado de ARINA [45])

A Tabela 3.1 descreve as características da geometria adotada para as simulações

com água.

Tabela 3.1: Características da geometria usada nas simulações

Geometria	Dimensões (m)
Diâmetro da garganta ( $d_g$ )	0.1128
Comprimento da secção convergente ( $l$ )	0.50
Comprimento Total ( $L$ )	1.0
Diâmetro da entrada ( $d_e$ )	0.1784
Diâmetro da saída ( $d_s$ )	0.1382

### 3.2.3 Malhas

Para o teste de convergência de malha correspondente a geometria do ARINA [45] foi realizada uma simulação com pressão e temperatura na entrada de 4.0MPa e 282K respectivamente. As malhas construídas foram de 200, 400, 600, 800 e 1000 nós, todas quasi-unidimensionais e estruturadas.

Elas seguiram os critérios estabelecidos pelo foam-extend-4.0, segundo a utilidade *CheckMesh*. Dentre os critérios, destacam-se: a razão de aspecto (*aspect ratio*), está associada à razão entre as arestas dos elementos da malha, avaliando se elementos adjacentes não apresentam desproporção de tamanho, e sua condição ótima ocorre ao aproximar-se de 1.0; a não ortogonalidade (*Mesh non-orthogonality*), responsável por representar o ângulo entre a linha conectando o centro de duas células e o vetor normal à face comum entre elas, avaliando o alinhamento da malha com o escoamento. Logo quanto mais próximo de zero for esse ângulo, melhor a malha; o *skewness*, que mede a distância entre a onde a linha que liga o centro de dois elementos adjacentes toca na face e o centro geométrico da face em comum entre eles. Este é um critério que agrega aspectos tanto da razão de aspecto quanto da não ortogonalidade, e quanto menor seu valor, melhor é considerada a malha.

### 3.2.4 Condições de contorno

#### 3.2.4.1 Simulações com água

Os perfis axiais de pressão estática, de temperatura e do número de Mach provenientes da simulação de PANDEY e SINGH [83] estão ilustrados nas Figuras 3.4, 3.5 e 3.6 respectivamente.

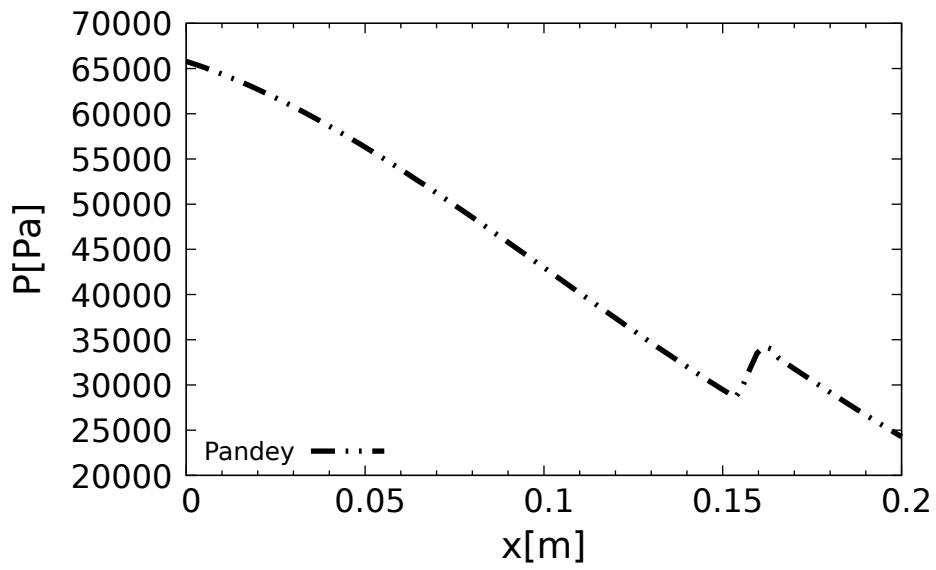


Figura 3.4: Perfil de pressão estática de PANDEY e SINGH [83]

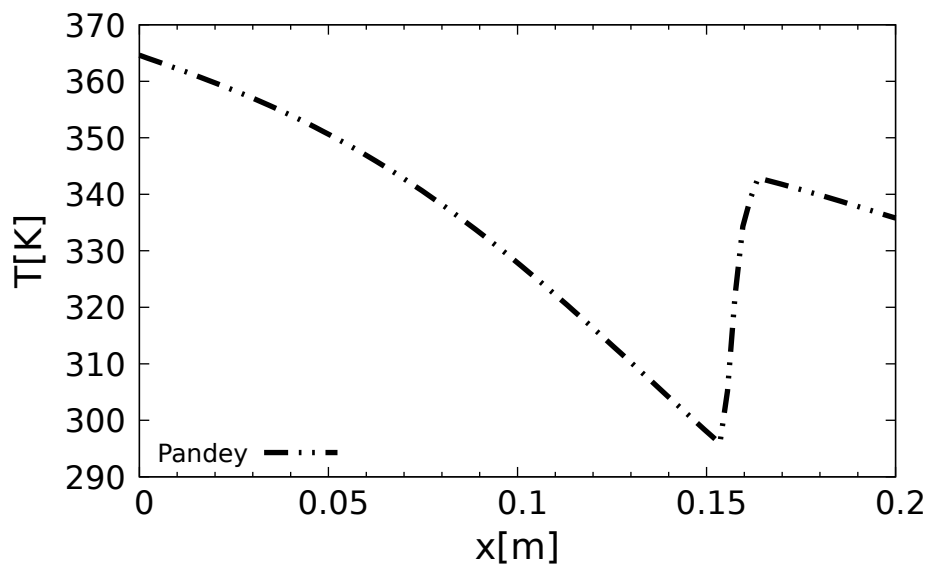


Figura 3.5: Perfil de temperatura de PANDEY e SINGH [83]

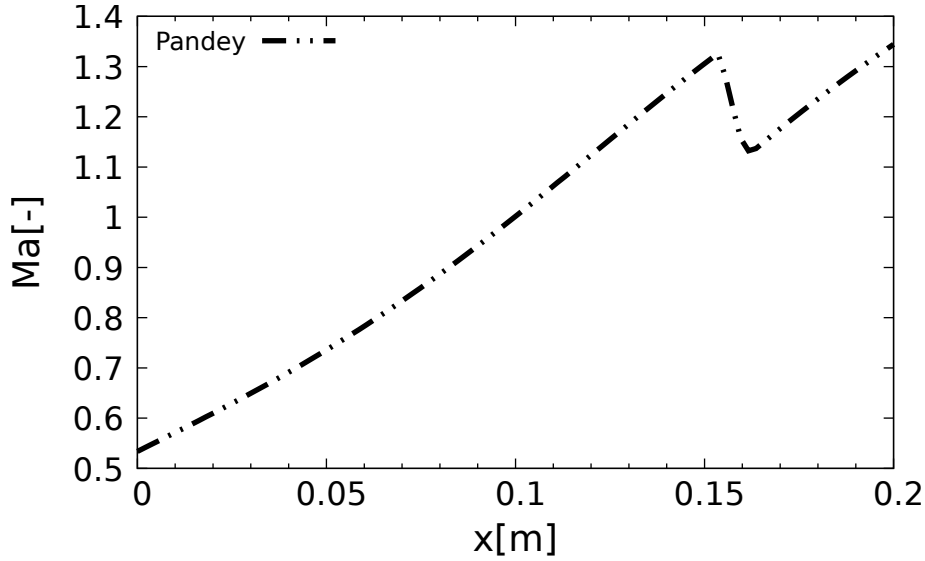


Figura 3.6: Perfil do número de Mach de PANDEY e SINGH [83]

O trabalho de PANDEY e SINGH [83] usou modelo de nucleação clássica, com modelo de mistura como forma de acoplamento entre as fases. A fase líquida foi representada pelo modelo de duas equações extras, uma para número de partículas e outra para fração mássica de líquido. Com isso, ele não considerou a polidispersão (monodisperso) e usou uma versão modificada da equação de Peng-Robinson para caracterizar o gás. Suas simulações também foram Quasi-1D usando o método de AUSM<sup>+</sup> para aproximar os fluxos numéricos de Riemann. As condições de contorno na entrada foram de  $p_0 = 78390 Pa$  e  $T_0 = 380.55 K$  para pressão e temperatura respectivamente, e na saída foi aplicada a condição de Neumann para ambas as variáveis.

### 3.2.4.2 Simulações com dióxido de carbono

As condições de contorno de pressão e temperatura usadas nas simulações estão explicitadas na Tabela 3.2. Elas variam uma das condições de operação, mantendo a outra constante. No caso das simulações indicadas pelos nomes S-I, S-II, S-III, S-IV e S-V, a pressão é mantida constante com valor de 4.0 MPa, enquanto a temperatura varia na faixa de 282K à 290K. Já para os casos denominados S-VI, S-VII, S-I, S-VIII e S-IX, foi a temperatura que se manteve constante em 282K, enquanto a pressão variou entre 3.6 MPa à 4.4 MPa. A pressão na saída é proveniente da proporção proposta por ARINA [45] na qual  $p_f = 0.83049 p_e$ , com  $p_f$  como pressão na saída e  $p_e$  como de entrada.

Tabela 3.2: Condições de contorno de pressão e temperatura na entrada do equipamento usadas nas simulações

Simulações	T(K)	P(MPa)
S-I	282	4.0
S-II	284	4.0
S-III	286	4.0
S-IV	288	4.0
S-V	290	4.0
S-VI	282	3.6
S-VII	282	3.8
S-VIII	282	4.2
S-IX	282	4.4

Os valores correspondentes para as condições de temperatura e pressão são limitados pelo diagrama de fases do  $CO_2$  puro ilustrado na Figura 3.7. Essas faixas de foram escolhidas pois a fase gasosa estaria mais próxima de condensar, já que, todas elas iniciam o processo na condição de gás e atravessam para a zona de formação de líquido. Nessa figura as simulações estão representadas por seus respectivos números (I à IX).

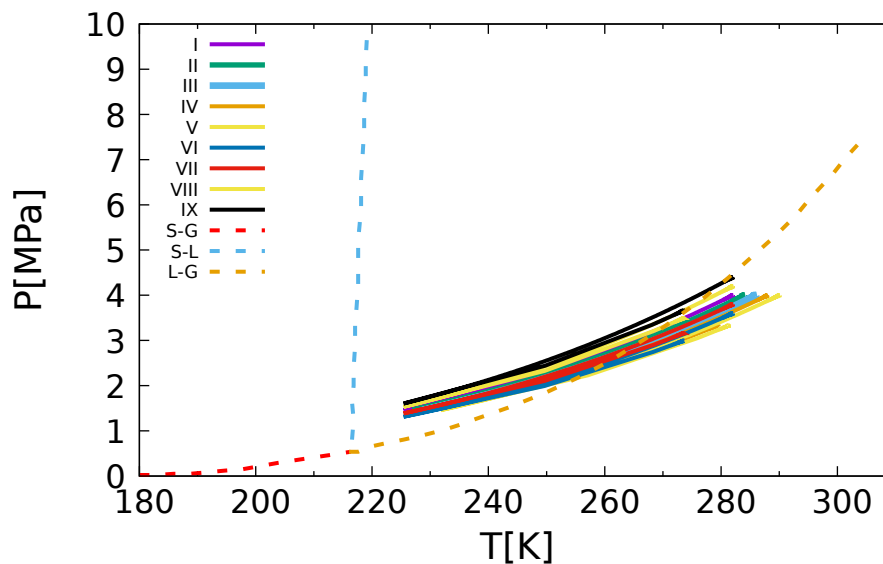


Figura 3.7: Diagrama de fases do  $CO_2$  com condições de entrada para as simulações (Adaptado de TOOLBOX [146])

Para a parede, adotou-se velocidade zero. Enquanto isso, nas outras condições de contorno foi utilizado o tipo gradiente zero, que define que o valor do contorno seja igual ao da célula adjacente. O significado é que o e seu gradiente é nulo na direção



perpendicular ao contorno. No caso dos momentos, a condição do tipo gradiente zero é imposta para todos os contornos. A condição inicial possui os valores de  $1$ ,  $1 \times 10^{-9}$ ,  $2 \times 10^{-18}$ ,  $6 \times 10^{-27}$ ,  $24 \times 10^{-36}$  e  $120 \times 10^{-45}$ , para os momentos de zero a cinco respectivamente. Os valores supracitados foram calculados a partir de uma função Gama conforme citado na revisão bibliográfica.

As propriedades físicas, cujo cálculo não está explícito na revisão bibliográfica, dentre elas, o número de Prandtl, a viscosidade do gás, a condutividade térmica, a temperatura e a pressão críticas, o fator acêntrico, o fator de compressibilidade, a temperatura de ebulição normal e a constante específica do gás foram calculadas usando a biblioteca do BELL *et al.* [147].

### 3.2.5 Esquemas numéricos para solução das EDP's

Nesta seção é abordada as principais configurações escolhidas no foam-extend-4.0 explicitadas na Tabela 3.3 para as simulações de  $CO_2$  e  $H_2O$ , tanto para discretização especial e temporal (fvSchemes), como os para os métodos de solução do sistema linear (fvSolution).

Tabela 3.3: Configurações para simulação dos casos com  $CO_2$  e  $H_2O$ .

fvSchemes			fvSolution		
ddtSchemes	Euler/Runge-Kutta explícito		solvers	rho/rhoU/rhoE	diagonal
gradSchemes	Gauss linear			U/h	smoothSolver (GaussSeidel)
divSchemes	dbns	roe		M0/M1/M2	smoothSolver (GaussSeidel)
	default	Gauss upwind	/M3/M4/M5		

Na metodologia numérica, para os termos de gradiente (*gradSchemes*), foi escolhida a opção denominada *Gauss linear* que especifica a discretização de volumes finitos padrão pela integração de Gauss que requer a interpolação de valores dos centros das células para os centros das faces. O esquema de interpolação é dado pela palavra *linear*, caracterizando a interpolação linear ou diferenças centrais. O esquema denominado *Gauss upwind* foi utilizado não só para os termos advectivos (*divSchemes*) na simulação do caso teste com água, mas também para os momentos, entalpia e velocidade do caso teste com  $CO_2$ . Para solução do problema de Riemann encontrado no caso teste com  $CO_2$  foi escolhido o método de Roe-Pike [119] com limitador de fluxo de primeira ordem e foi realizada a interpolação (*interpolationSchemes*) de  $\rho$  de forma linear para explicitar as variáveis U e T que são calculadas na forma conservada ( $\rho\phi$ ). No caso da discretização temporal (*ddtSchemes*) foi utilizado em Euler explícito para as variáveis do caso teste com água. Já para o caso

teste com  $CO_2$ , as variáveis calculadas pelos fluxos aproximados por Roe Pike usam Ruge Kutta de quarta ordem com baixo armazenamento [120], e as outras variáveis, como os momentos, a entalpia e a velocidade, usam Euler implícito [96].

As matrizes geradas a partir da discretização dos termos supracitados são esparsas, significando que elas predominantemente incluem coeficientes com valor 0, conseqüentemente, os métodos numéricos são geralmente iterativos, isto é, eles são baseados na redução da equação residual sobre soluções sucessivas. O resíduo é uma medida do erro na solução, de forma que quanto menor ela for, mais precisa será a solução. Logo, o resíduo é avaliado substituindo a solução atual no sistema de equações e tomando a magnitude da diferença entre os lados esquerdo e direito. Ele também é normalizado para torná-lo independente da escala do problema que está sendo analisado. Antes de resolver uma equação para um campo específico, o resíduo inicial é avaliado com base nos valores atuais do campo. Após cada iteração do *solver*, o resíduo é reavaliado. O *solver* é interrompido se o resíduo cai abaixo da tolerância determinada em (*tolerance*) ou o número de iterações excede um número máximo de iterações (*maxIter*).

O método iterativo usado foi Gauss-Seidel [96] com número de varreduras padrão (*nSweeps*), antes que o resíduo seja recalculado, seguindo os parâmetros de tolerância. Outro parâmetro importante é *relaxationFactors* que controla o sub-relaxamento, uma técnica usada para melhorar a estabilidade de um cálculo, particularmente na solução de problemas de estado estacionário. O sub-relaxamento funciona limitando a quantidade que uma variável muda de uma iteração para a seguinte, modificando a matriz e a fonte da solução antes de resolver para um campo ou modificando o campo diretamente. Uma escolha ótima do fator de relaxação é aquela que é pequena o suficiente para assegurar uma solução estável, mas grande o suficiente para mover o processo iterativo adiante rapidamente. Dito isso, o valor utilizado foi o padrão do programa 0.5.

As simulações são transientes passo de tempo ajustável para manter o número de Courant máximo menor que 1. O número de Courant [115] (Equação 2.114), o qual deve ser próximo a 1.0 em muitos casos para que haja garantia de convergência. O tempo total de simulação de 0.6 s que corresponde à mais de cinco vezes o tempo de residência dos escoamentos simulados. Vale ressaltar que a simulação é transiente apenas por razões numéricas, já que o interesse é no estado estacionário.

# Capítulo 4

## Resultados e Discussões

Os principais resultados obtidos para as variáveis do escoamento das fases dispersa e contínua, através da amostragem dos perfis axiais para  $CO_2$  e  $H_2O$ , são discutidos nos parágrafos seguintes. Também foi realizado um comparativo de diferentes modelos para taxa de nucleação para ambas substâncias e são apresentados os resultados do teste de malha.

### 4.1 Convergência de malha para caso com $CO_2$

Para o teste de malha, a taxa de nucleação foi a primeira variável escolhida para avaliar a convergência da malha por possuir elevados gradientes após a garganta do equipamento (Figura 4.1), e o raio médio evidenciado na Figura 4.2 como segunda variável.

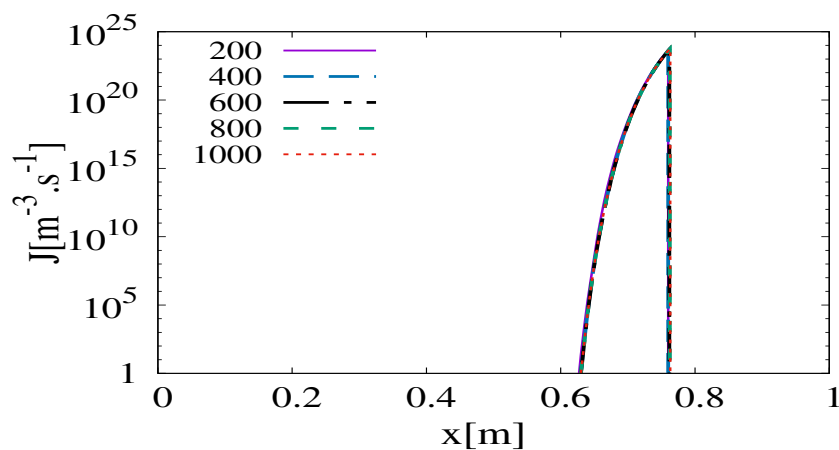


Figura 4.1: Teste de malha para taxa de nucleação.

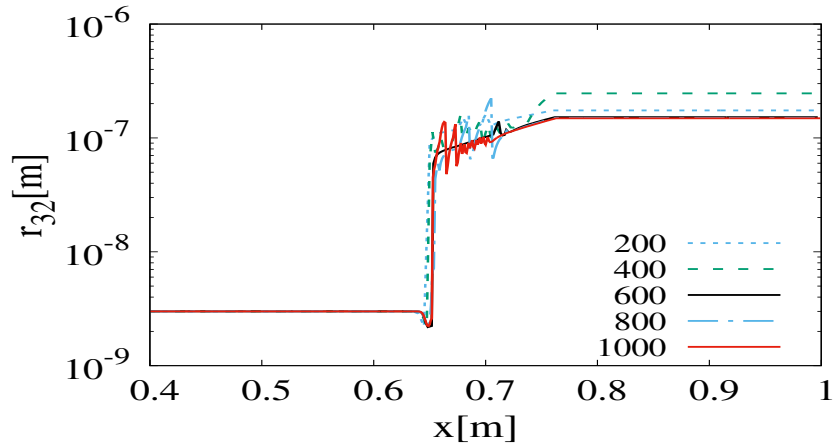


Figura 4.2: Teste de malha para raio médio.

A malha selecionada para as simulações foi a de 600 nós (Figura 4.3) já que apresentou menos oscilações relacionadas ao raio médio em relação as malhas com mais elementos, como as de 800 e 1000 nós. Esse resultado é incomum, e precisa ser melhor avaliado no futuro. Segundo o *CheckMesh*, ela apresentou razão de aspecto máxima aproximadamente de 101.661. Este valor elevado pode ser oriundo, do elementos de malha unidimensionais gerados conforme a sua largura é reduzida no refino. A não ortogonalidade média de 1.90202 e máxima de 44.3347 para uma face e *skewness* máximo de 1.13594.

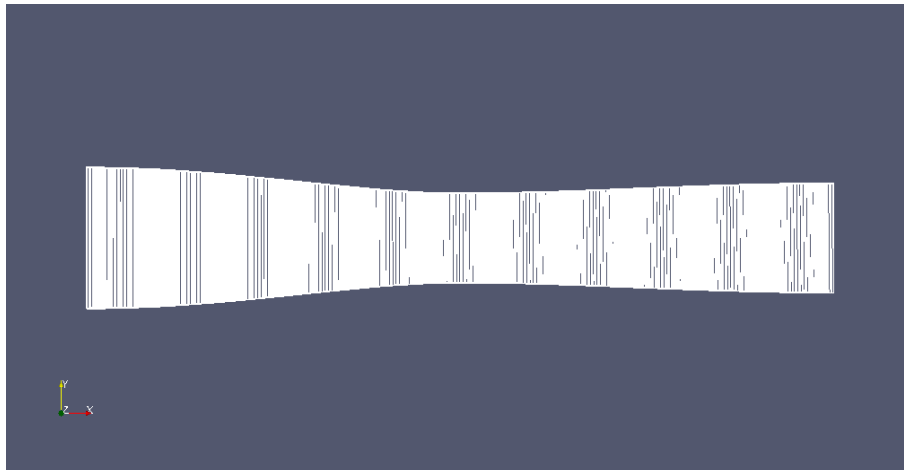


Figura 4.3: Malha uni-dimensional de 600 nós

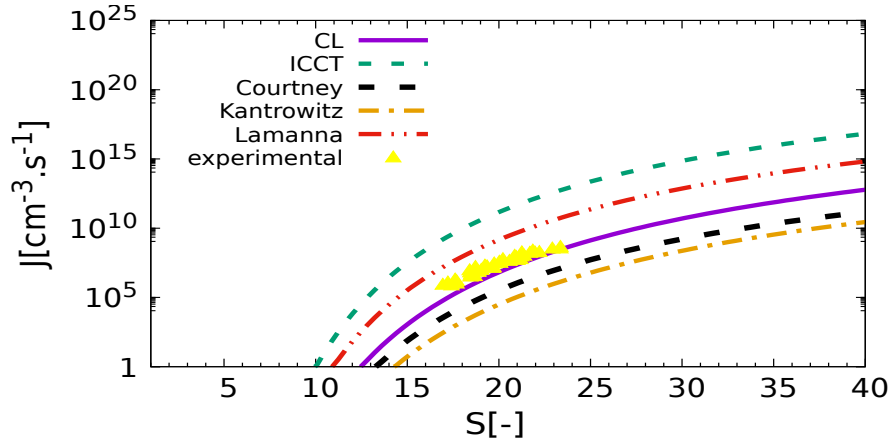
## 4.2 Comparação entre os modelos para taxa de nucleação

Dada a importância dos termos-fonte na modelagem da condensação, foi realizado um estudo mais detalhado dos modelos referentes à taxa de nucleação e suas res-

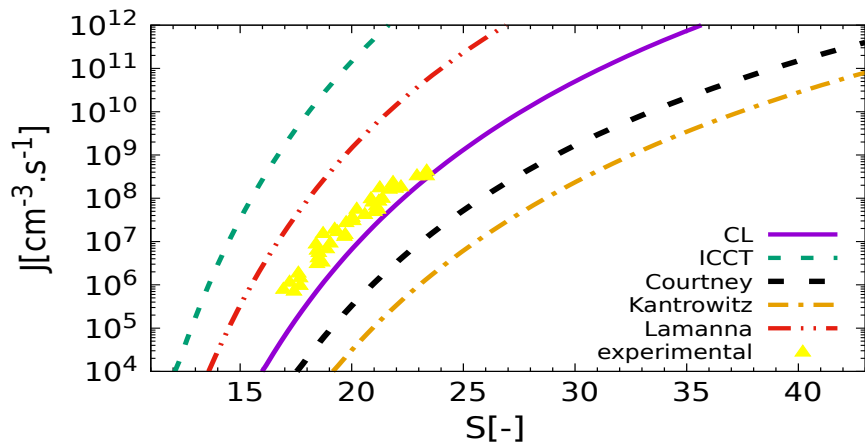
pectivas aplicações para  $CO_2$ . Uma comparação entre diferentes modelos para a taxa de nucleação foi feita, para escolher o modelo que se ajuste melhor aos dados experimentais para água de MILLER *et al.* [148] e WÖLK e STREY [88].

### 4.2.1 Avaliação para água

Primeiramente, foi avaliado o comportamento dos modelos mantendo a temperatura do gás constante, a fim de observar a dependência da taxa de nucleação em relação à supersaturação. Os resultados estão apresentados nas Figuras ??, para as temperaturas de  $220K$ ,  $230K$ ,  $240K$ ,  $250K$  e  $260K$ , respectivamente. Esse estudo foi realizado para os modelos Clássico (CL:Equação 2.61), modificado internamente consistente (ICCT: Equação 2.66), com correção de Courtney (Equação 2.62), com correção correção Não-isotérmica (Kantrowitz:Equação 2.63) e com correção de Lamanna (Equação 2.67), em comparação com dados experimentais de WÖLK e STREY [88]. A faixa de temperatura foi escolhida baseada na disponibilidade dos dados experimentais. O comportamento observado nas figuras relacionadas à água foi extrapolado para comparação qualitativa com o dióxido de carbono, visto que, não foram encontrados dados experimentais para ele. Como o padrão extrapolado repete-se com o aumento da temperatura, foi ilustrado somente para a de  $220K$ .



(a)



(b)

Figura 4.4: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $H_2O$  com dados experimentais [88] à temperatura constante de  $220K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado

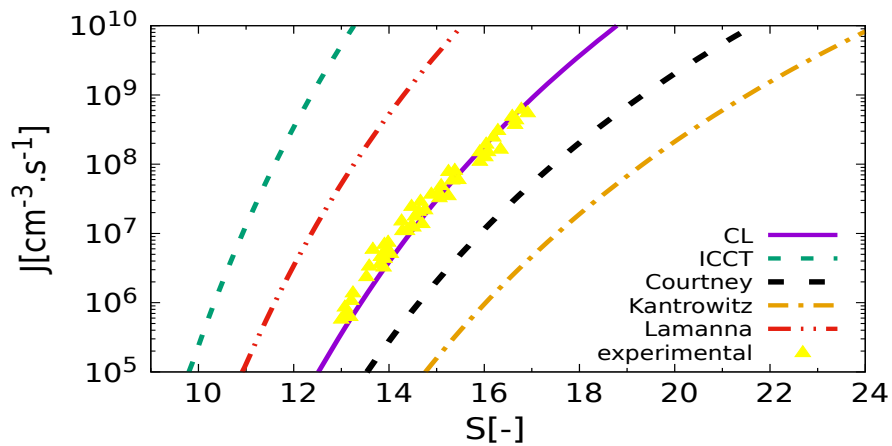


Figura 4.5: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $H_2O$  com dados experimentais [88] à temperatura constante de  $230K$

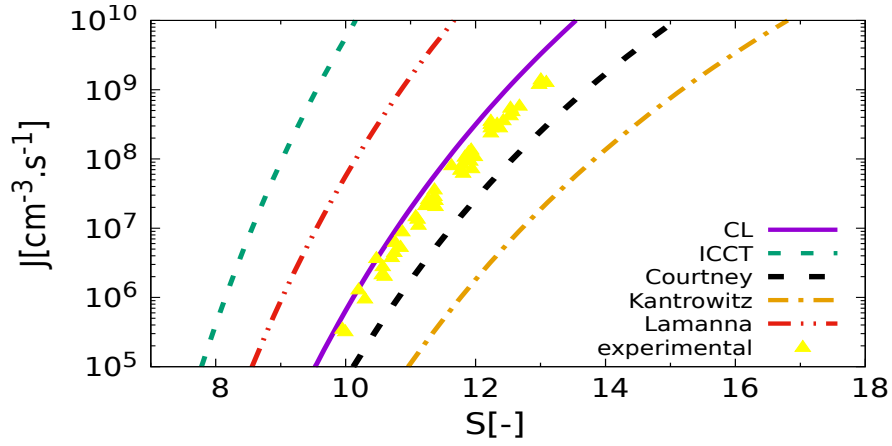


Figura 4.6: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $H_2O$  com dados experimentais [88] à temperatura constante de  $240K$ .

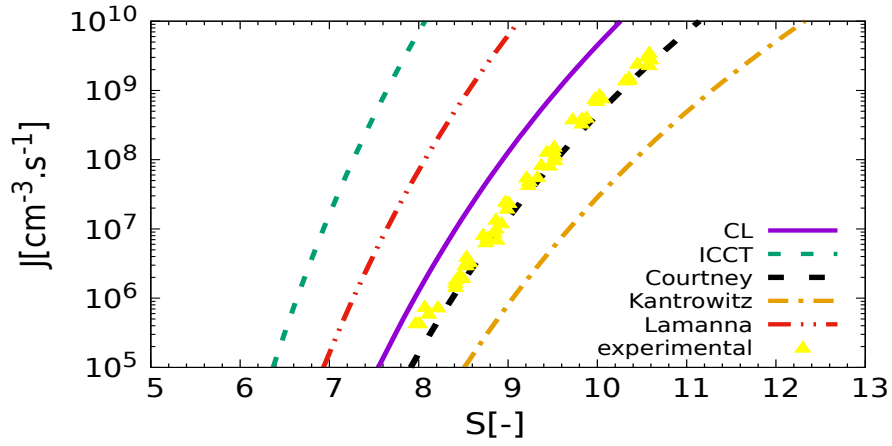


Figura 4.7: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $H_2O$  com dados experimentais [88] à temperatura constante de  $250K$ .

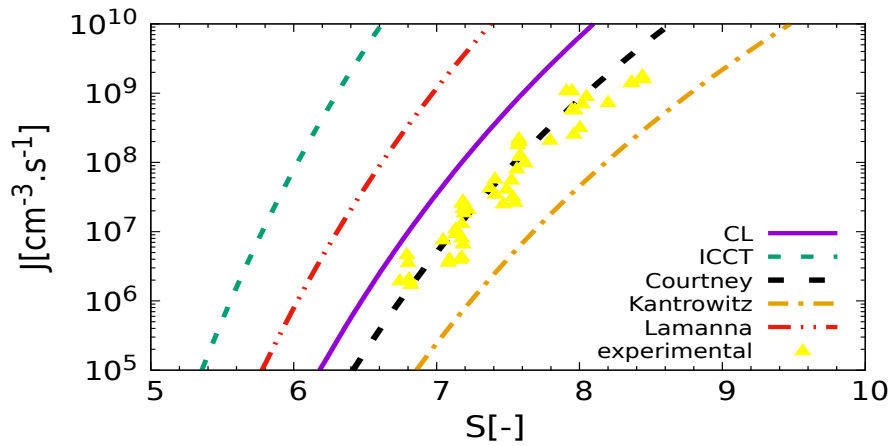


Figura 4.8: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $H_2O$  com dados experimentais [88] à temperatura constante de  $260K$ .

Como pode ser observado, o modelo ICCT e a o modelo com correção de Lamanna possuem os maiores desvios em relação ao modelo clássico e aos dados experimentais, portanto, suas aplicabilidades requerem mais estudos. Nota-se que, em temperaturas mais baixas, o modelo clássico abrange uma boa parte dos dados experimentais, como ilustrado nas Figuras 4.4 e 4.5. Entretanto, percebe-se um tendência relacionada a diminuição da temperatura para o modelo de Lamanna (Figura 4.4). No caso da temperatura de  $240K$ , os dados experimentais começam a sofrer um desvio da teoria clássica com valores mais elevados de supersaturação, como mostra a Figura 4.6. Tal fato deve-se à ausência da correção relacionada ao efeito da pressão parcial nos aglomerados, que fica mais intenso com o aumento da supersaturação. Por isso, com o aumento da temperatura e da supersaturação, os dados experimentais são melhor representados pela Correção de Courtney, como mostram as Figuras 4.7 e 4.8

Quando a temperatura do gás é constante, as curvas J-S de diferentes modelos de nucleação são muito semelhantes. Isso pode ser um indício que o principal fator de influência entre os diferentes modelos é a temperatura do gás. Dito isso, um estudo com o objetivo de avaliar a influência da temperatura na taxa de nucleação é ilustrado na Figura 4.9. Nela a taxa de nucleação é mantida constante com valor de  $J = 10000cm^{-3}.s^{-1}$  e a supersaturação e temperatura variam na faixa de disponibilidade dos dados experimentais.

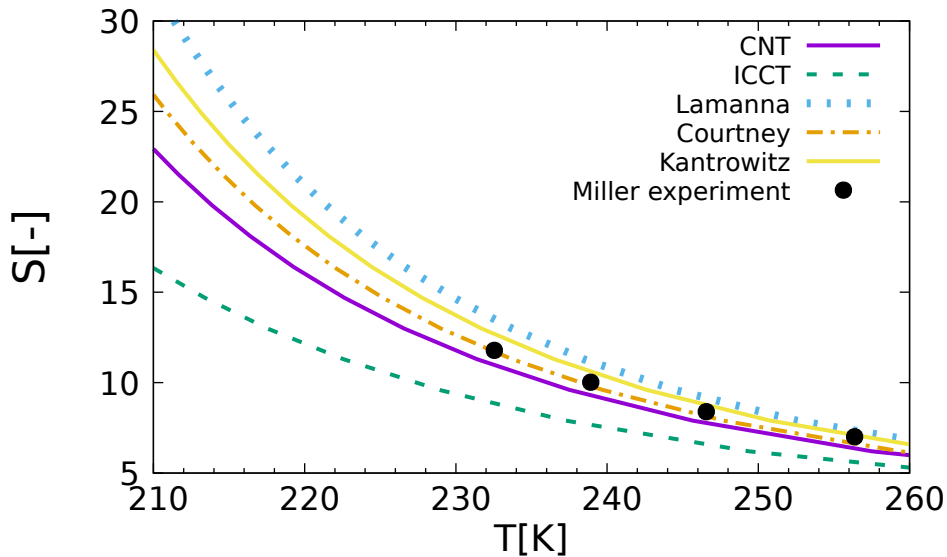


Figura 4.9: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $H_2O$  com dados experimentais [148] à taxa de nucleação constante de  $J = 10000cm^{-3}.s^{-1}$ .

Observa-se que a correção de Courtney abrange boa parte dos dados experimentais de supersaturação, e, a medida que a temperatura aumenta, as supersaturações previstas pelos diferentes modelos ficam mais próximas, com exceção do modelo in-

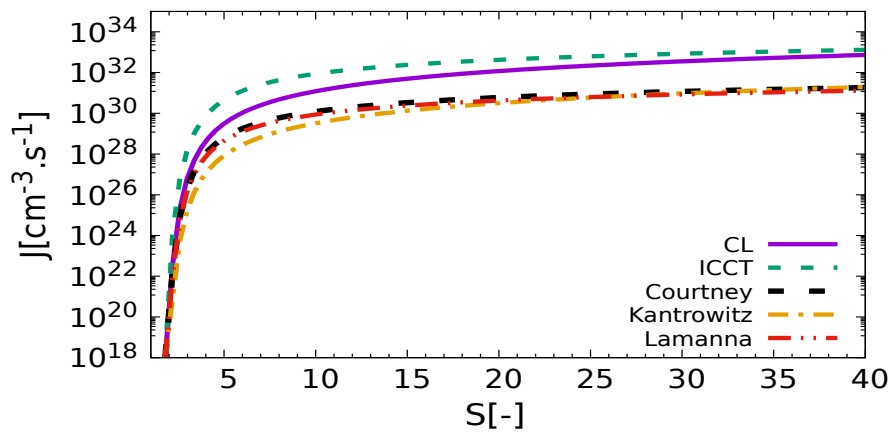


ternamente consistente, cujo desvio é superior em relação aos dados experimentais. Face ao exposto, nessa faixa de temperatura avaliada, o modelo Clássico encontra-se mais próximo dos dados experimentais nas temperaturas inferiores à  $240K$ . Já para temperaturas acima de  $240K$  o modelo de Courtney abrange a maior parte dos dados. Um estudo mais aprofundado voltado para faixas de temperaturas superiores é necessário, já que modelos como o de correção não isotérmica podem se aproximar dos dados experimentais, como mostra a tendência na Figura 4.9.

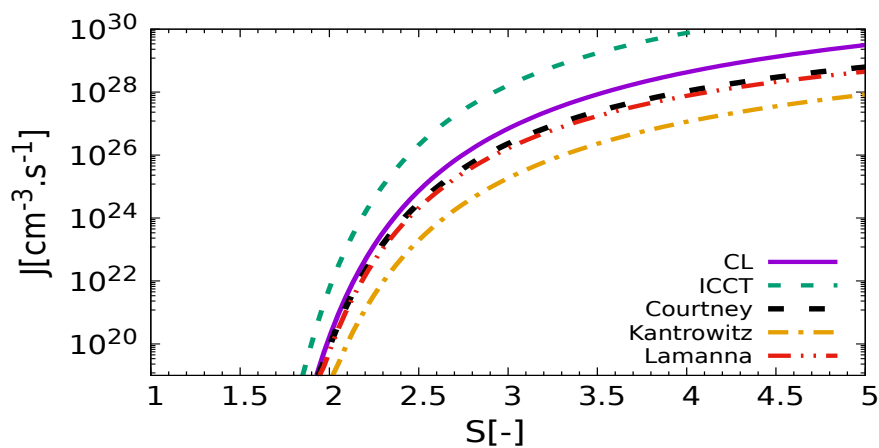
Em seguida, também foram avaliados os comportamentos dos modelos para  $CO_2$ , a fim de verificar semelhanças qualitativas para outra substância.

### **4.2.2 Avaliação para dióxido de carbono**

A princípio, foi avaliado o comportamento dos modelos mantendo a temperatura do gás constante assim como no tópico anterior. Estes resultados estão ilustrados nas Figuras ??.

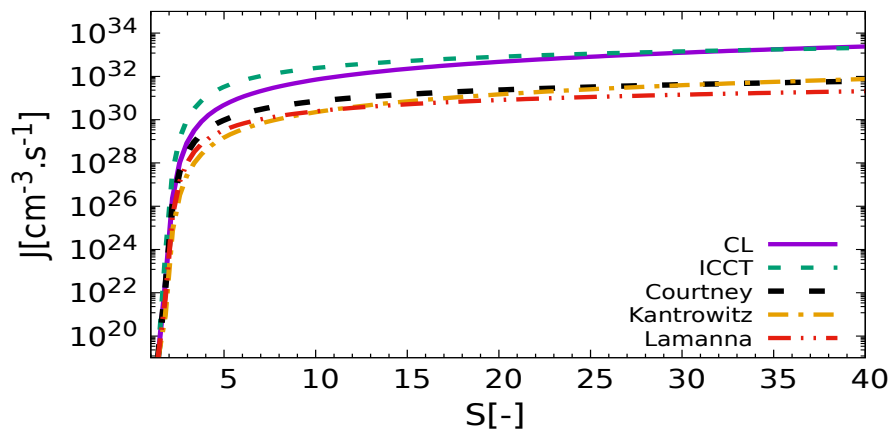


(a)

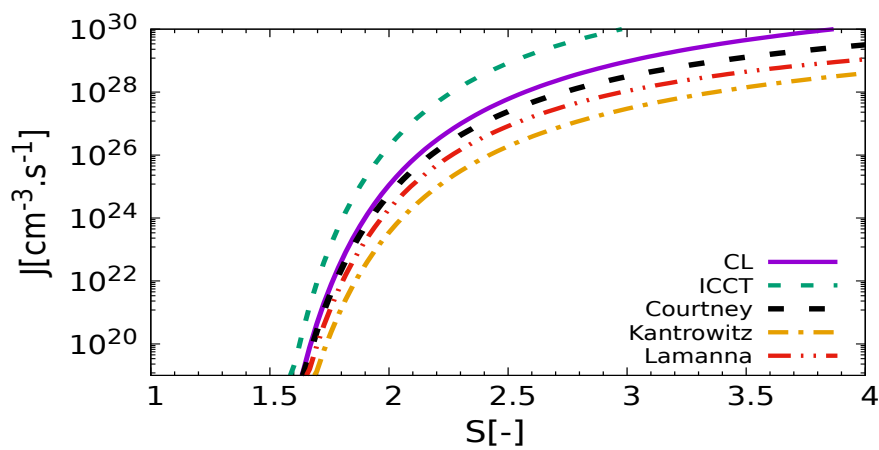


(b)

Figura 4.10: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $CO_2$  à temperatura constante de  $220K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado.

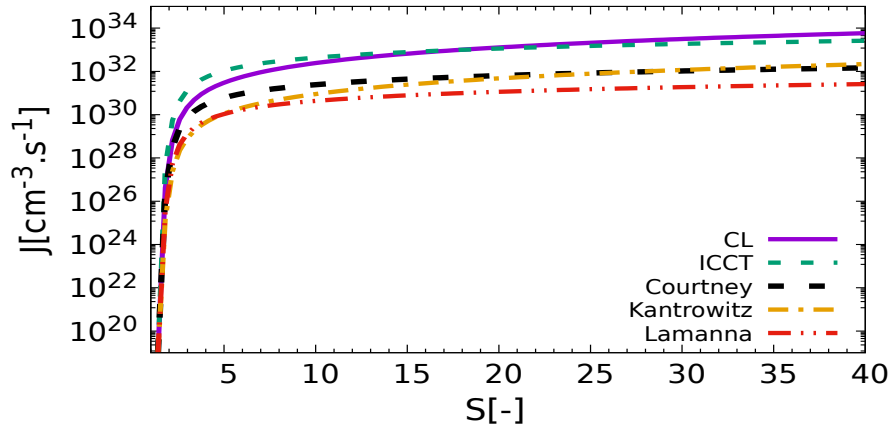


(a)

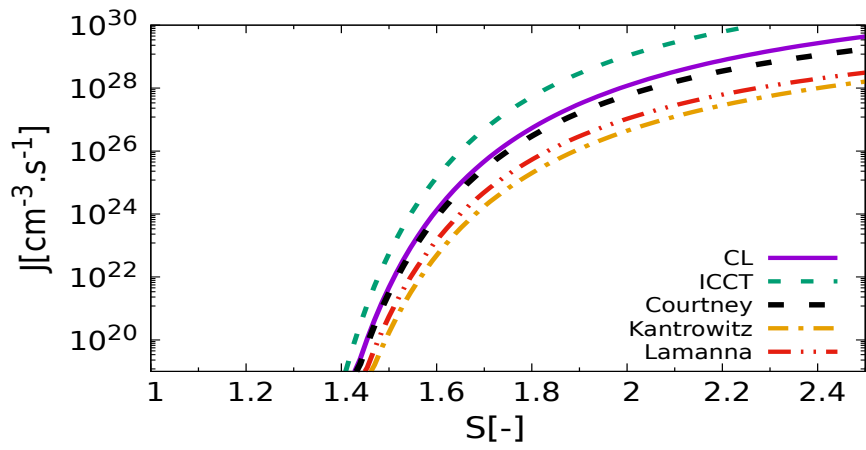


(b)

Figura 4.11: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $CO_2$  à temperatura constante de  $230K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado.

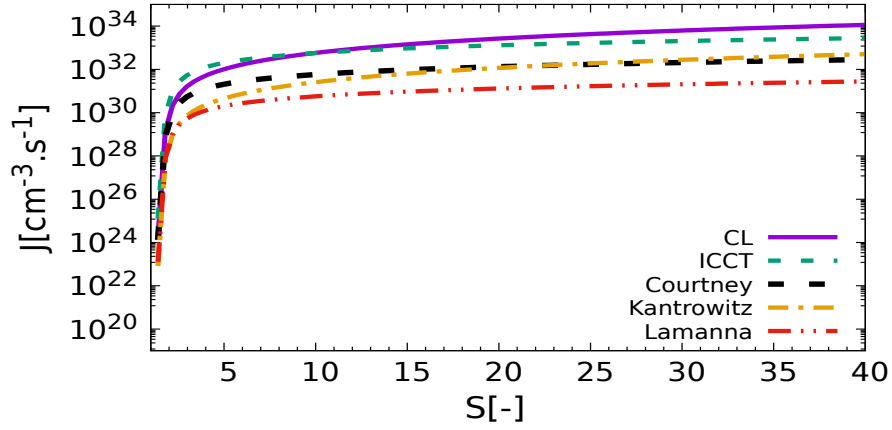


(a)

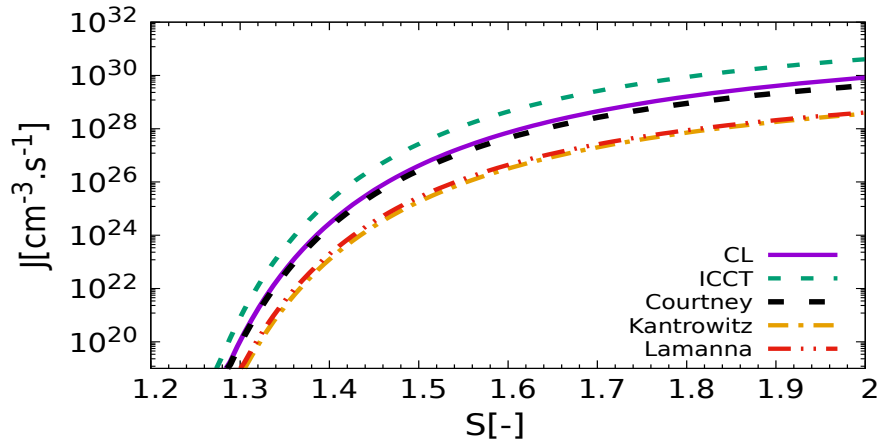


(b)

Figura 4.12: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $CO_2$  à temperatura constante de  $240K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado.

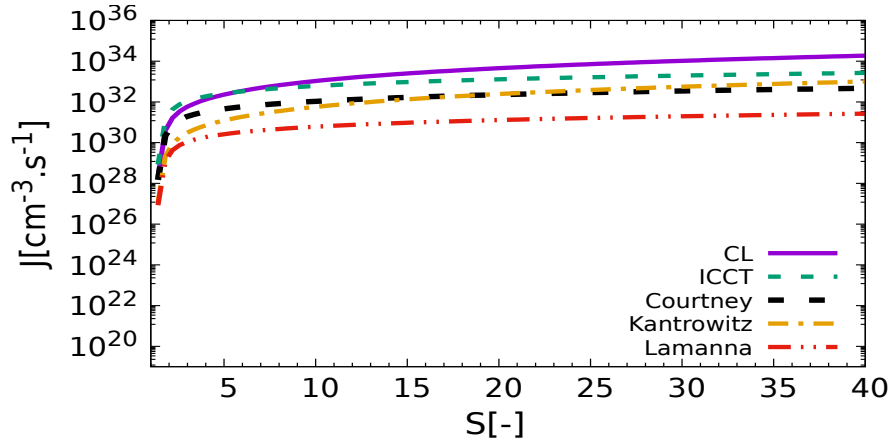


(a)

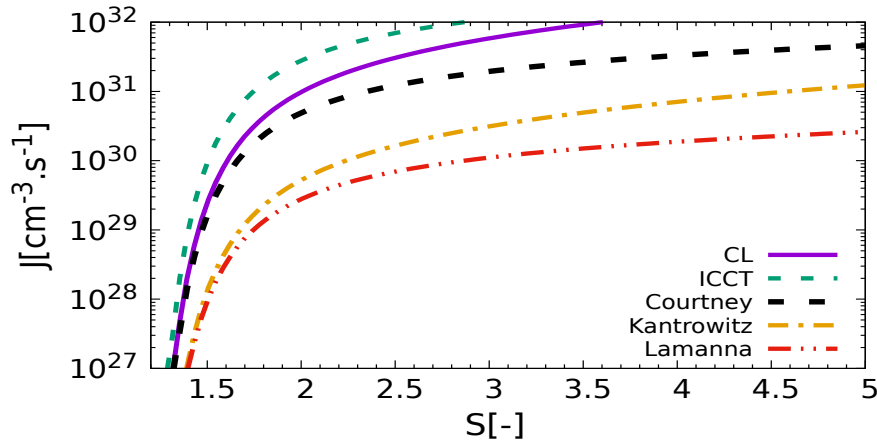


(b)

Figura 4.13: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $CO_2$  à temperatura constante de  $250K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado.



(a)



(b)

Figura 4.14: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $CO_2$  à temperatura constante de  $260K$ . (a) gráfico ampliado e (b) gráfico aproximado.

Com os resultados acima, nota-se, uma semelhança no comportamento qualitativo das curvas. Todavia, os valores de supersaturação são expressivamente inferiores em relação aos da água, para atingir uma mesma taxa de nucleação. Tal fenômeno ocorre pois, a linha de Wilson [149], que indica o início da condensação para cada tipo de bocal, ocorre em baixos valores supersaturações para o  $CO_2$  como observado na literatura [150]. Enquanto que, no caso da água, essa linha encontra-se em elevadas supersaturações.

Nos casos com baixas temperaturas e baixos valores de supersaturação, o modelo modificado internamente consistente desvia de todos os outros, e a correção de Courtney permanece próxima ao modelo clássico e à correção de Lamanna (Figura 4.10 e Figura 4.11). Entretanto, quando o valor da supersaturação aumenta, o modelo clássico se aproxima do modelo modificado internamente consistente, como visto na Figura 4.11(a). Tal comportamento pode ser justificado pela menor in-

fluência da tensão interfacial do  $CO_2$  em relação ao comportamento observado na  $H_2O$ . Em temperaturas mais elevadas, a correção de Lamanna aumenta o desvio em relação às outras teorias (Figura 4.14(b)), enquanto que, as correções não-isotérmica, de Courtney e o modelo modificado internamente consistente se aproximam com o aumento da supersaturação, como mostra a Figura 4.14(a).

Para a segunda análise, o comportamento também qualitativamente semelhante e pode ser observado na Figura 4.15. Contudo, o maior desvio, em relação aos outros modelos, é observado para a correção de Lamanna, mesmo com baixos valores de supersaturação.

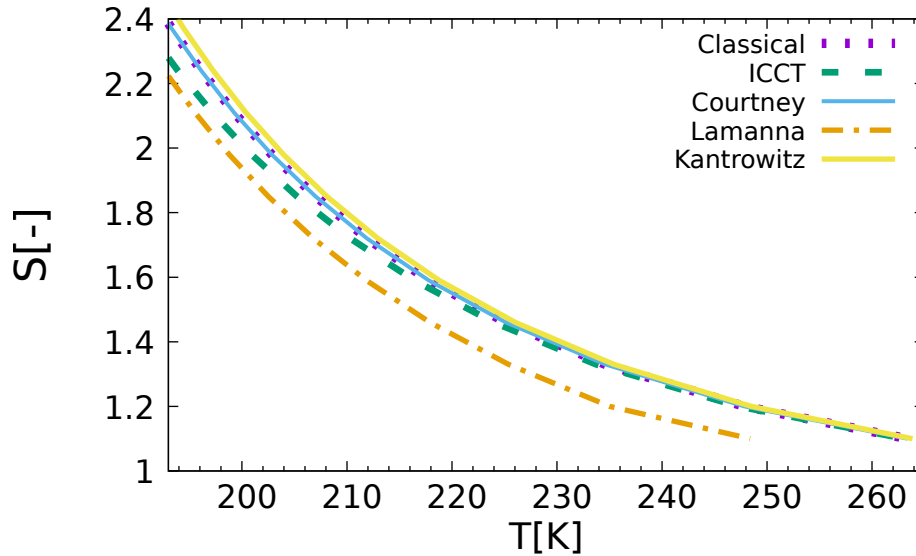


Figura 4.15: Comparação entre os modelos da taxa de nucleação para  $CO_2$  à taxa de nucleação constante de  $J = 10000cm^{-3}.s^{-1}$ .

### 4.3 Caso teste para água

Nesta seção, são discutidos os resultados obtidos para a simulação do caso teste com água. A alteração no comportamento observado, para os campos de temperatura (Figura 3.5) e pressão (Figura 3.4), é devido ao calor liberado pelo processo de condensação, que tende a desacelerar o escoamento, como observado no perfil do número Mach (Figura 3.6). Esse calor liberado é chamado de subcrítico pois o escoamento permanece supersônico mesmo após o choque de condensação. Além disso, a corrente de entrada do bocal é vapor superaquecido, podendo ser confirmado pelos valores baixos de supersaturação ( $S < 1$ ) ilustrados Figura 4.16. O valor máximo de supersaturação atingido foi acima de 10.0, sendo próximo ao valor encontrado por A. [151].

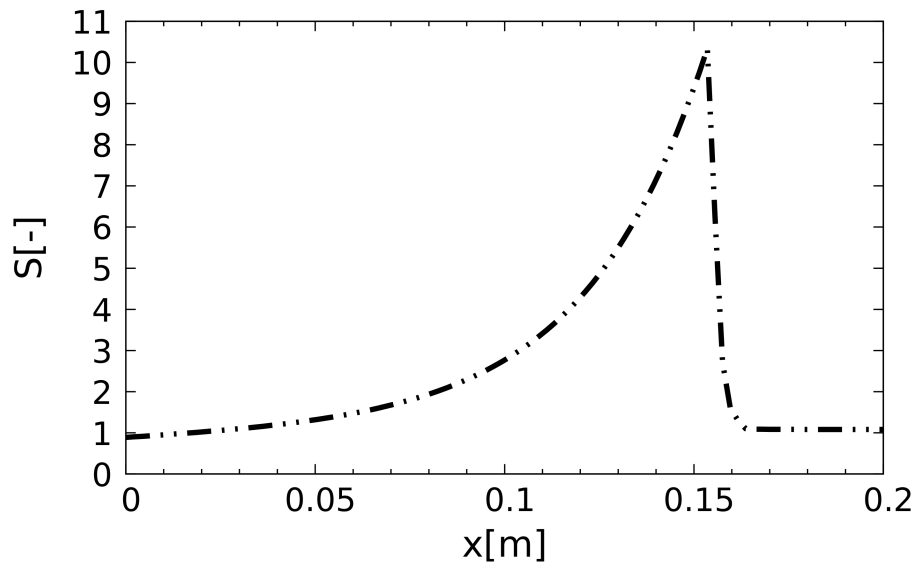


Figura 4.16: Perfil de supersaturação calculado pelo programa *condensationFoam*

Durante a expansão no bocal, o início da transição de fase através da nucleação não ocorre até que a taxa de supersaturação se torne alta suficiente para reduzir o raio crítico  $r_*$ , tornando o sistema energeticamente favorável para a formação dos núcleos de condensação em um vapor supersaturado. Esse comportamento está ilustrado de forma qualitativa na Figura 2.5 apresentada na seção de revisão bibliográfica. Nela, vários graus de supersaturação são representados em um gráfico da energia livre de Gibbs pelo raio de gota. Pode-se observar que conforme o grau de supersaturação aumenta, o valor do raio crítico reduz, e conseqüentemente, a energia livre de Gibbs para alcançá-lo também. Depois disso, o processo de nucleação forma uma quantidade considerável desses aglomerados críticos, como ilustrado no Figura 4.17. A taxa de nucleação máxima encontrada pelo aplicativo foi da ordem de  $10^{23}$ .



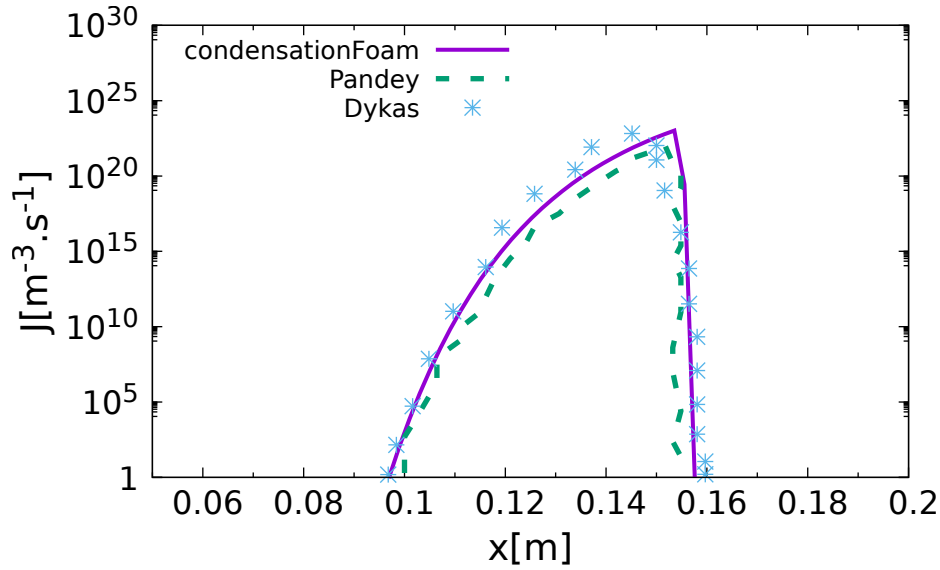


Figura 4.17: Comparação dos perfis da taxa de nucleação calculados pelo programa *condensationFoam*, por Pandey [151] e por Dykas [152]

A taxa de nucleação obtida por Dykas, que possui validação experimental para o choque de condensação na pressão, está mais próxima do valor calculado pelo programa *condensationFoam* proposto neste trabalho, quando comparado com a prevista por A. [151]. Tal fato evidencia que o modelo proposto possui uma capacidade de predição mais acurada para essa variável.

O calor liberado pela condensação tende a diminuir a supersaturação, o super-resfriamento (Figura 4.18), e também a taxa de nucleação. O super-resfriamento alcançou cerca de  $40K$  pelo aplicativo *condensationFoam* e também pelo autor [151]. Como consequência da redução dessas propriedades, não são formados mais aglomerados e o número de gotas permanece constante como visto em Figura 4.19.

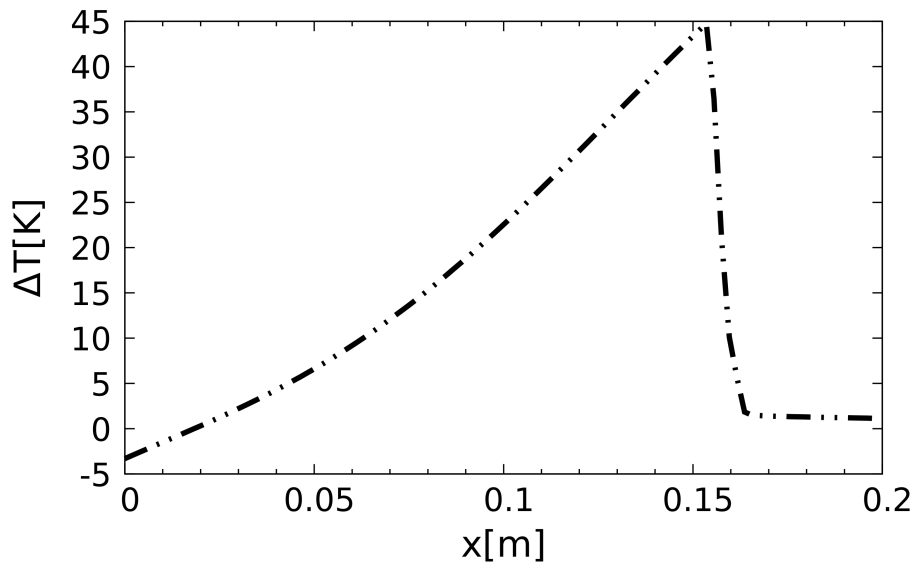


Figura 4.18: Perfil axial de super-resfriamento calculado pelo *condensationFoam*

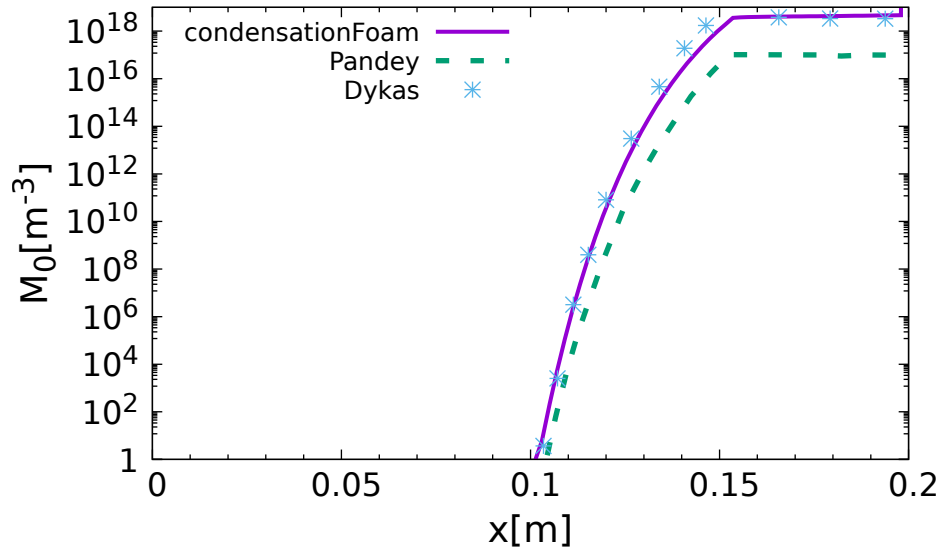


Figura 4.19: Comparação dos perfis do número de gotas calculados pelo programa *condensationFoam*, por Pandey [151] e por Dykas [152]

O número de gotas formados também foi comparado com os dois autores e o valor calculado pelo programa *condensationFoam* também foi mais acurado, aproximando-se de  $10^{19}$ , sendo a mesma ordem de grandeza encontrada por DYKAS e WRÓBLEWSKI [152].

Em seguida, a fração mássica de líquido e o raio médio das gotas continuam a aumentar, como observado nas Figuras 4.20 e 4.21, respectivamente. Esse comportamento é justificado, uma vez que o escoamento entra na região de condensação à medida que a magnitude do termo de crescimento de gotas aumenta como ilustrado na Figura 4.22.

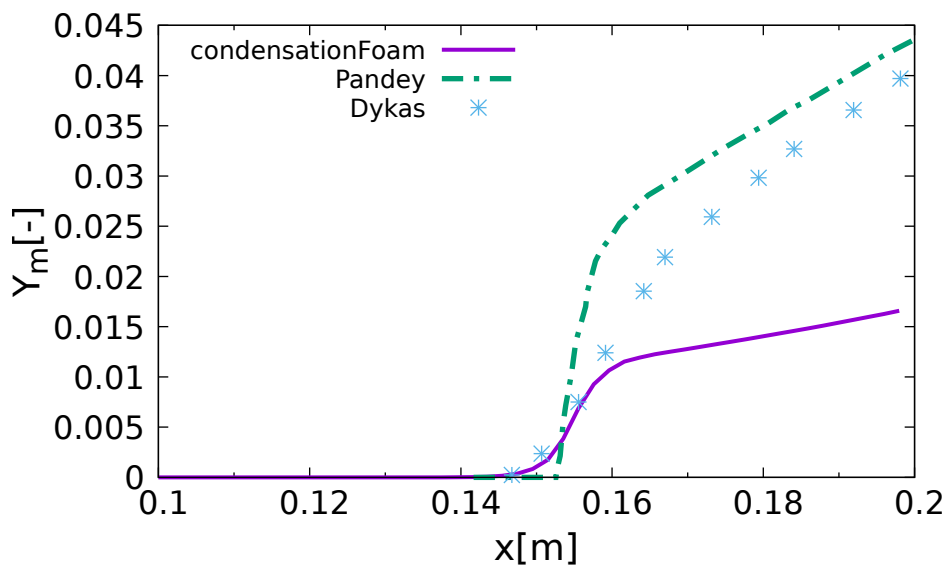


Figura 4.20: Comparação dos perfis da fração mássica de líquido calculados pelo programa *condensationFoam*, por Pandey [151] e por Dykas [152]

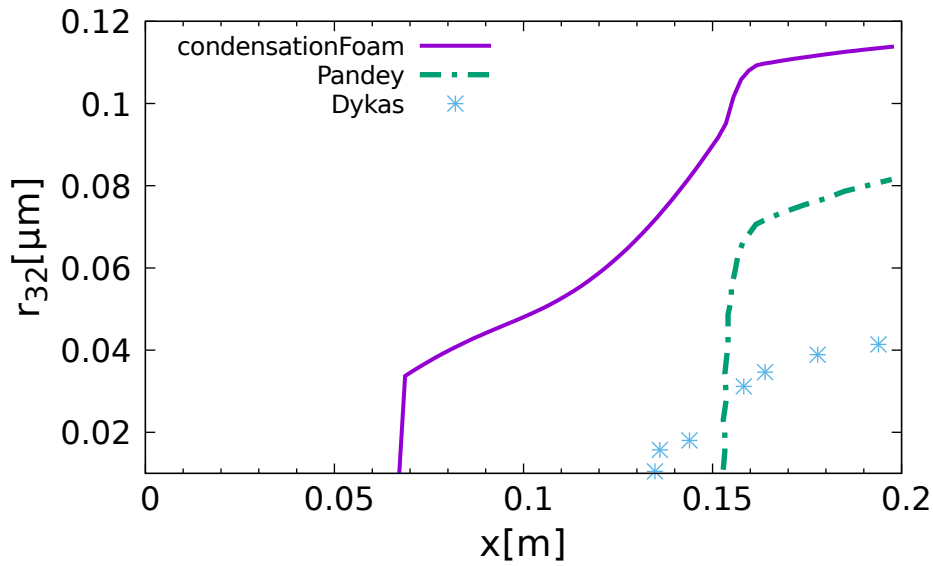


Figura 4.21: Comparação dos perfis do raio médio calculados pelo programa *condensationFoam*, por Pandey [151] e por Dykas [152]

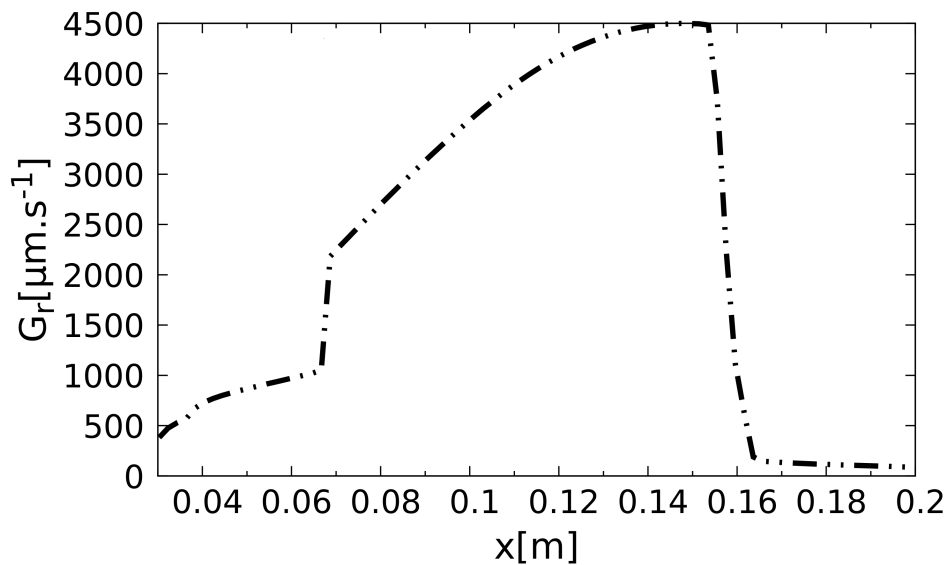


Figura 4.22: Perfil do termo de crescimento de gota para água

Em seguida, estes resultados também foram comparados com a literatura [151, 152] e o raio médio, não só é superestimado em relação aos valores encontrados pelos autores, mas também, surge antes do esperado. Entretanto seu perfil qualitativa está assim próximo do de DYKAS e WRÓBLEWSKI [152] em relação a simulação do outro autor. Ele atinge um máximo de  $0.11\mu m$ , enquanto que, A. [151] encontra  $0.08\mu m$ , e DYKAS e WRÓBLEWSKI [152] em torno de  $0.04\mu m$ . Esses valores também foram comparados com o valor experimental do raio encontrado por Barschdorff, que mede cerca de  $0.066\mu m$ . Uma das possíveis causas para o comportamento superestimado pela simulação do *condensatioFoam*, em relação à todos os

autores, é a introdução de uma semente para iniciar o algoritmo de Chebyshev no início da simulação, pois, o crescimento do raio só pode ocorrer antes da nucleação, caso existam aglomerados antes dela, ou seja, provavelmente a semente usada para inicializar o algoritmo de inversão dos momentos atuou como um núcleo de condensação antes da nucleação. Ademais, a fração mássica de líquido é significativa somente após o valor máximo da taxa de nucleação ser atingido e a temperatura do vapor atingir o equilíbrio, e não diminui mesmo após o choque de condensação, evidenciando a irreversibilidade do processo. A fração mássica quando comparada com os outros autores foi subestimada isso pode estar relacionado com a escolha do modelo de crescimento de gotas, que naturalmente, possui sua magnitude subestimada em comparação com os dados experimentais.

O valor do crescimento de gotas também foi superestimado quando comparado com a literatura [31]. Os valores encontrados para o bocal de MOSES e STEIN [153] são inferiores à  $1000\mu m.s^{-1}$ . Provavelmente, esse comportamento superestimado pode ser devido à mesma razão anterior.

A distribuição de partículas ao longo do bocal é observada na Figura 4.23, cuja maioria das partículas possui um raio médio de  $0.1\mu m$

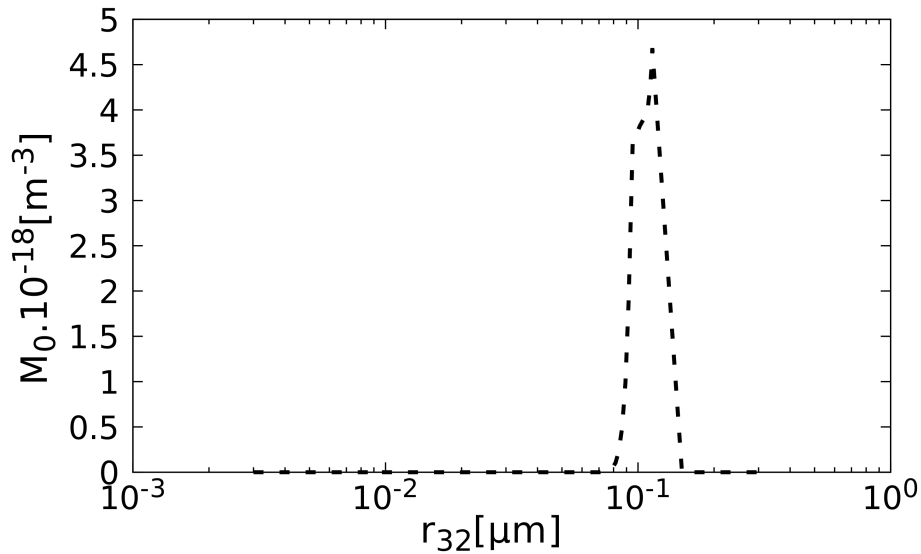


Figura 4.23: Comportamento da distribuição de gotas.

Face ao exposto, alguns comportamentos avaliados acima podem ser observados, de forma conjunta, nas Figuras 4.24 e 4.25, onde, a primeira ilustra o comportamento da fase contínua ao longo do bocal, através da temperatura, pressão, número de Mach e supersaturação. A segunda evidencia o comportamento da fase dispersa ao longo do bocal usando variáveis como raio médio, fração mássica, taxa de nucleação e número total de partículas.

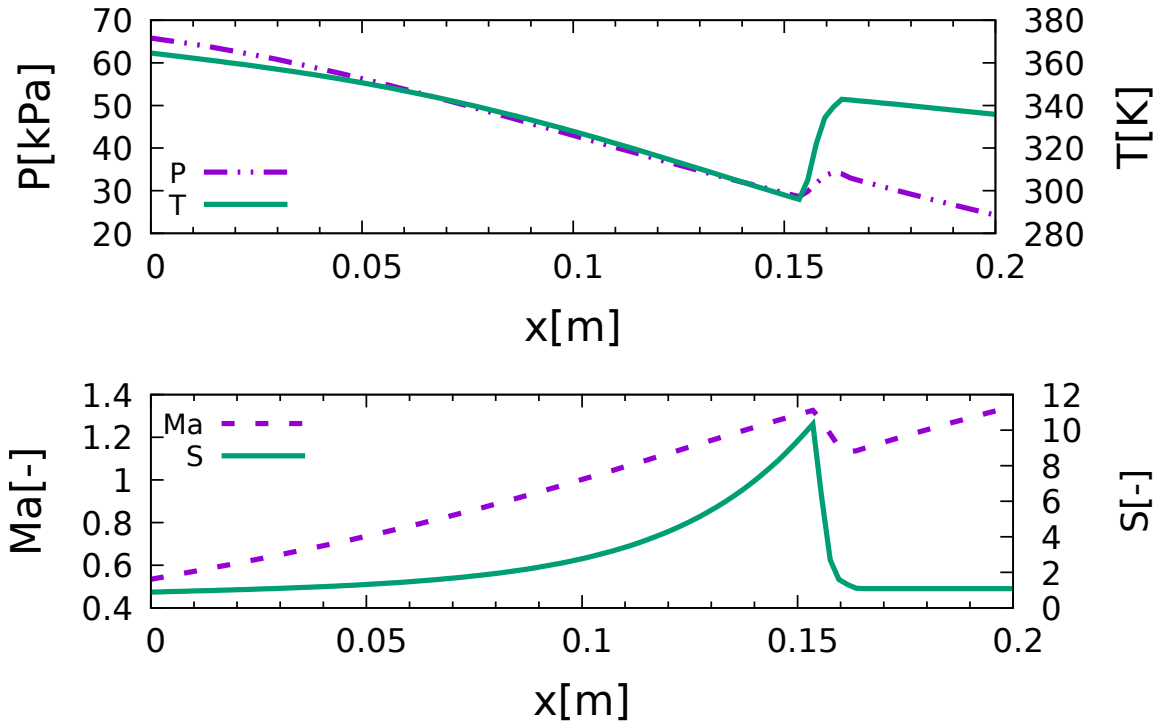


Figura 4.24: Comportamento das variáveis da fase contínua ao longo do bocal.

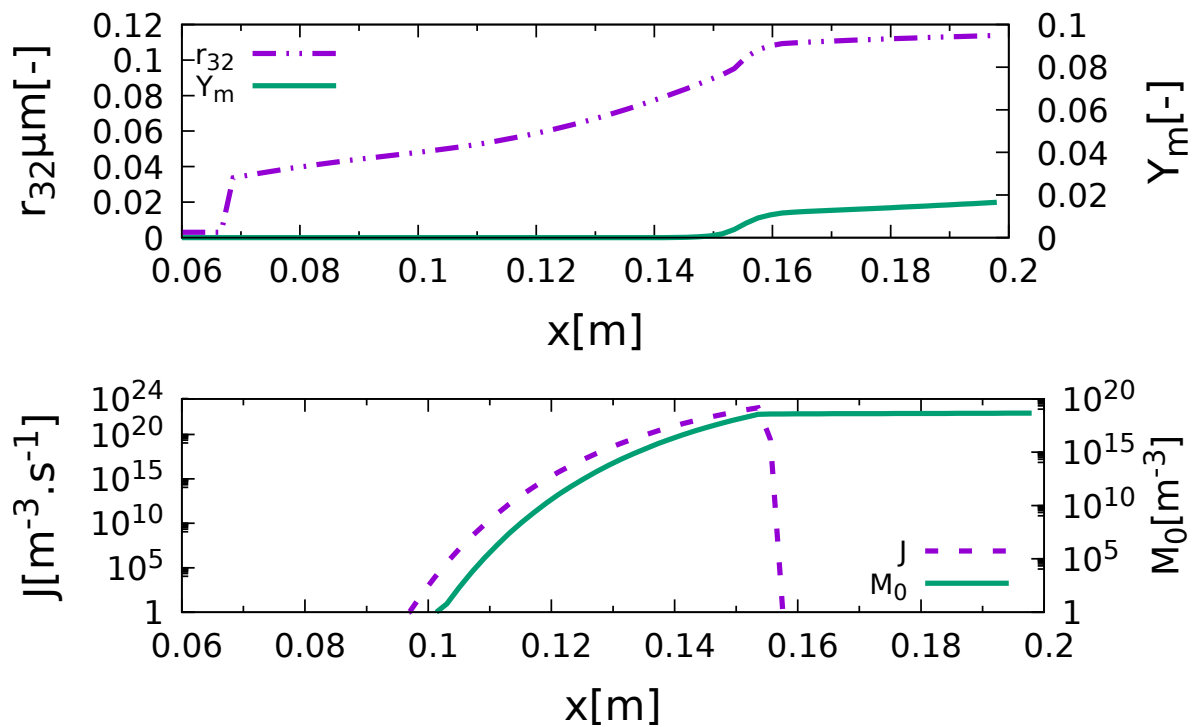


Figura 4.25: Comportamento das variáveis da fase dispersa ao longo do bocal.

No caso da fase contínua o choque de condensação ocorre aproximadamente na posição de  $0.15\text{m}$  elevando a magnitude das propriedades como temperatura e

pressão, enquanto reduz os valores de supersaturação e o número de Mach Figura 4.24. Em seguida, na Figura 4.25 é possível observar que a mudança nas variáveis como fração mássica (surgimento) e raio médio (aumento na magnitude pela segunda vez) ocorre exatamente após esse choque (parte superior da figura), que provoca a queda na taxa de nucleação e estabiliza o número de gotas (parte inferior da figura). Nota-se também que a taxa de nucleação começa a aumentar logo depois que a supersaturação ultrapassa o valor de 1.0. Em resumo, essas duas figuras ilustram que o fenômenos ocorrem na ordem cronológica e sincronismo esperados para a condensação dentro de um bocal convergente-divergente.

Também foram calculados as quantidades de calor e massa que a fase dispersa libera para a fase contínua, por unidade de volume, por unidade de tempo, e ilustradas na Figura 4.26.

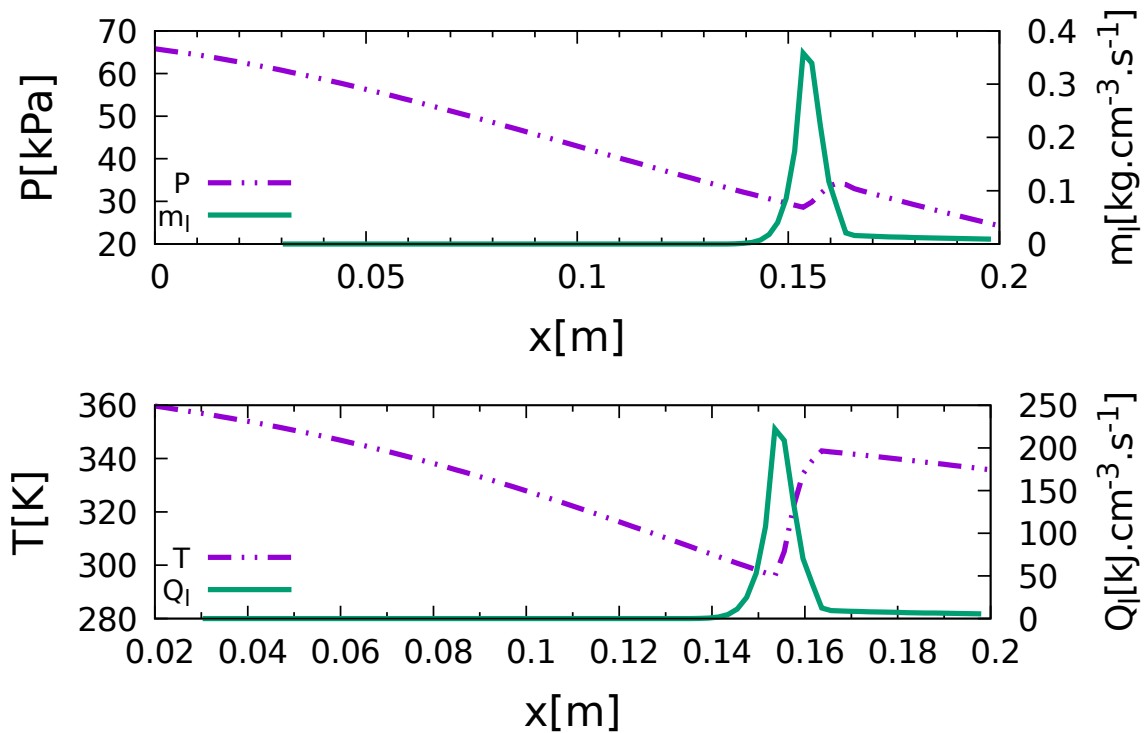


Figura 4.26: Comportamento dos fluxos de massa(superior) e calor (inferior) ao longo do bocal.

Como pode ser inferido, os fluxos de calor e massa são os responsáveis pelo choque da condensação, pois, à medida que aumenta sua magnitude, as propriedades do escoamento são modificadas, já que eles são termos fonte para as equações de transporte da fase contínua. O fluxo de massa atinge o valor máximo de  $0.339\text{kg}\cdot\text{cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ , e o de calor o valor  $222.16\text{kJ}\cdot\text{cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ . As propriedades como pressão e temperatura aumentam, enquanto o número de Mach diminui. Dito isso, faz-se necessário o acoplamento entre as fases para que, não só seja observado o choque de condensação, mas também, devido à relevância associada à magnitude dos fluxos entre as fases.

Outro ponto significativo desse choque está associado à maioria das validações na literatura, visto que, são baseadas em sua identificação no campo de pressão.

Resumidamente, o aplicativo *condensationFoam* implementado é capaz de prever o comportamento qualitativo do raio de médio e da fração mássica de líquido. Entretanto, é necessário encontrar uma forma de evitar o uso de uma semente para inicializar o algoritmo, visto que, ela pode interferir nos resultados dessas variáveis da fase dispersa. Ele também é capaz de obter os valores da taxa de nucleação e do número total de gotas com uma acurácia satisfatória. Por último, consegue representar o fenômeno completo da condensação, incluindo magnitude e localização da liberação de calor e massa provenientes fase dispersa.

## 4.4 Caso teste para dióxido de carbono

Na seção subsequente, serão discutidos os resultados referentes ao escoamento no bocal do Arina, com dióxido de carbono puro, para diferentes condições operacionais de entrada.

### 4.4.1 Características do escoamento da fase contínua

Dentre as principais variáveis da fase contínua, responsáveis pela condensação, estão a temperatura e pressão, cujos perfis são ilustrados nas Figuras 4.27 e 4.28 respectivamente.

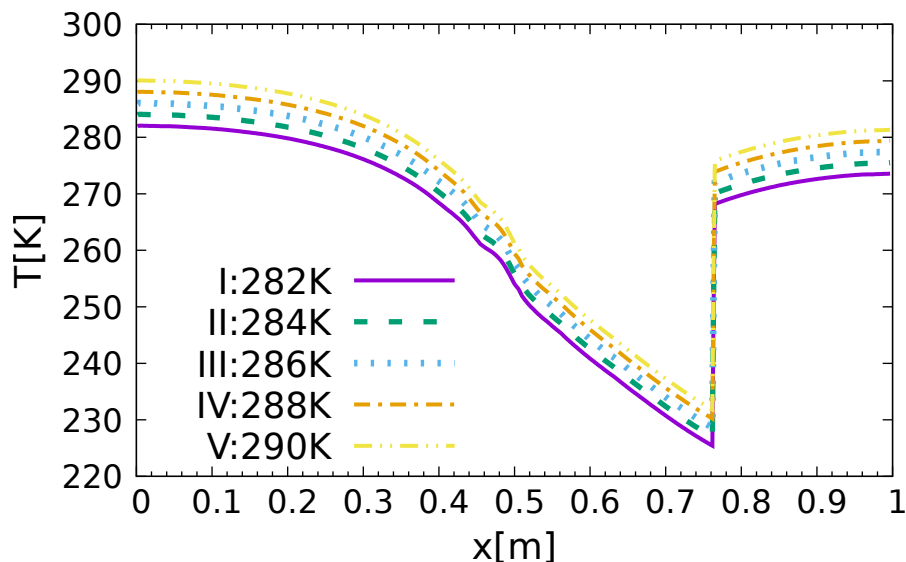


Figura 4.27: Perfis de temperatura ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão contante de 4.0 MPa.

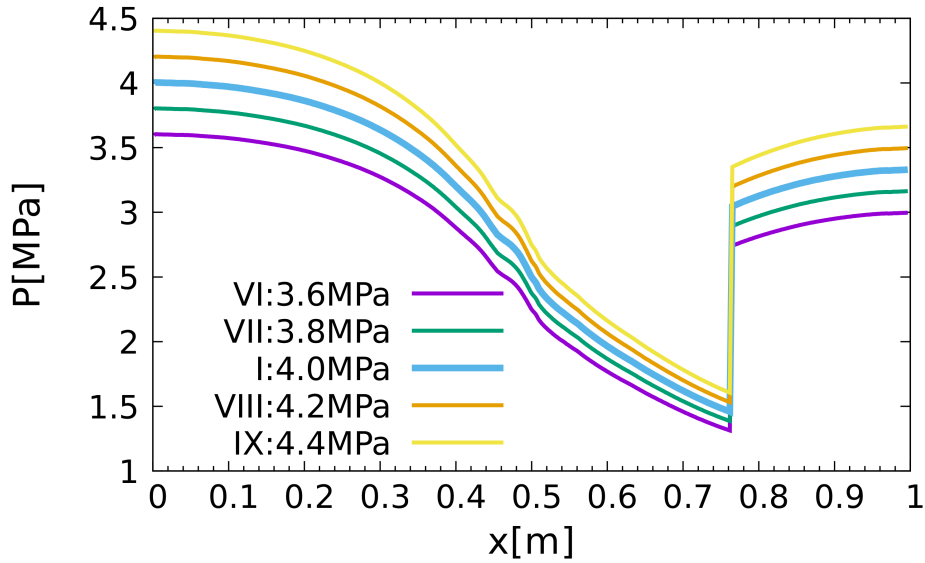


Figura 4.28: Perfis de pressão ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de  $282K$ .

À medida que o escoamento acelera alcançando a condição sônica ( $Ma = 1$ ) na garganta e, na seção divergente, alcança a condição de escoamento supersônico ( $Ma > 1$ ), como mostrado na Figura 4.29. Isso acarreta na redução drástica da temperatura depois da expansão, que alcança o valor mínimo de  $225.43K$  na simulação IX como observado na Figura 4.27. Este fenômeno, atuando junto com a queda da pressão, que atinge o menor valor na simulação VI de  $1.31MPa$  (Figura 4.28), são os principais fatores responsáveis pela condensação no equipamento de separação.

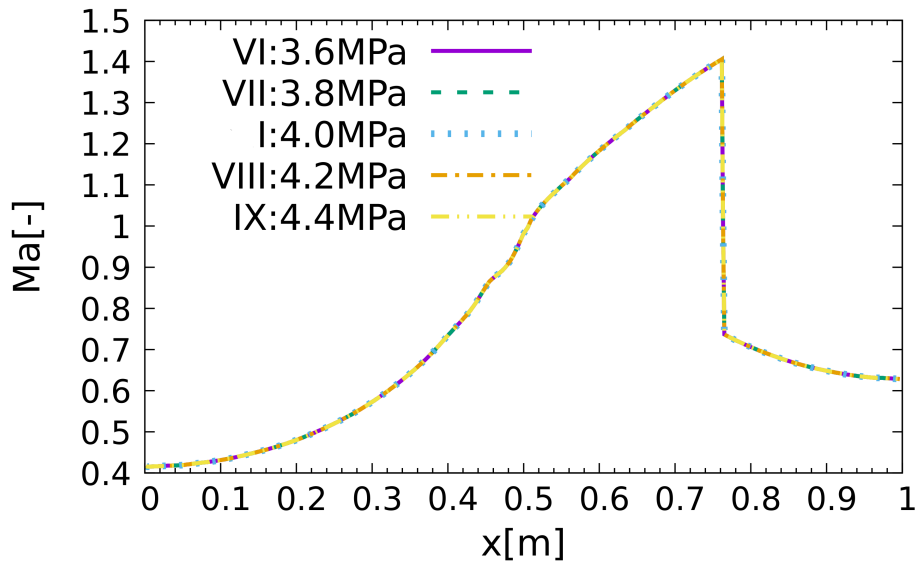


Figura 4.29: Perfis do número de Mach ao longo do bocal.



#### 4.4.1.1 Super-resfriamento

O vapor superaquecido entrará em um estado de super-resfriamento, junto com a rápida expansão, como ilustrado nas Figuras 4.30 e 4.31. Na ausência de partículas, a transição de fase é precedida pela nucleação homogênea. Com isso, é necessário um nível adequado de super-resfriamento ( $\Delta T$ ) para que a nucleação ocorra. O grau máximo de super-resfriamento atinge um valor superior à  $10K$ , o que indica um estado de equilíbrio metaestável da fase de vapor. Este valor é próximo ao observado no trabalho de SUN *et al.* [28] com cerca de  $11K$  para a condição de entrada de  $4.0MPa$  e  $283.15K$  de pressão e temperatura respectivamente. Como o programa implementado não possui ainda o acoplamento entre as fases, o choque de condensação não ocorre. Logo, é a onda de choque dentro do equipamento que levará ao declínio do grau de super-resfriamento à medida que a temperatura e a pressão aumentam.

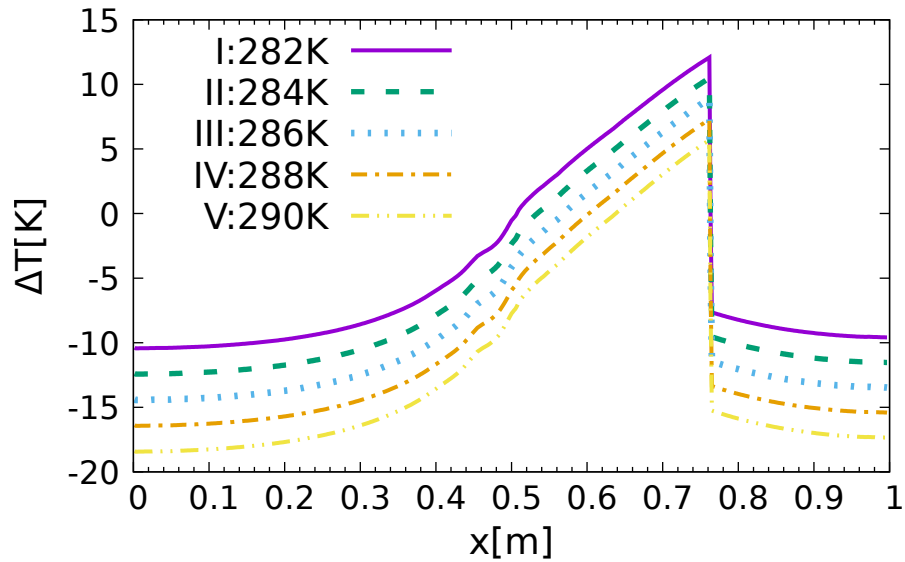


Figura 4.30: Perfis de super-resfriamento ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de  $4.0MPa$ .

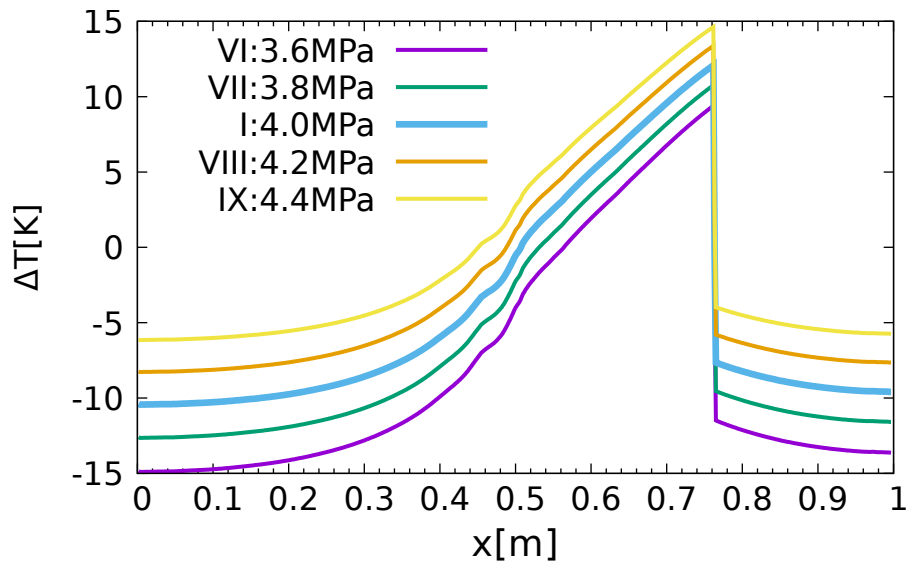


Figura 4.31: Perfis de super-resfriamento ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de  $282K$ .

Portanto, os casos com maior pressão e temperatura mais baixa na entrada atingiram um grau de super-resfriamento superior à  $10K$ , como na simulação IX. No entanto, a condição oposta alcança apenas cerca de  $5K$  como visto nas figuras acima. Além disso, quando a temperatura de entrada é menor ou a pressão de entrada é maior, a condição de super-resfriamento é atingida mais próxima da garganta do bocal. Como consequência, o processo de nucleação ocorre mais cedo nessas condições. Uma ilustração do campo dentro do bocal que atinge o maior valor de super-resfriamento pode ser observado na Figura 4.32.

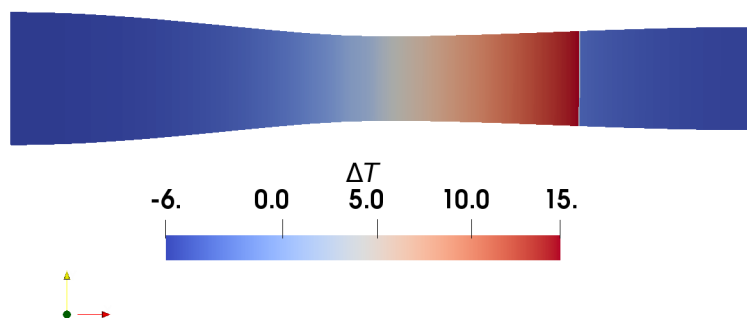


Figura 4.32: Perfil de super-resfriamento ao longo do bocal da simulação IX

#### 4.4.1.2 Supersaturação

Quando o fluido sofre expansão através de um bocal supersônico, devido ao resfriamento rápido, a fase de vapor se afasta das distribuições de fase no equilíbrio. Logo, ela não irá condensar logo após ultrapassar a linha de saturação, atingindo um elevado grau de supersaturação, principal evidência de um estado de equilíbrio

metaestável. Portanto, uma condição importante para promover a nucleação está relacionada a um alto grau de supersaturação, que é alcançado pelo aumento do grau de super-resfriamento, e esta relação está representada pela Equação 2.89 na revisão bibliográfica. O comportamento da supersaturação em relação às mudanças nas condições de entrada pode ser visto em Figura 4.33 e Figura 4.34.

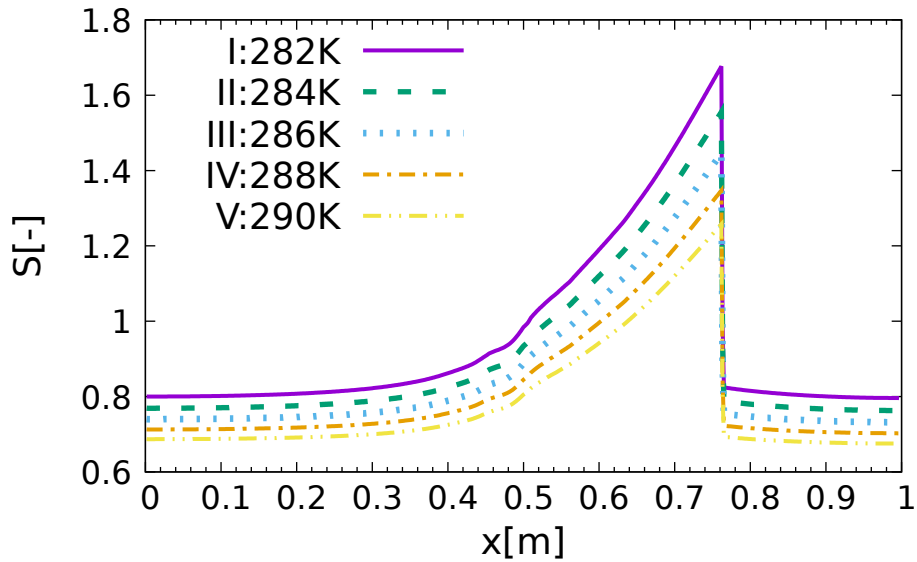


Figura 4.33: Perfis de supersaturação ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa.

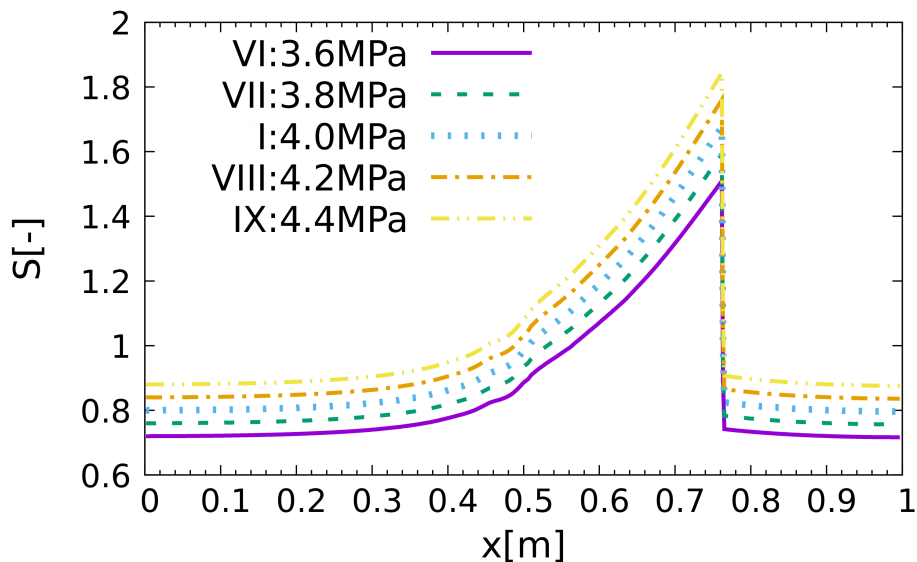


Figura 4.34: Perfis de supersaturação ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K.

As curvas com os valores de temperatura mais altos, combinados com os valores de pressão mais baixos na entrada, atingem os níveis mais baixos de supersaturação dentro do bocal. Assim, nessas condições, não só a taxa de nucleação é menor, mas

também ocorre mais distante da garganta. Isso implica na redução de número de núcleos de condensação formados, afetando diretamente a eficiência da condensação e, conseqüentemente, do processo de separação. A supersaturação mais alta alcançada no bocal foi de 1.8 na simulação IX, enquanto que a mais baixa atinge 1.26 na simulação V. Percebe-se que a supersaturação de  $CO_2$  atingida em bocais supersônicos é muito inferior quando comparada com a água, corroborando com resultados reportados na literatura [150]. O perfil, que atinge o maior valor de supersaturação dentro do bocal, pode ser visto na Figura 4.35.

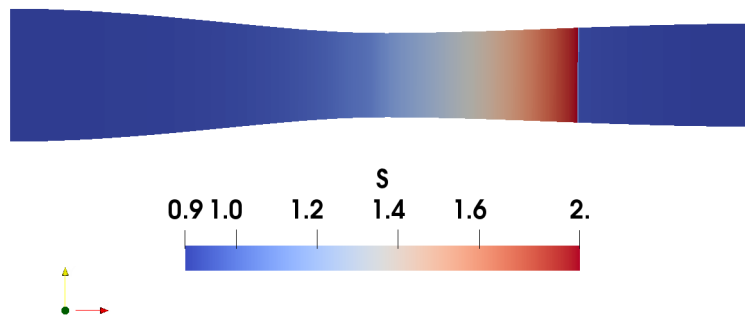


Figura 4.35: Perfil de supersaturação ao longo do bocal da simulação IX

## 4.4.2 Características do escoamento da fase dispersa

Por fim, as variáveis do escoamento disperso para os testes com  $CO_2$  estão explicitadas no tópico seguinte.

### 4.4.2.1 Raio crítico

No caso dos raios críticos, o comportamento observado para a pressão constante na Figura 4.36 é condizente com a equação Equação 2.47, que expressa a dependência do raio crítico como diretamente proporcional à temperatura do gás através da tensão interfacial (função da temperatura).

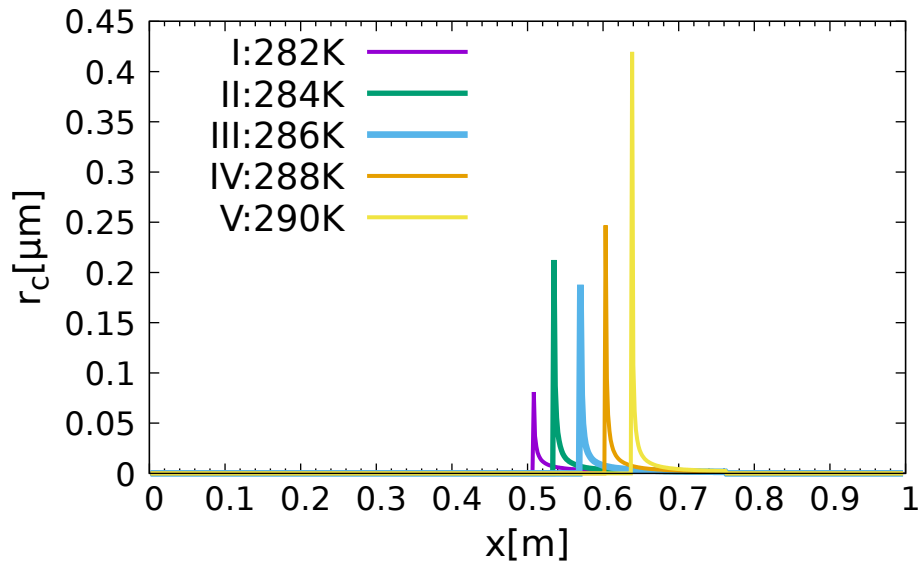


Figura 4.36: Perfis dos raios críticos ao longo do bocal à pressão constante de 4.0MPa

Para as análises com temperatura constante, como a pressão atua diretamente na supersaturação, sua dependência com essa variável é não linear, através do logaritmo neperiano. Com isso, o menor raio crítico é observado com a pressão de 4.0MPa enquanto o maior com pressão de 3.8MPa. Isso denota que, existe a necessidade de mais energia para atingir o maior tamanho de raio crítico, acarretando na formação de menos aglomerados com esse tamanho inicial, em condições de baixa pressão e elevada temperatura na entrada.

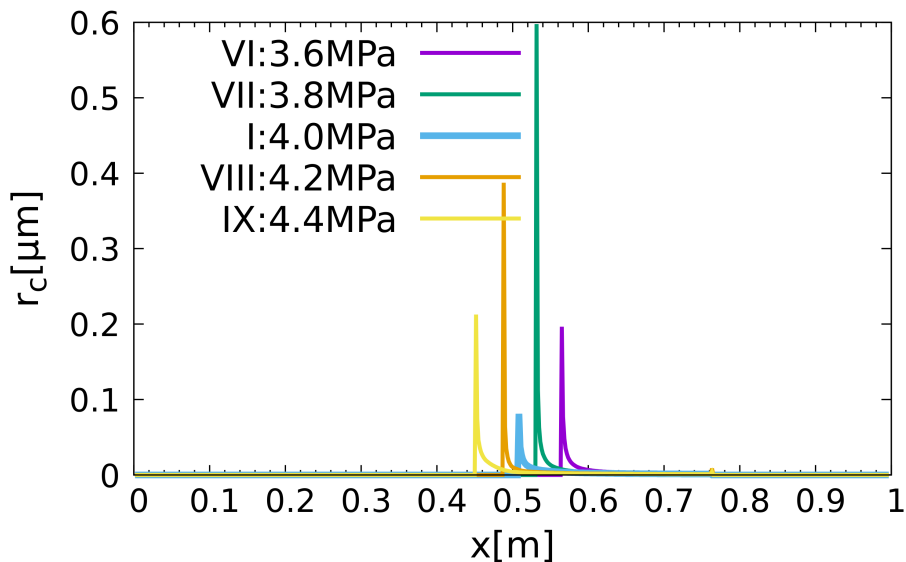


Figura 4.37: Perfis dos raios críticos ao longo do bocal à temperatura constante de 282K

#### 4.4.2.2 Taxa de nucleação

O comportamento da taxa de nucleação dentro do bocal com diferentes condições de entrada é representado nas Figuras 4.38 e 4.39.

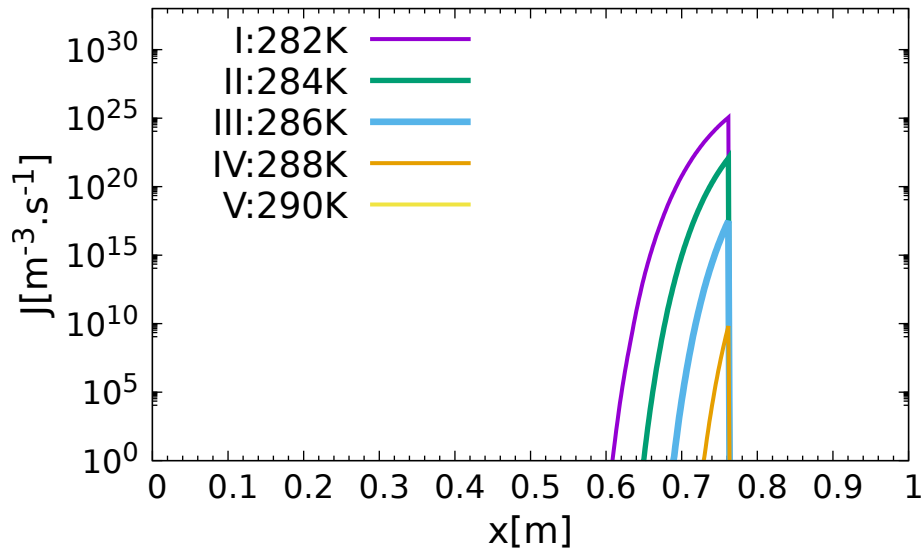


Figura 4.38: Perfis das taxas de nucleação ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa.

Percebe-se que a taxa de nucleação sofre maior influência da variação na pressão de entrada quando comparada com a variação da temperatura. Isso, provavelmente, indica uma correlação mais forte dessa variável com pressão quando comparada à temperatura.

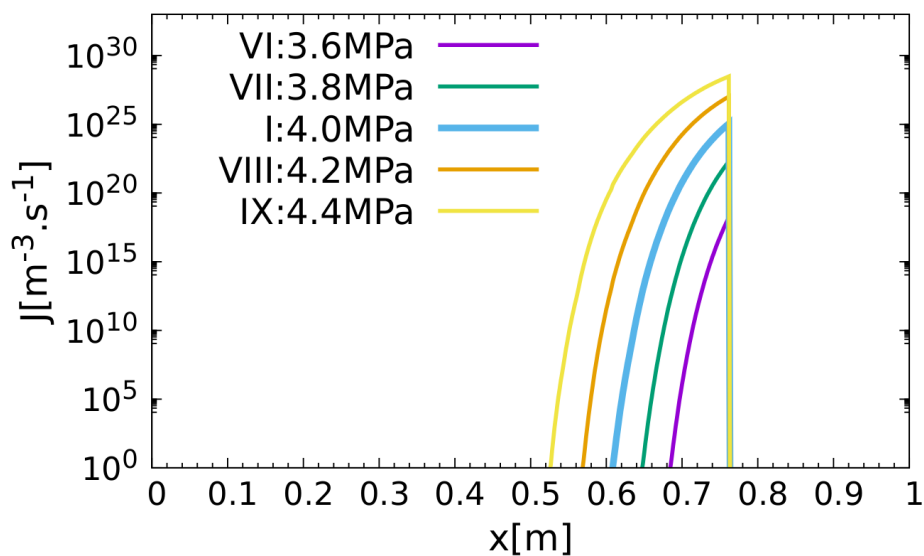


Figura 4.39: Perfis das taxas de nucleação ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K.

As curvas com a maior temperatura e com a menor pressão apresentaram as taxas de nucleação mais baixas e mais distantes da garganta. Esse fenômeno está relacionado ao grau de supersaturação do escoamento principal, que é menor. Como consequência, o número de gotículas formadas é menor na condição acima mencionada. Ademais, na condição de entrada da simulação V a nucleação não ocorreu, provavelmente pelo grau de super-resfriamento insuficiente, com cerca de  $5K$ . A localização da maior taxa de nucleação dentro do bocal pode ser aferida na Figura 4.40.

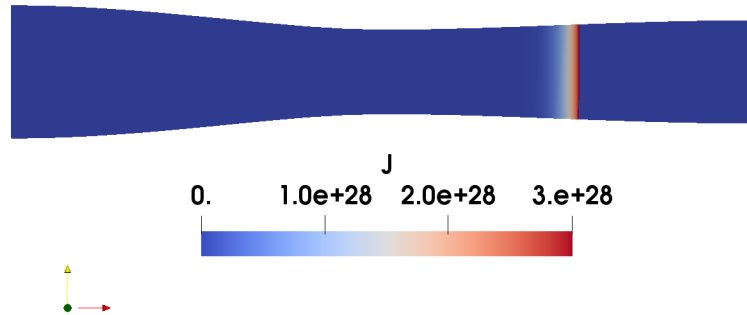


Figura 4.40: Perfil da taxa de nucleação ao longo do bocal da simulação IX

#### 4.4.2.3 Número total de partículas

As condições do escoamento não afetam apenas o número total de gotas por unidade de volume, mas também o raio das gotas. Nas Figuras 4.41 e 4.42 verifica-se o perfil do número de gotas no bocal. Durante a expansão do gás, as moléculas de vapor colidem umas com as outras e coalescem produzindo continuamente o núcleo crítico. Sob esta circunstância, um grande número de gotas aparecerá, quando o núcleo de condensação atingir o raio crítico. Depois disso, o crescimento das gotas liberará uma grande quantidade de calor latente para a fase de vapor, diminuindo o grau de super-resfriamento e o estado de equilíbrio será atingido. Nesse instante, o número de gotas permanece estável. Entretanto, como o aplicativo foi implementado sem acoplamento da fase dispersa com a fase contínua, a quantidade de calor e massa liberados não afetam a fase contínua. Por conseguinte, o fator responsável pela estabilização do número de gotas é a onda de choque, pois, faz com que as propriedades do escoamento mudem de direção bruscamente. Vale ressaltar que, como na simulação V não ocorreu a nucleação, por conseguinte, não houve a formação de partículas nela, como evidenciado na Figura 4.41.

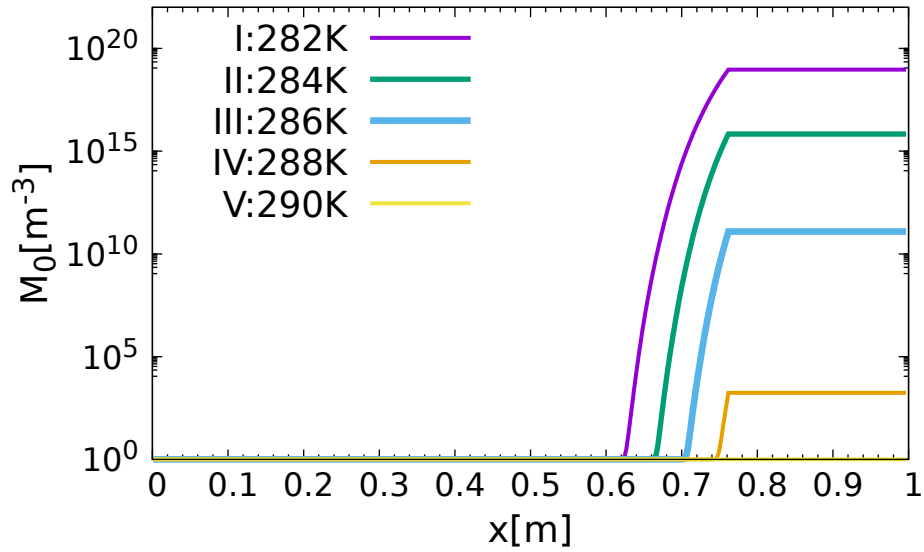


Figura 4.41: Perfis do número de gotas ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa.

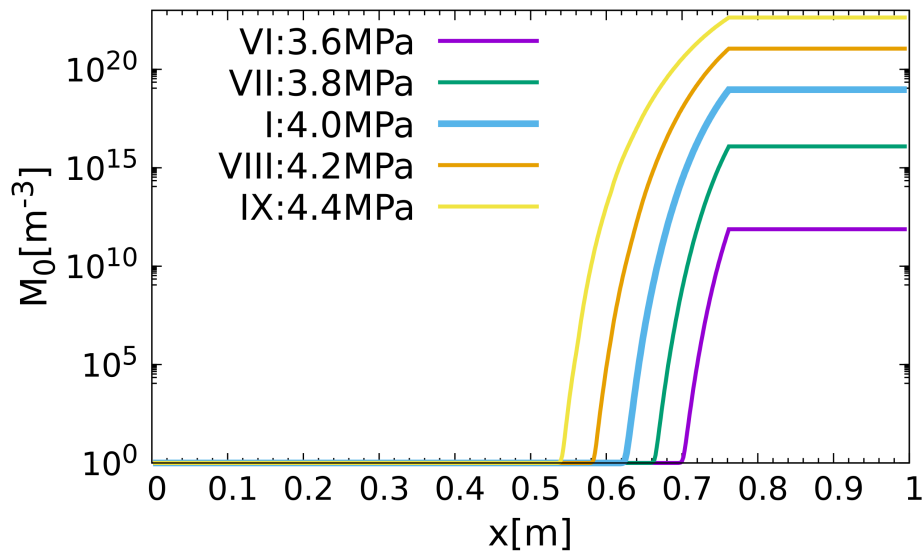


Figura 4.42: Perfis do número de gotas ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K.

Uma ilustração do comportamento da simulação IX que atinge o maior número de partículas pode ser observado na Figura 4.43, com cerca de  $4,28 \cdot 10^{22}$  partículas por volume.



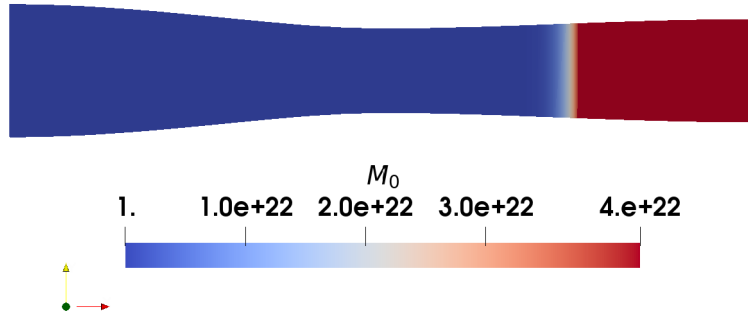


Figura 4.43: Perfil do número de gotas ao longo do bocal da simulação IX.

#### 4.4.2.4 Raio médio das partículas

Constate-se que, com o aumento da pressão ou diminuição da temperatura de entrada, o raio médio de Sauter das gotas ( $r_{32} = \frac{\mu_3}{\mu_2}$ ) aumenta, conforme mostrado nas Figuras 4.44 e 4.45. Estes resultados estão qualitativamente consoantes com BIAN *et al.* [64], além de apresentar a mesma ordem de magnitude, de  $10^{-7}$  m, encontrada pelo autor de  $3.90 \times 10^{-7}$  com condições de entrada de 6.0MPa e 273.15K para pressão e temperatura, respectivamente.

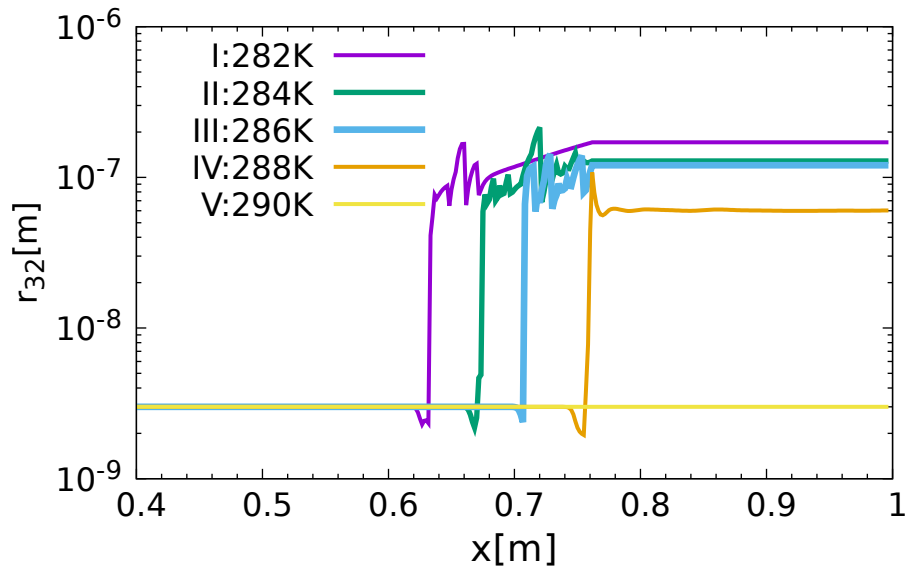


Figura 4.44: Perfis dos raios médios ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa

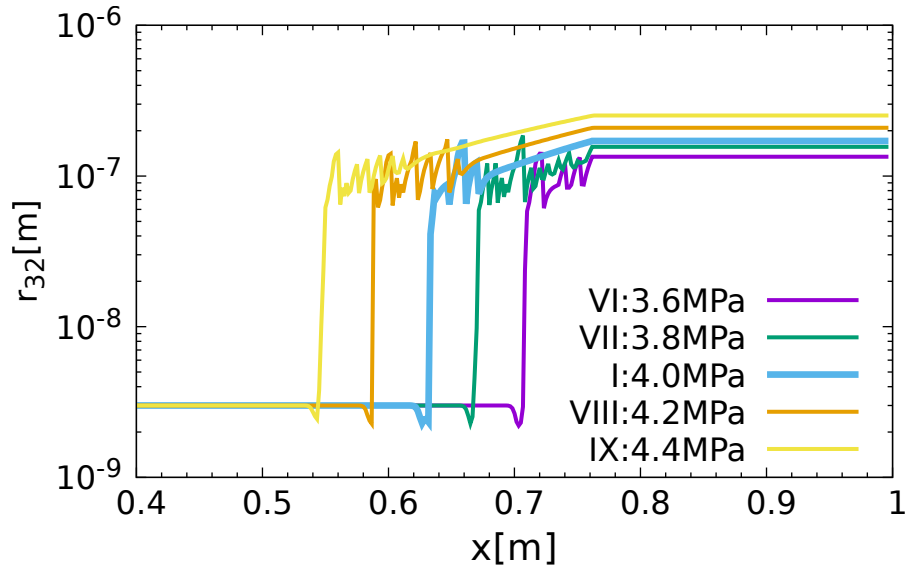


Figura 4.45: Perfis dos raios médios ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de  $282K$

As oscilações observadas no raio médio podem estar relacionadas à onda de pressão, devido ao seu aumento com a alteração da pressão de entrada. Todavia, não estão associadas à onda de choque, já que ocorrem antes dela. Também pode ser considerado algo associado à geometria, visto que elas ocorrem depois da garganta, e essa possibilidade já foi reportada na literatura [37]. Pois, dependendo do tamanho da garganta, podem ocorrer pequenas ondas de compressão, influenciando o processo de condensação na linha central. Logo, esse comportamento oscilatório deve ser investigado de forma mais detalhada futuramente. A Figura 4.46 abaixo ilustra o perfil do maior raio médio encontrado.

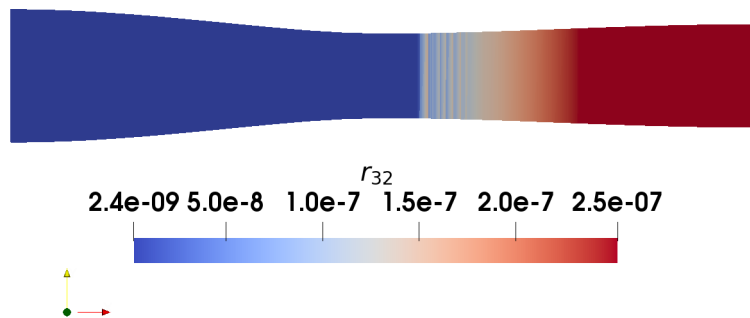


Figura 4.46: Perfil do raio médio ao longo do bocal da simulação IX

#### 4.4.2.5 Fração mássica de líquido

Outra variável observada foi a fração mássica de líquido para diferentes temperaturas de entrada, expressa na Figura 4.47, para a pressão constante de  $4.0MPa$ .

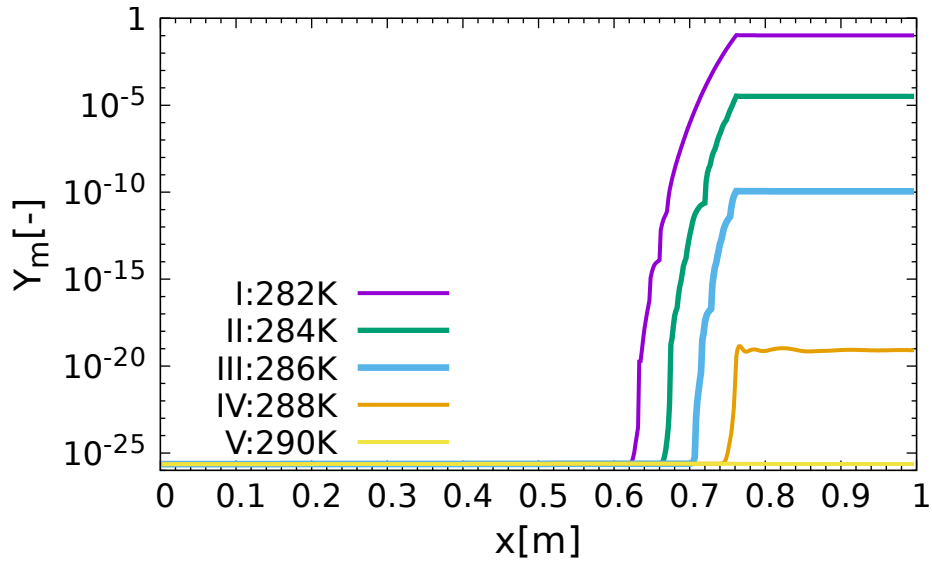


Figura 4.47: Perfis da fração mássica de líquido ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa

Baseado na figura acima, verifica-se um o comportamento semelhante às outras variáveis, cuja menor temperatura de entrada proporcionou uma fração mássica de líquido maior. Essa característica é evidenciada na Figura 4.47. Conforme a redução da temperatura, essa fração torna-se quase desprezível, visto que seu valor máximo em 286K é da ordem de  $10^{-10}$ . No caso das simulações correspondentes à fração mássica de líquido à temperatura constante, conforme a pressão aumenta, o aplicativo gera valores não físicos para a fração mássica. Esses valores só entram em uma faixa fisicamente consistente, com pressões abaixo de 4.0MPa. Tal inconsistência física, pode estar relacionada com o método de discretização *Upwind* para os termos advectivos nas equações dos momentos, originando uma difusão numérica com o aumento repentino da pressão, na região da onda de choque. Outra possibilidade está associada à interferência dessa onda na aproximação do termo de crescimento de gota, posto que essa variável também é superestimada, como mostram as figuras 4.48 e 4.49.

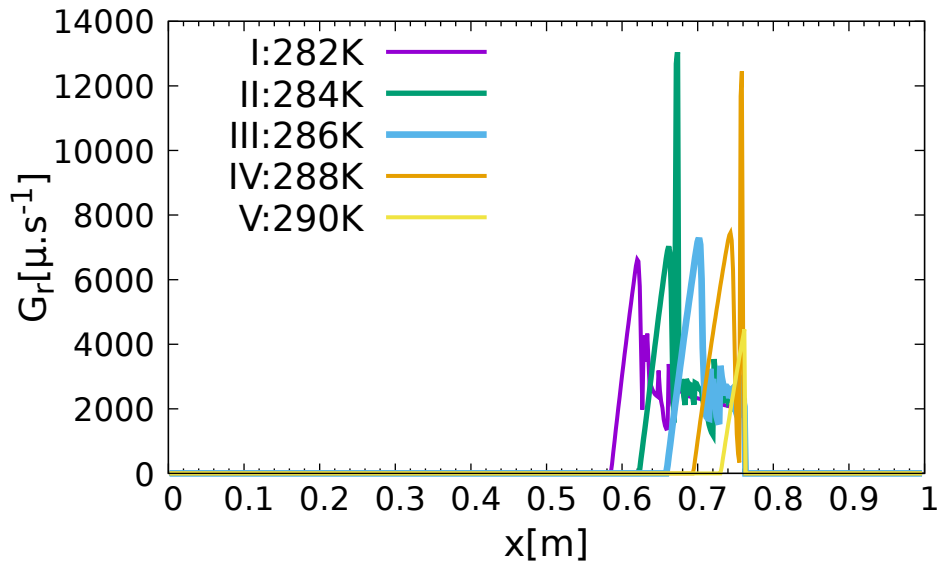


Figura 4.48: Perfis do crescimento de gota ao longo do bocal, para diferentes temperaturas de entrada e à pressão constante de 4.0MPa

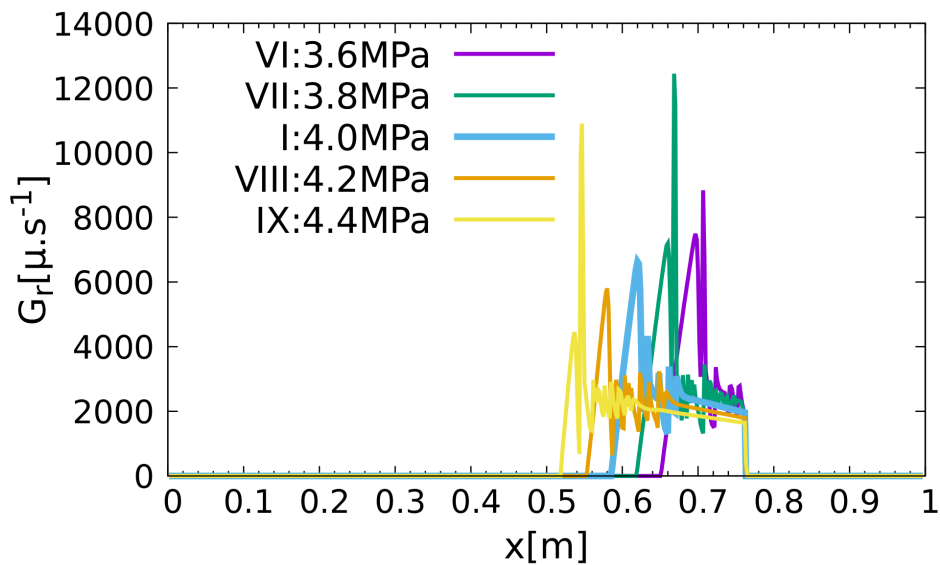


Figura 4.49: Perfis do crescimento de gota ao longo do bocal, para diferentes pressões de entrada e à temperatura constante de 282K

Entretanto, as oscilações ocorrem no mesmo ponto das observadas no raio médio, destacando a necessidade dessa investigação. Como não existem dados na literatura sobre o crescimento de gota para  $CO_2$ , nada pode ser afirmado no que tange a magnitude desse termo. Uma alternativa para melhorar as oscilações, e a inconsistência física, é a implementação do cálculo dos fluxos numéricos dos momentos, dentro da metodologia de Roe-Pike presente no aplicativo original *dbnsFoam*. Posto que, os fluxos numéricos, para a solução de equações hiperbólicas, através de métodos conservativos, são mais robustos. Ademais, eles também resolvem os

campos característicos intermediários com elevada precisão [154]. Por fim, foram calculados a massa e o calor de condensação, que atingiram os valores máximos de  $1511.03kg.cm^{-3}.s^{-1}$  e  $54938.7kJ.cm^{-3}.s^{-1}$  respectivamente.

# Capítulo 5

## Conclusões e recomendação para trabalhos futuros

Nesse capítulo, são apresentadas as principais conclusões do presente trabalho. No que tange ao estudo da modelagem do termo da taxa de nucleação, a correção de Courtney intercalada com o modelo clássico, para determinadas faixas de temperatura, abrange a maioria dos pontos experimentais. Diante disso, como o  $CO_2$  possui comportamento qualitativo similar, também foi utilizado um modelo híbrido para taxa de nucleação, nas simulações do bocal com escoamento supersônico.

Foi possível a implementação no pacote CFD foam-extend-4.0 de um novo aplicativo denominado *condensationFoam*, através da união do aplicativo original *dbnsFoam* com o código em C++, contendo a modelagem da condensação completa. O código criado inclui as equações de transporte dos momentos, a modelagem dos termos de nucleação e crescimento e o algoritmo de inversão dos momentos, pelo método de Chebyshev, totalmente acoplados.

Os testes preliminares do aplicativo foram promissores para o escoamento de vapor de água, principalmente, para a etapa inicial da condensação, visto que, a taxa de nucleação e o número total de partículas atingiram a mesma ordem de grandeza prevista pela literatura. Ademais, o aplicativo calcula as principais variáveis, que representam o fenômeno físico, com um resultado qualitativo coerente, dado os perfis de pressão e temperatura no estado estacionário. Além disso, também considera a polidispersão das partículas formadas no escoamento.

Quanto as simulações do escoamento supersônico no bocal convergente-divergente, contendo  $CO_2$  puro, nota-se a diferença nas condições termodinâmicas do gás para condensar, como os graus de supersaturação e de super-resfriamento inferiores aos encontrados no escoamento com vapor de água. Também constata-se que, as melhores condições para condensação, caracterizam-se por elevadas pressões e baixas temperaturas na entrada do bocal. Com isso, a simulação IX, foi o caso mais promissor para condensação. Apesar da incerteza na origem de algumas oscilações

observadas, o aplicativo foi capaz de calcular variáveis primordiais para predição da condensação. Dentre elas, supersaturação, super-resfriamento, raio médio, taxa de nucleação e número total de partículas, com comportamento qualitativo consoante com a literatura.

Por fim, serão algumas diretrizes para possíveis trabalhos futuros. Primeiramente, como os termos de troca entre as fases influenciam diretamente ambos os escoamentos, provocando um choque no escoamento da fase contínua, e somente através dele, é possível observar o crescimento de gotas. A necessidade do acoplamento entre as fases torna-se uma diretriz prioritária para os trabalhos seguintes.

Outra vertente a ser seguida, é a implementação no código da condensação usando gás real, já que as condições de operação para  $CO_2$  estão longe da idealidade. Para isso, também será preciso mudar uma parte da modelagem referente à taxa de nucleação, e às propriedades termodinâmicas.

Mais uma possibilidade de ampliação do trabalho, envolveria a implementação dos fluxos numéricos dos momentos, pois, apesar dessa abordagem ser amplamente utilizado na literatura para escoamentos supersônicos, não está implementado no código original do foam-extend-4.0. Com isso, existe uma forte possibilidade de redução inconsistência física, proveniente de problemas numéricos, encontrada nesse trabalho.

Por fim, também seria interessante, a implementação de uma abordagem contendo mais de um componente no escoamento. Visto que, esse equipamento de separação, na prática, recebe uma corrente multicomponente. Para isso, seria necessário modificar alguns modelos como de viscosidade e a condutividade térmica, por exemplo.

## 5.1 Apêndice

### 5.1.1 Apêndice I

#### As aproximações de fluxo de Riemann

O método HLLC assume a possibilidade de existência de três ondas (rarefação ou choque, contato e rarefação ou choque) separando quatro estados distintos do espaço de solução do problema de Riemann [117]. O método estima o valor do fluxo entre células a partir da estimativa das velocidades das ondas,  $s_L$  para a da esquerda,  $s_R$  para a da direita e  $s_*$  para a central. Portanto, o *solver* de Riemann aproximado para o método HLLC em termos de variáveis conservadas ( $\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{x}, \mathbf{t})$ ) é apresentado

na Equação 5.1 [104]:

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{se } \frac{x}{t} \leq s_L \\ \mathbf{U}_{*L} & \text{se } s_L \leq \frac{x}{t} \leq s_* \\ \mathbf{U}_{*R} & \text{se } s_* \leq \frac{x}{t} \leq s_R \\ \mathbf{U}_R & \text{se } \frac{x}{t} \geq s_R \end{cases}, \quad (5.1)$$

No caso do cálculo realizado para encontrar o fluxo numérico, onde os fluxos intermediários precisam ser determinados (Equação 5.2):

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^{HLLC} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & \text{se } 0 \leq s_L \\ \mathbf{F}_{*L} & \text{se } s_L \leq 0 \leq s_* \\ \mathbf{F}_{*R} & \text{se } s_* \leq 0 \leq s_R \\ \mathbf{F}_R & \text{se } 0 \geq s_R \end{cases}, \quad (5.2)$$

Para a aplicação do método HLLC nas equações de Euler multidimensionais, monofásicas e monocomponentes, Toro [104] emprega a característica da onda central (contato):  $u_{*R} = u_{*L} = u_*$  e  $p_{*L} = p_{*R} = p_*$ , e para as outras componentes da velocidade:  $v_{*L} = v_L; v_{*R} = v_R$  e  $w_{*L} = w_L; w_{*R} = w_R$ . Além disso, é feita a consideração de  $s_* = u_*$  na qual possibilita o cálculo direto da velocidade entre as ondas à esquerda e à direita ( $u_*$ ) a partir de  $s_*$ . Utilizando as propriedades intrínsecas à onda central, obtém-se a Equação 5.3 para  $s_*$ :

$$s_* = \frac{p_R - p_L + \rho_L u_L (s_L - u_L) - \rho_R u_R (s_R - u_R)}{\rho_L (s_L - u_L) - \rho_R (s_R - u_R)}, \quad (5.3)$$

Logo, torna-se necessário a estimativa de  $s_L$  e  $s_R$ .

Depois disso, o fluxo entre células para a região central pode ser calculado pela Equação 5.4 [104]:

$$\mathbf{F}_{*K} = \mathbf{F}_K + s_K (\mathbf{U}_{*K} - \mathbf{U}_K) \quad (5.4)$$

para  $K = L$  e  $K = R$ , com os estados intermediários das variáveis dados pela Equação 5.5:

$$\mathbf{U}_{*K} = \rho_K \left( \frac{s_K - u_K}{s_K - s_*} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ s_* \\ v_K \\ w_K \\ \frac{E_{tv}}{\rho_K} + (s_* - u_K) \left[ s_* + \frac{p_K}{\rho_K (s_K - u_K)} \right] \end{bmatrix}. \quad (5.5)$$



Finalmente, o fluxo entre células completo pode ser calculado pela Equação 5.2.

As Equações 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4 mostradas para o método HLLC são desenvolvidas para serem empregadas independentemente da equação de estado adotada. A equação de estado é importante nos modelos para estimar as velocidades da onda,  $s_L$  e  $s_R$ . Para os casos multifásicos ou que a turbulência seja adicionada, a metodologia HLLC deve ser adaptada, pois o número de autovalores do sistema aumenta e, conseqüentemente, o número de ondas [104]. Dentre as metodologias desenvolvidas para estimar as velocidades da onda,  $s_L$  e  $s_R$ , Davis [155] sugeriu duas maneiras simples (Equações 5.6 e 5.7):

$$s_L = u_L - a_L, \quad s_R = u_R + a_R, \quad (5.6)$$

$$s_L = \min(u_L - a_L, u_R - a_R), \quad s_R = \max(u_L + a_L, u_R + a_R). \quad (5.7)$$

Embora as Equações supracitadas sejam simples, elas não são recomendadas para uso em simulações [104]. Ademais, elas caracterizam uma dependência entre essa estimativa e a equação de estado, que também determina como calcular as velocidades do som a dadas temperatura e pressão. Para outras equações de estado, a estimativa deve ser feita de maneira diferente, baseada nos autovalores obtidos pela nova matriz Jacobiana considerando a nova equação de estado.

Uma outra maneira de estimar as velocidades da onda com maior aplicação computacional, porém ainda dependente da equação de estado adotada, é baseada nos autovalores médios de Roe [118] (Equação 5.8):

$$s_L = \tilde{u} - \tilde{a}, \quad s_R = \tilde{u} + \tilde{a}, \quad (5.8)$$

em que  $\tilde{u}$  e  $\tilde{a}$  são as velocidades do som e da partícula média de Roe, dados por,

$$\tilde{u} = \frac{\sqrt{\rho_L}u_L + \sqrt{\rho_R}u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad \tilde{a} = \left[ (\gamma - 1) \left( \tilde{H}_m \frac{1}{2} \tilde{u}^2 \right) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5.9)$$

com a entalpia por unidade de massa  $H_m$  aproximada como,

$$\tilde{H}_m = \frac{\sqrt{\rho_L}H_m + \sqrt{\rho_R}H_m}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad (5.10)$$

Dito isso, outro método para aproximação dos fluxos foi desenvolvido por Roe e Pike [119] que segue a metodologia desenvolvida por Roe[118]. Nessa metodologia, a matriz jacobiana do sistema original,  $\mathbf{A}(\mathbf{U})$ , é substituída por uma outra constante,  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$  e é resolvido um novo problema de Riemann com base na Equação 5.11:

$$\mathbf{U}_t + \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{U}_x = \mathbf{0}. \quad (5.11)$$

A estrutura geral dos métodos de Roe [118] calcula o vetor de variáveis conservadas pela Equação 5.12 e obtém o vetor fluxo entre células pela Equação 5.13.

$$\Delta\mathbf{U} = \mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L = \sum_{i=1}^m \tilde{\alpha}_i \tilde{\mathbf{K}}^{(i)}, \quad (5.12)$$

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_L + \mathbf{F}_R) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \tilde{\alpha}_i |\tilde{\lambda}_i| \tilde{\mathbf{K}}^{(i)}. \quad (5.13)$$

Com isso, precisa-se estimar as forças da onda,  $\tilde{\alpha}$ , os autovalores,  $\tilde{\lambda}_i$ , e autovetores,  $\tilde{\mathbf{K}}^{(i)}$ , característicos da matriz jacobiana constante  $\tilde{\mathbf{A}}$ .

Roe e Pike [119] fazem isso seguindo dois passos: linearização das leis de conservação para as variáveis conservadas em torno de um estado de referência, e posterior estimativa das variáveis supracitadas pela Equação 5.14 em termos do vetor de variáveis primitivas,  $\tilde{\mathbf{W}} = [\tilde{\rho}, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}, \tilde{a}]^T$ .

$$\tilde{\alpha}_i = \hat{\alpha}_i(\tilde{\mathbf{W}}); \tilde{\lambda}_i = \hat{\lambda}_i(\tilde{\mathbf{W}}); \tilde{\mathbf{K}}^{(i)} = \hat{\mathbf{K}}^{(i)}(\tilde{\mathbf{W}}), \quad (5.14)$$

em que  $\hat{\alpha}_i$  são as forças de onda em termos do estado linearizado.

Para as equações de Euler monofásicas e monocomponentes, o método Roe-Pike fornece para  $\hat{\alpha}_i$  (Equação 5.15) e para  $\tilde{\mathbf{W}}$  (Equação 5.16):

$$\hat{\alpha}_i = \begin{cases} \hat{\alpha}_1 = \frac{1}{2\hat{a}} - [\Delta p - \hat{a}\hat{\rho}\Delta u] \\ \hat{\alpha}_2 = \Delta\rho - \frac{\Delta p}{\hat{a}^2} \\ \hat{\alpha}_3 = \hat{\rho}\Delta v \\ \hat{\alpha}_4 = \hat{\rho}\Delta w \\ \hat{\alpha}_5 = \frac{1}{2\hat{a}}[\Delta p + \hat{a}\hat{\rho}\Delta u] \end{cases}, \quad (5.15)$$

em que  $\Delta p = p_R - p_L$ ;  $\Delta u = u_R - u_L$ ;  $\Delta\rho = \rho_R - \rho_L$ ;  $\Delta v = v_R - v_L$  e  $\Delta w = w_R - w_L$ .

$$\tilde{\mathbf{W}} = \begin{cases} \tilde{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \\ \tilde{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{v} = \frac{\sqrt{\rho_L} v_L + \sqrt{\rho_R} v_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{w} = \frac{\sqrt{\rho_L} w_L + \sqrt{\rho_R} w_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{H}_m = \frac{\sqrt{\rho_L} H_m + \sqrt{\rho_R} H_m}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \tilde{a} = \left( (\gamma - 1) \left( \tilde{H}_m \frac{1}{2} |\tilde{\mathbf{u}}|^2 \right) \right)^{\frac{1}{2}} \end{cases} . \quad (5.16)$$

Os autovalores,  $\hat{\lambda}_i$ , são os seguintes [104]:  $\lambda_1 = \hat{u} - \hat{a}$ ,  $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = \hat{u}$  e  $\lambda_5 = \hat{u} + \hat{a}$ . Toro [104] também mostra os autovetores,  $\hat{\mathbf{K}}^{(i)}$  (Equação 5.17):

$$\hat{\mathbf{K}}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{u} - \hat{a} \\ \hat{v} \\ \hat{w} \\ \hat{H}_m \hat{u} \hat{a} \end{bmatrix}; \hat{\mathbf{K}}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{u} \\ \hat{v} \\ \hat{w} \\ \frac{1}{2} |\hat{\mathbf{u}}|^2 \end{bmatrix}; \hat{\mathbf{K}}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \hat{v} \end{bmatrix}; \hat{\mathbf{K}}^{(4)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \hat{w} \end{bmatrix}; \quad (5.17)$$

$$\hat{\mathbf{K}}^{(5)} = \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{u} + \hat{a} \\ \hat{v} \\ \hat{w} \\ \hat{H}_m \hat{u} \hat{a} \end{bmatrix} .$$

## 5.1.2 Apêndice II

### Algoritmo do Produto-Diferença (APD)

Ele foi introduzido por Gordon [141] e transforma uma sequência de momentos em coeficientes de uma fração contínua. Estes coeficientes podem ser usados para calcular os pesos e abscissas através de um problema de autovalor correspondente. Na primeira etapa do APD, é inicializada uma matriz  $B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}^{(2n+1) \times (2n+1)}$  com os elementos da primeira e segunda colunas definidos da seguinte maneira:

$$\begin{cases} b_{i1} = \delta_{i1}; i = 1, \dots, 2n + 1 \\ b_{i2} = (-1)^{i-1} m_{i-1}; i = 1, \dots, 2n \end{cases} \quad (5.18)$$

Para os outros :

$$b_{ij} = \begin{cases} b_{1,j-1}b_{i+1,j-2} - b_{1,j-2}b_{i+1,j-1}; i = 1, \dots, 2n + 2 - j; j = 3, \dots, 2n + 1 \\ 0 ; \text{ casos restantes} \end{cases} \quad (5.19)$$

É importante que esses momentos sejam de uma função peso com suporte no eixo real positivo. Na próxima etapa, os coeficientes  $c_i$  são determinados como:

$$c_i = \begin{cases} m_0; i = 1 \\ \frac{b_{1,i+1}}{b_{1i}b_{1,i-1}}, i = 2, \dots, 2n; \end{cases} \quad (5.20)$$

Agora pode-se construir uma matriz tridiagonal simétrica  $\tilde{\mathbf{A}}_{\mathbf{n}} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$  como a mencionada anteriormente cujo os elementos são dados por:

$$\beta_i = \begin{cases} c_2; i = 1 \\ c_{2i} + c_{2i-1}, i = 2, \dots, n \end{cases}, \quad \alpha_i = -\sqrt{c_{2i+1}c_{2i}}; i = 1, \dots, n - 1 \quad (5.21)$$

O sinal de menos dos termos fora da diagonal não afeta os autovalores, pois o polinômio característico depende apenas dos quadrados desses elementos. Os pesos e abscissas são agora dados pelos autovetores e autovalores correspondentes da matriz  $(A\nu_i = r_i\nu_i)$ . Os pesos podem ser calculados através da primeira componente do  $i$ -ésimo autovetor  $(\nu_{i1})$  pela expressão  $\omega_i = m_0\nu_{i1}$ , e as abscissas são os autovalores da matriz supracitada[135].

Geralmente, o algoritmo de produto-diferença é usado com o QMOM. Entretanto, JOHN e THEIN [135] descobriram que o algoritmo Chebyshev é consideravelmente mais simples, mais robusto e menos restritivo comparado ao anterior.

#### **Algoritmo Chebyshev**

O desenvolvimento do algoritmo Chebyshev é apresentado da seguinte forma:

Considerando a relação de recorrência para  $P_{i+1}$  e multiplicando-a por  $r^m$  tem-se:

$$P_{i+1}r^m - P_i r^{m+1} = -\alpha_i P_i r^m - \beta_i P_{i-1} r^m \quad (5.22)$$

Em seguida retirando os momentos da equação acima através da definição de produto interno:

$$\langle P_{i+1}, r^m \rangle - \langle P_i, r^{m+1} \rangle = -\alpha_i \langle P_i, r^m \rangle - \beta_i \langle P_{i-1}, r^m \rangle \quad (5.23)$$

Para fins de manipulações algébricas da equação acima, denomina-se  $M_{i,m} =$

$\langle P_i, r^m \rangle$  e obtém-se a equação :

$$M_{i+1,m} = M_{i,m+1} - \alpha_i M_{i,m} - \beta_i M_{i-1,m} \quad (5.24)$$

Com as mudanças apresentadas, o algoritmo segue a formulação abaixo. Primeiramente, define-se  $M_{0,m} = m_m$  e  $M_{-1,m} = 0$ , onde  $m$  é a potência dos momentos. Em seguida pela definição de ortogonalidade ( $\langle P_i, r^m \rangle \forall i > m$ ) tem-se  $M_{i,m} = 0$

Para o caso  $m = i - 1$ , obtém-se o coeficiente da relação de recorrência  $\beta$ :

$$\beta_i = \frac{M_{i,i}}{M_{i-1,i-1}} \quad (5.25)$$

Posteriormente, fazendo  $m = i$  e usando  $\beta_i$ , calcula-se  $\alpha_i$  :

$$\alpha_i = \frac{M_{i,i+1}}{M_{i,i}} - \frac{M_{i-1,i}}{M_{i-1,i-1}} \quad (5.26)$$

Em resumo, o método de Chebyshev baseia-se no seguinte procedimento [133]:

1. Usando  $M_{0,m} = m_m$ ; ( $m = 0, \dots, 2n - 1$ )
2. Inicializar  $\beta_0 = m_0$  e  $\alpha_0 = \frac{M_{0,1}}{M_{0,0}}$
3. Calcular  $M_{1,m}$  para  $m = 1, \dots, 2n - 2$ , com os valores de  $\beta_0$  e  $\alpha_0$  obtidos no passo anterior(em  $n = 0$ ) através da relação Equação 5.24
4. Com duas linhas consecutivas ( $M_{0,m}$  e  $M_{1,m}$ ) calcula-se os coeficientes  $\alpha_1$  e  $\beta_1$
5. Repetir os passos 3 e 4 para  $i = 2, \dots, n - 1$  com  $m = i, i + 1, \dots, 2n - i - 1$

No final do procedimento, obtém-se o conjunto de coeficientes  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  com  $i = 0, \dots, n - 1$  usados na matriz  $\tilde{\mathbf{A}}_i$  para calcular os pesos e abscissas da quadratura com  $n$  pontos.

Com este algoritmo, o número de abscissas computadas é  $n = \frac{j}{2}$  quando se usa  $j$  momentos.

### **dimensionalização de MCCOY e MADRAS [128]**

Considerando que essa é a distribuição inicial, todos os cálculos são realizados no tempo  $t = 0$  e os valores escolhidos para o momento zero,  $\mu_0$ , e para o momento um,  $\mu_1$ , tentam minimizar ao máximo sua influência na simulação, introduzindo apenas uma molécula de raio  $1 \times 10^{-9}$ .

$$\Phi(\eta, 0) = \frac{f(r, 0)\mu_1(0)}{(\mu_0(0))^2} \text{ e } \eta = r \frac{\mu_0(0)}{\mu_1(0)}, \quad (5.27)$$

com  $\Phi(\eta, \tau)$  como a função de distribuição normalizada,  $\eta$  como coordenada interna normalizada. Já  $f(r, 0)$  e  $r$  são função de distribuição e a coordenada interna não normalizadas respectivamente. Dito isso, o procedimento para cálculo dos momentos dimensionais segue o seguinte raciocínio:

$$\mu_0^a = \int_0^\infty \Phi(\eta, 0) d\eta. \quad (5.28)$$

Substituindo a Equação 5.27 na Equação 5.28 tem-se:

$$\mu_0^a = \frac{1}{\mu_0(0)} \int_0^\infty f(r, 0) dr, \quad (5.29)$$

onde:  $\int_0^\infty f(r, 0) dr = \mu_0^d$ ,  $\mu_0(0) = 1.0$  e  $\mu_1(0) = 1 \times 10^{-9}$ . Analogamente, a substituição é aplicada para todos os momentos supracitados.

# Referências Bibliográficas

- [1] ONN, M., SEMAN, A., KASSIM, Z., et al. “CO<sub>2</sub> Separation from Natural Gas Through Hydrate Formation”, *Offshore Technology Conference*, 2014.
- [2] HALIM, H., SHARIFF, A., BUSTAM, M. “High pressure CO<sub>2</sub> absorption from natural gas using piperazine promoted 2-amino-2-methyl-1-propanol in a packed absorption column”, *Separation and Purification Technology*, v. 152, pp. 87 – 93, 2015.
- [3] HAIRUL, N., MOHD SHARIFF, D., TAY, W. H., et al. “Modelling of high pressure CO<sub>2</sub> absorption using PZ+AMP blended solution in a packed absorption column”, *Separation and Purification Technology*, v. 165, pp. 179–189, 2016.
- [4] JIANG, G., HUANG, Q., KENARSARI, S., et al. “A new mesoporous amine-TiO<sub>2</sub> based pre-combustion CO<sub>2</sub> capture technology”, *Applied Energy*, v. 147, pp. 214 – 223, 2015.
- [5] DAS, S., WANG, X., OSTWAL, M., et al. “A highly stable microporous covalent imine network adsorbent for natural gas upgrading and flue gas CO<sub>2</sub> capture”, *Separation and Purification Technology*, v. 170, pp. 68 – 77, 2016.
- [6] HART, A., GNANENDRAN, N. “Cryogenic CO(2) Capture in Natural Gas”, *Energy Procedia*, v. 1, pp. 697–706, 2009.
- [7] KHAN, A. L., LI, X., ILYAS, A., et al. “Novel sulfonated and fluorinated PEEK membranes for CO<sub>2</sub> separation”, *Separation and Purification Technology*, v. 167, pp. 1–5, 2016. ISSN: 1383-5866.
- [8] GOMES, H. I., MAYES, W. M., ROGERSON, M., et al. “Alkaline residues and the environment: a review of impacts, management practices and opportunities”, *Journal of Cleaner Production*, v. 112, pp. 3571 – 3582, 2016. ISSN: 0959-6526. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2015.09.111>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652615013396>>.

- [9] WATERMAN, P. C., STERN, S. A. “Separation of Gas Mixtures in a Supersonic Jet”, *The Journal of Chemical Physics*, v. 31, n. 2, pp. 405–419, 1959. doi: 10.1063/1.1730367.
- [10] HAGHIGHI, M., HAWBOLDT, K. A., ABDI, M. A. “Supersonic Separators: Review of latest developments”, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 27, pp. 109–121, 2015.
- [11] B., P., R., V. D., J., W., et al. “Formation of nano-sized water droplets in a supersonic expansion flow”, *Journal of Aerosol Science*, 1996. doi: 10.1016/0021-8502(96)00146-2.
- [12] HAGHIGHI, M. *Supersonic Separators: a Gas Dehydration Device*. Dissertação de Mestrado, Memorial University of Newfoundland, St. John’s, Canadá, 2010.
- [13] CLAUS BORGNACKE, R. E. S. *Population Balances-Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Purdue University, West Lafayette, Indiana, U.S.A, Blucher, 2000. ISBN: 9780125769709.
- [14] LAMMANA, G. *On nucleation and droplet growth in condensing nozzle flows*. Tese de Doutorado, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, Holanda, 2000.
- [15] SIDIN, R. *Droplet size distribution in condensing flow*. Tese de Doutorado, University of Twente, 2009.
- [16] “ExxonMobil Explore the Outlook for Energy: A View to 2040”. <https://corporate.exxonmobil.com/en/energy-and-environment/energy-resources/outlook-for-energy/2018-outlook-for-energy-a-view-to-2040#aViewTo2040>, 2017.
- [17] XUEWEN CAO, W. Y. “Numerical simulation of binary-gas condensation characteristics in supersonic nozzles”, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 25, pp. 197–206, 2015. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.05.005>.
- [18] WEN, C., LI, A., WALTHER, J. R., et al. “Effect of swirling device on flow behavior in a supersonic separator for natural gas dehydration”, *Separation and Purification Technology*, v. 168, pp. 68 – 73, 2016.
- [19] WEN, C., CAO, X., YANG, Y., et al. “An unconventional supersonic liquefied technology for natural gas”, *Energy Educ. Sci. Technol*, v. 3, pp. 651 – 660, 2012.



- [20] GYARMATHY, G. “THE SPHERICAL DROPLET IN GASEOUS CARRIER STREAMS: REVIEW AND SYNTHESIS”, *Multiphase Science and Technology*, v. 1, n. 1-4, pp. 99–279, 1982. ISSN: 0276-1459.
- [21] YOUNG, J. “The condensation and evaporation of liquid droplets in a pure vapour at arbitrary Knudsen number”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 34, n. 7, pp. 1649 – 1661, 1991. ISSN: 0017-9310. doi: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(91\)90143-3](https://doi.org/10.1016/0017-9310(91)90143-3). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931091901433>>.
- [22] LAMANNA, G. *On nucleation and droplet growth in condensing nozzle flows*. Tese de Doutorado, Department of Applied Physics, 2000.
- [23] GIRSHICK, S. L., CHIU, C. “Kinetic nucleation theory: A new expression for the rate of homogeneous nucleation from an ideal supersaturated vapor”, *The Journal of Chemical Physics*, v. 93, n. 2, pp. 1273–1277, 1990. doi: 10.1063/1.459191. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.459191>>.
- [24] JIANG, W., BIAN, J., LIU, Y., et al. “Investigation of flow characteristics and the condensation mechanism of ternary mixture in a supersonic nozzle”, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 34, pp. 1054–1061, 2016. ISSN: 1875-5100. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2016.07.075>.
- [25] CASTIER, M. “Modeling and simulation of supersonic gas separations”, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 18, pp. 304–311, 2014. ISSN: 1875-5100. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2014.03.014>.
- [26] MARTYUKOVA, D. S., KUCHMA, A. E., SHCHEKIN, A. K. “Dynamics of variations in size and composition of a binary droplet in a mixture of two condensing vapors and a passive gas under arbitrary initial conditions”, *Colloid Journal*, v. 75, n. 5, pp. 571–578, Sep 2013.
- [27] JAN HALAMA, V. H. “Numerical solution of steam flow in a nozzle using different non-equilibrium condensation models”, *Applied Mathematics and Computation*, v. 272, pp. 657–669, 2016. ISSN: 0096-3003. doi: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2015.05.067>.
- [28] SUN, W., CAO, X., YANG, W., et al. “Numerical simulation of CO<sub>2</sub> condensation process from CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub> binary gas mixture in supersonic nozzles”, *Separation and Purification Technology*, v. 188, pp. 238 – 249, 2017.

ISSN: 1383-5866. doi: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2017.07.023>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S138358661730196X>>.

- [29] YANG, Y., WALTHER, J. H., YAN, Y., et al. “CFD modeling of condensation process of water vapor in supersonic flows”, *Applied Thermal Engineering*, v. 115, pp. 1357–1362, 2017. ISSN: 1359-4311. doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.01.047>.
- [30] WHITE, A., HOUNSLOW, M. “Modelling droplet size distributions in poly-dispersed wet-steam flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 43, n. 11, pp. 1873 – 1884, 2000. ISSN: 0017-9310. doi: [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(99\)00273-2](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(99)00273-2).
- [31] AFZALIFAR, A., TURUNEN-SAARESTI, T., GRÖNMAN, A. “Comparison of Moment-Based Methods for Representing Droplet Size Distributions in Supersonic Nucleating Flows of Steam”. In: *Comparison of Moment-Based Methods for Representing Droplet Size Distributions in Supersonic Nucleating Flows of Steam*, 04 2016.
- [32] ZHU, X., LIN, Z., YUAN, X., et al. “Non-equilibrium condensing flow modeling in nozzle and turbine cascade”, *International Journal of Gas Turbine, Propulsion and Power Systems*, v. 4, pp. 9–16, 10 2012.
- [33] BORM, O., KAU, H.-P. “Unsteady Aerodynamics of a Centrifugal Compressor Stage: Validation of Two Different CFD Solvers”, *ASME Turbo Expo*, v. 8, 06 2012. doi: [10.1115/GT2012-69636](https://doi.org/10.1115/GT2012-69636).
- [34] FÜRST, J. “On the implicit density based OpenFOAM solver for turbulent compressible flows”, *EPJ Web of Conferences*, v. 143, pp. 02027, 01 2017. doi: [10.1051/epjconf/201714302027](https://doi.org/10.1051/epjconf/201714302027).
- [35] R. ANDERSON, M., BONHAUS, D. In: *Validation Results for a Diverse Set of Turbomachinery Cases Using a Density-Based OpenFOAM Solver*, 06 2014. doi: [10.1115/GT2014-25977](https://doi.org/10.1115/GT2014-25977).
- [36] SHEN, C., SUN, F., XIA, X. “Implementation of density-based solver for all speeds in the framework of OpenFOAM”, *Computer Physics Communications*, v. 185, n. 10, pp. 2730 – 2741, 2014. ISSN: 0010-4655. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2014.06.009>.
- [37] PASCAL, P., DI MARE, F. “Highly efficient Euler-Euler approach for condensing steam flows in turbomachines”. Zenodo, maio 2018. doi: <https://doi.org/10.5281/zenodo.1888888>.

10.5281/zenodo.1344547. Disponível em: <<https://doi.org/10.5281/zenodo.1344547>>.

- [38] FOAM-EXTEND. “FOAM-Extend project”. Disponível na internet deste Dezembro de 2004 (<http://www.extend-project.de/>), 2017. Versão 4.0.
- [39] ALI ALTAM, R., LEMMA, T. A., JUFAR, S. “Trends in Supersonic Separator design development”, *MATEC Web of Conferences*, v. 131, pp. 03006, 01 2017. doi: 10.1051/mateconf/201713103006.
- [40] CAO, X., BIAN, J. “Supersonic separation technology for natural gas processing: A review”, *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, v. 136, pp. 138 – 151, 2019. ISSN: 0255-2701. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2019.01.007>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270118312698>>.
- [41] WEN, C., CAO, X., ZHANG, J., et al. “Three-dimensional Numerical Simulation of the Supersonic Swirling Separator”, *International Society of Offshore and Polar Engineers*, 2010.
- [42] FOX, R. W., MCDONALD, A. T., PRITCHARD, P. J., et al. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. Atlas, 2018. ISBN: 978-8521634812.
- [43] OKIMOTO, F., BROUWER, J. “Supersonic gas conditioning”, *World Oil*, v. 223, pp. 89–91, 08 2002.
- [44] FOX, R. W., MCDONALD, A. T., PRITCHARD, P. J. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. LTC, 2006.
- [45] ARINA, R. “Numerical simulation of near-critical fluids”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 51, pp. 409–426, 2004.
- [46] TORO, E. F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. 2 ed. Nova York, Springer, 1999.
- [47] FOX, R. W., PRITCHARD, P. J., MCDONALD, A. T. United States of America, Hoboken, NJ : John Wiley & Sons, 2011. ISBN: 780470547557.
- [48] YANG, Y., WEN, C., WANG, S., et al. “Numerical simulation of real gas flows in natural gas supersonic separation processing”, *Natural Gas Science and Engineering*, v. 21, n. 1, pp. 829–836, 2014.
- [49] MERRIAM, M. *An Entropy-Based Approach to Nonlinear Stability*. Tese de Doutorado, Stanford University, Stanford, CA., 1989.

- [50] ISHII, M., HIBIKI, T. US, Springer-Verlag New York, 2011. ISBN: 978-1-4419-7984-1.
- [51] BRENNEN, C. E. *Fundamentals of Multiphase Flow*. Cambridge University Press, 2005.
- [52] VAN WACHEM, B., ALMSTEDT, A. “Methods for multiphase computational fluid dynamics”, *Chemical Engineering Journal*, v. 96, n. 1, pp. 81 – 98, 2003. ISSN: 1385-8947. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2003.08.025>. Festschrift Prof. Cor M. van den Bleek.
- [53] YOUNG, J. B. “Two-Dimensional, Nonequilibrium, Wet-Steam Calculations for Nozzles and Turbine Cascades”, *Journal of Turbomachinery*, v. 114, pp. 569–579, 1992. doi: 10.1115/1.2929181.
- [54] WHITE, A. J. AND YOUNG, J. B. “Time-marching method for the prediction of two-dimensional, unsteadyflows of condensing steam”, *Journal of Propulsion and Power*, v. 9, n. 4, pp. 579–587, 1993. doi: 10.2514/3.23661.
- [55] MCCALLUM, M., HUNT, R. “The Flow of Wet Steam in a One Dimensional Nozzle”, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, v. 44(12), pp. 1807–1821, 1999.
- [56] MOORE, M. J., SIEVERDING, C. H. Washington : Hemisphere Pub. Corp, 1976. ISBN: 0070429928.
- [57] “4 Multiphase flow processes”. In: Ranade, V. V. (Ed.), *Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering*, v. 5, *Process Systems Engineering*, Academic Press, pp. 85 – 122, 2002. doi: [https://doi.org/10.1016/S1874-5970\(02\)80005-4](https://doi.org/10.1016/S1874-5970(02)80005-4).
- [58] ISHII, M. *Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-phase Flow*. Paris, Eyrolles, 1975.
- [59] ISHII, M., HIBIKI, T. *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. 1 ed. Nova York, EUA, Springer, 2006.
- [60] DREW, D. A., PASSMAN, S. L. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer, 1999.
- [61] MICHELE, V. *CFD modeling and measurement of liquid flow structure and phase holdup in two- and three-phase bubble columns*. Tese de Doutorado, Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, 2002.

- [62] LIN, Z., YUAN, X. “Numerical modeling and high-order scheme for wet steam flow”, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, v. 230, n. 11, pp. 1846–1860, 2016. doi: 10.1177/0954406215584394.
- [63] STARZMANN, J., OTHERS. “Results of the International Wet Steam Modeling Project”, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, v. 232, n. 5, pp. 550–570, 2018. doi: 10.1177/0957650918758779.
- [64] BIAN, J., JIANG, W., HOU, D., et al. “Condensation characteristics of CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub> mixture gas in a supersonic nozzle”, *Powder Technology*, v. 329, pp. 1 – 11, 2018. ISSN: 0032-5910. doi: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.01.042>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591018300482>>.
- [65] YEOH, G., CHEUNG, S., TU, J. Elsevier, 09 2013. ISBN: 9780080982298.
- [66] GERBER, A., MOUSAVI, A. “Application of quadrature method of moments to the polydispersed droplet spectrum in transonic steam flows with primary and secondary nucleation”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 31, n. 8, pp. 1518 – 1533, 2007. ISSN: 0307-904X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.apm.2006.04.011>.
- [67] G. GERBER, A., MOUSAVI, A. “Representing Polydispersed Droplet Behavior in Nucleating Steam Flow”, *Journal of Fluids Engineering-transactions of The Asme - J FLUID ENG*, v. 129, 11 2007. doi: 10.1115/1.2786536.
- [68] A. SIMPSON, D., WHITE, A. “Viscous and unsteady flow calculations of condensing steam in nozzles”, *International Journal of Heat and Fluid Flow - INT J HEAT FLUID FLOW*, v. 26, pp. 71–79, 02 2005. doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2004.04.002.
- [69] BLONDEL, F., AUDEBERT, B., PASUTTO, T., et al. “Condensation models and boundary conditions for non-equilibrium wet steam flows”, *International Journal on Finite Volumes*, 06 2013.
- [70] RAMKRISHNA, D. Academic Press, 2018. ISBN: 9788521212805.
- [71] RICHARD, B., WERNER, D. “Kinetische behandlung der keimbildung in übersättigten dampfen”, *Annalen der Physik*, v. 416, pp. 719–752, 1935.
- [72] ZELDOVICH, I. B. US Joint Publications Research Service, 1961.

- [73] DUNNING, W. “General and theoretical introduction”. In: *Nucleation*, Marcel Dekker, pp. 1–67, 1969.
- [74] FORD, I. “Nucleation theorems, the statistical mechanics of molecular clusters, and a revision of classical nucleation theory”, *Physical Review E*, v. 56, n. 5, pp. 5615, 1997.
- [75] A.M.BINNIE, M.W.WOODS. “The Pressure Distribution in a Convergent-Divergent Steam Nozzle”, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, v. 138, n. 1, pp. 229–266, 1938.
- [76] A.M.BINNIE, J.R.GREEN, PHIL, D. “An electrical detector of condensation in high-velocity steam”, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 181, n. 985, pp. 134–154, 1942. doi: 10.1098/rspa.1942.0067. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/181/985/134>>.
- [77] STEIN, G. “Angular and Wavelength Dependence of the Light Scattered from a Cloud of Particles Formed by Homogeneous Nucleation”, *The Journal of Chemical Physics*, v. 51, n. 3, pp. 938–942, 1969. doi: 10.1063/1.1672159.
- [78] WYSLOUZIL, B., WILEMSKI, G., CHEUNG, J., et al. “Doppler shift anisotropy in small angle neutron scattering”, *Phys.Rev.E*, v. 60, pp. 4330–4335, 1999. doi: 10.1103/PhysRevE.60.4330. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.60.4330>>.
- [79] BAKHTAR, F., J.B.YOUNG, A.J.WHITE, et al. “Classical Nucleation Theory and Its Application to Condensing Steam Flow Calculations”, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, v. 219, n. 12, pp. 1315–1333, 2005. doi: 10.1243/095440605X8379.
- [80] FAKHARI, K. *Numerical modeling and investigation of unsteady phenomena in condensing flows of industrial steam turbines*. Tese de Doutorado, Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Maschinenbau., 2010. Disponível em: <<http://www-brs.ub.ruhr-uni-bochum.de/netahtml/HSS/Diss/FakhariKeramat/diss.pdf>>.
- [81] ABRAHAM, F. Academic Press, New York, 1974.
- [82] HAN, Z., HAN, X., LI, H., et al. “Comparative study of homogeneous nucleation rate models for wet steam condensing flows”, *Korean Journal of Chemical Engineering*, v. 33, n. 12, pp. 3487–3492, Dec 2016. ISSN: 1975-7220. doi: 10.1007/s11814-016-0197-0.

- [83] PANDEY, K., SINGH, A. “CFD Analysis of Conical Nozzle for Mach 3 at Various Angles of Divergence with Fluent Software”, *International Journal of Chemical Engineering and Applications*, pp. 179–185, 01 2010. doi: 10.7763/IJCEA.2010.V1.31.
- [84] COURTNEY, W. G. “Remarks on Homogeneous Nucleation”, *The Journal of Chemical Physics*, v. 35, n. 6, pp. 2249–2250, 1961. doi: 10.1063/1.1732252.
- [85] VOLMER, M., WEBER, A. “Nucleus Formation in Supersaturated Systems”, *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, v. 119, pp. 277–301, 1926.
- [86] KANTROWITZ, A. “Nucleation in Very Rapid Vapor Expansions”, *The Journal of Chemical Physics*, v. 19, pp. 1097–1100, 09 1951. doi: 10.1063/1.1748482.
- [87] SPENCER, C. F., DANNER, R. P. “Improved equation for prediction of saturated liquid density”, *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 17, n. 2, pp. 236–241, 1972. doi: 10.1021/jc60053a012.
- [88] WÖLK, J., STREY, R. “Homogeneous Nucleation of H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O in Comparison: The Isotope Effect”, *The Journal of Physical Chemistry B*, v. 105, n. 47, pp. 11683–11701, 2001. doi: 10.1021/jp0115805.
- [89] MIQUEU, C., BROSETA, D., SATHERLEY, J., et al. “An extended scaled equation for the temperature dependence of the surface tension of pure compounds inferred from an analysis of experimental data”, *Fluid Phase Equilibria*, v. 172, n. 2, pp. 169–182, 2000. ISSN: 0378-3812. doi: 10.1016/S0378-3812(00)00384-8. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381200003848>>.
- [90] ANTOINE, C. “Tensions des vapeurs, nouvelle relation entre les tensions et les températures”, *C. R. Séances Acad.Sci*, v. 107, pp. 681–684, 778–780, 836–837, 1888. Disponível em: <<http://www.emis.de/cgi-bin/JFM-item?20.1204.01>>.
- [91] TONG, J. “The thermal physical properties of fluid”, *China Petrochemical Press*, 2008.
- [92] GYARMATHY, G. *Grundlagen einer Theorie der Nassdampfturbine*. Tese de Doutorado, ETH, 1962. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/20.500.11850/131597>>.

- [93] PETERS, F., PAIKERT, B. “Measurement and interpretation of growth and evaporation of monodispersed droplets in a shock tube”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 37, n. 2, pp. 293 – 302, 1994. ISSN: 0017-9310. doi: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(94\)90100-7](https://doi.org/10.1016/0017-9310(94)90100-7).
- [94] J.B., Y. “The spontaneous condensation of steam in supersonic nozzles”, v. 3, pp. 57–82, 01 1982.
- [95] HASINI, H., YUSOFF, M. Z., MALEK, N. A. “Numerical Modeling of Wet Steam Flow in Steam Turbine Channel”. In: Gokcek, M. (Ed.), *Mechanical Engineering*, IntechOpen, cap. 19, Rijeka, 2012. doi: 10.5772/37394. Disponível em: <<https://doi.org/10.5772/37394>>.
- [96] ANDERSSON, B., ANDERSSON, R., HÅKANSSON, L., et al. Cambridge, Cambridge University Press, 2011. doi: 10.1017/CBO9781139093590.
- [97] SHAMES, I. H. Edgard Blucher, 1973.
- [98] BOGER, M., JAEGLE, F., WEIGAND, B., et al. “A pressure-based treatment for the direct numerical simulation of compressible multi-phase flow using multiple pressure variables”, *Computer & Fluids*, v. 96, pp. 338–349, 2014.
- [99] LABOIS, M., NARAYANAN, C. “Non-conservative pressure-based compressible formulation for multiphase flows with heat and mass transfer”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 96, pp. 24–33, 2017.
- [100] XINGWEI, L., ZHONGLIANG, L., YANXIA, L. “Numerical Study of the High Speed Compressible Flow with Non-Equilibrium Condensation in a Supersonic Separator”, *Journal of Clean Energy Technologies*, v. 3, pp. 360–366, 2015.
- [101] CHEN, Z. J., PRZEKWAS, A. J. “A coupled pressure-based computational method for incompressible/compressible flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 229, pp. 9150–9165, 2010.
- [102] XIAO, C.-N., DENNER, F., VAN WACHEM, B. G. M. “Fully-coupled pressure-based finite-volume framework for the simulation of fluid flows at all speeds in complex geometries”, *Journal of Computational Physics*, v. 346, pp. 91–130, 2017.
- [103] JONES, I. P., GUILBERT, P. W., OWENS, M. P., et al. “The use of coupled solvers for complex multi-phase and reacting flows”. In: *Third International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, 2003.



- [104] TORO, E. F. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. 3 ed. Nova York, Springer, 2009.
- [105] JASAK, H. *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*. Tese de Doutorado, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido, 1996.
- [106] SILVA, L. F. L. R., DAMIAN, R. B., LAGE, P. L. C. “Implementation and analysis of numerical solution of the population balance equation in CFD packages”, *Computers and Chemical Engineering*, v. doi:10.1016/j.compchemeng.2008.03.007, 2008.
- [107] MOUKALLED, F., MANGANI, L., DARWISH, M. Switzerland, Springer International Publishing, 2016. ISBN: 978-3-319-16873-9.
- [108] MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2 ed. Rio de Janeiro, LTC, 2004.
- [109] RHIE, C. M., CHOW, W. L. “A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation”, *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, v. 21, n. 11, pp. 1525–1532, 1983.
- [110] PERIC, M., KESSLER, R., SCHEUERER, G. “Comparison of Finite Volume Numerical Methods with Staggered and Colocated Grids”, *Computers and Fluids*, v. 16, n. 4, pp. 389–403, 1988.
- [111] BLAZEK, J. “Chapter 3 - Principles of Solution of the Governing Equations”. In: Blazek, J. (Ed.), *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications (Third Edition)*, third edition ed., Butterworth-Heinemann, pp. 29 – 72, Oxford, 2015. ISBN: 978-0-08-099995-1. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-099995-1.00003-8>.
- [112] PATANKAR, S. V., SPALDING, D. B. “A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 15, n. 10, pp. 1787–1806, 1972.
- [113] FERZIGER, J., PÈRIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 1997.
- [114] LEVEQUE, R. J. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge, Cambridge University Press, 2002. doi: 10.1017/CBO9780511791253.

- [115] COURANT, R., ISAACSON, E., REES, M. “On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences”, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, v. 5, n. 3, pp. 243–255, 1952. doi: 10.1002/cpa.3160050303. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cpa.3160050303>>.
- [116] TORO, E. F. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. ISBN: 978-3-540-25202-3.
- [117] TORO, E. F., SPRUCE, M., SPEARES, W. “Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver”, *Shock Waves*, v. 4, pp. 25–34, 1994.
- [118] ROE, P. L. “Approximate Riemann Solvers, parameters vectors, and difference schemes”, *Journal of Computational Physics*, v. 43, pp. 357–372, 1981.
- [119] ROE, P. L., PIKE, J. “Efficient construction and utilisation of approximate Riemann solutions”. In: *Computing Methods in Applied Science and Engineering*, 1984.
- [120] ARABNEJAD, M. H. “Implementation of HLLC-AUSM low-Mach scheme in a density-based compressible solver in FOAM-extend”. 2016. Edited by Nilsson. H.
- [121] ANSYS INC. *ANSYS CFX-18.0 User Manual*, 2017.
- [122] OPENFOAM. “OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox”. Disponível na internet deste Dezembro de 2004 (<http://www.openfoam.com/>), 2017. Versão 5.0, ESI-OpenCFD.
- [123] GREENSHIELDS, J., C., G. WELLER, H., GASPARINI, L., et al. “Implementation of semi-discrete, non-staggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for high-speed viscous flows”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 63, pp. 1–21, 01 2009. doi: 10.1002/flid.2069.
- [124] BORM, O., JEMCOV, A., KAU, H.-P. “Density Based Navier Stokes Solver for Transonic Flows”. In: *6th OpenFOAM Workshop*, pp. 1–30. ., 2011.
- [125] LIOU, M.-S. “A Sequel to AUSM: AUSM+”, *Journal of Computational Physics*, v. 129, n. 2, pp. 364 – 382, 1996. ISSN: 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1006/jcph.1996.0256>.
- [126] LIOU, M.-S. “A sequel to AUSM, Part II: AUSM+-up for all speeds”, *Journal of Computational Physics*, v. 214, n. 1, pp. 137 – 170, 2006. ISSN: 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.09.020>.

- [127] HARTEN, A., LAX, P. D., LEER, B. V. “On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws”, *SIAM Review*, v. 25 (1), pp. 35–61, 1983.
- [128] MCCOY, B. J., MADRAS, G. “Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 3049–3051, 2003.
- [129] YONG, P. K., SEINFELD, J. H. “Simulation of multicomponent aerosol condensation by the moving sectional method”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 135, n. 1, pp. 185–199, 1990. ISSN: 0021-9797. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(90\)90299-4](https://doi.org/10.1016/0021-9797(90)90299-4). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021979790902994>>.
- [130] FRENKLACH, M. “Method of Moments With Interpolative Closure”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 2229–2239, 06 2002. doi: 10.1016/S0009-2509(02)00113-6.
- [131] JOHN, V., ANGELOV, I., ÖNCÜL, A., et al. “Techniques for the reconstruction of a distribution from a finite number of its moments”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 11, pp. 2890 – 2904, 2007. ISSN: 0009-2509. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.02.041>.
- [132] HULBURT, H., KATZ, S. “Some problems in particle technology: A statistical mechanical formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 8, pp. 555 – 574, 1964. ISSN: 0009-2509. doi: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(64\)85047-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(64)85047-8). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250964850478>>.
- [133] UPADHYAY, R. R. “Evaluation of the use of the Chebyshev algorithm with the quadrature method of moments for simulating aerosol dynamics”, *Journal of Aerosol Science*, v. 44, pp. 11 – 23, 2012. ISSN: 0021-8502. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2011.09.005>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850211001613>>.
- [134] MCGRAW, R. “Description of Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments”, *Aerosol Science and Technology*, v. 27, n. 2, pp. 255–265, 1997. doi: 10.1080/02786829708965471.
- [135] JOHN, V., THEIN, F. “On the efficiency and robustness of the core routine of the quadrature method of moments (QMOM)”, *Chemical Engineering*

*Science*, v. 75, pp. 327–333, 2012. ISSN: 0009-2509. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.03.024>.

- [136] L.MARCHISIO, D., VIGIL, R., O.FOX, R. “Quadrature method of moments for aggregation–breakage processes”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 258, n. 2, pp. 322–334, 2003. ISSN: 0021-9797. doi: [https://doi.org/10.1016/S0021-9797\(02\)00054-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9797(02)00054-1).
- [137] GAUTSCHI, W. Oxford University, Oxford University Press, 06 2004. ISBN: 0198506724.
- [138] LANCZOS, C. Dover Publications, 2010. ISBN: 978-0486656564.
- [139] WHEELER, J. C. “Modified moments and Gaussian quadratures”, *Rocky Mountain J. Math.*, v. 4, n. 2, pp. 287–296, 06 1974. doi: 10.1216/RMJ-1974-4-2-287.
- [140] CHEBYSHEV, P. “Sur les fractions continues”, *Reprinted in Oeuvres I*, v. 11, n. 404, pp. 203–230, 1855.
- [141] GORDON, R. G. “Error bounds in equilibrium statistical mechanics”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 9, n. 5, pp. 655–663, 1968.
- [142] UPADHYAY, R., EZEKOYE, O. “Evaluation of the 1-point quadrature approximation in QMOM for combined aerosol growth laws”, *Journal of Aerosol Science*, v. 34, n. 12, pp. 1665 – 1683, 2003. ISSN: 0021-8502. doi: [https://doi.org/10.1016/S0021-8502\(03\)00380-X](https://doi.org/10.1016/S0021-8502(03)00380-X). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002185020300380X>>.
- [143] E RODNEY O. FOX, D. L. M. “Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 36, n. 1, pp. 43–73, 2005. ISSN: 0021-8502. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2004.07.009>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850204003052>>.
- [144] INC., P. *Pointwise v18 – User Manual*, 2017.
- [145] DOBE, J., FORT, J., HALAMA, J. “Numerical Solution of Single-and Two-phase Transonic Flow in Axial Cascade”. Jyväskylä, Finland, 2004.
- [146] TOOLBOX, E. “Carbon Dioxide - Thermophysical Properties”. Disponível na internet [https://www.engineeringtoolbox.com/CO2-carbon-dioxide-properties-d\\_2017.html](https://www.engineeringtoolbox.com/CO2-carbon-dioxide-properties-d_2017.html), 2018.

- [147] BELL, I. H., WRONSKI, J., QUOILIN, S., et al. “Pure and Pseudo-pure Fluid Thermophysical Property Evaluation and the Open-Source Thermophysical Property Library CoolProp”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 53, n. 6, pp. 2498–2508, 2014. doi: 10.1021/ie4033999. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie4033999>>.
- [148] MILLER, R. C., ANDERSON, R. J., KASSNER, J. L., et al. “Homogeneous nucleation rate measurements for water over a wide range of temperature and nucleation rate”, *The Journal of Chemical Physics*, v. 78, n. 6, pp. 3204–3211, 1983. doi: 10.1063/1.445236.
- [149] YELLOTT, J. I. “Supersaturated Steam”. Disponível na internet [http://cybra.p.lodz.pl/Content/6294/FSP\\_56\\_7.pdf](http://cybra.p.lodz.pl/Content/6294/FSP_56_7.pdf), 1933. Baltimore, Md.
- [150] BIER, K., EHRLER, F., THEIS, G. “Spontaneous Condensation in Stationary Nozzle Flow of Carbon Dioxide in a Wide Range of Density”. pp. 129–141. Springer Berlin Heidelberg, 1990. ISBN: 978-3-642-83587-2.
- [151] A., P. *Process and Energy Numerical Modeling of Non-Equilibrium Condensing Steam Flows*. Dissertação de Mestrado, Delft University of Technology, 2014.
- [152] DYKAS, S., WRÓBLEWSKI, W. “Single and two-fluid models for steam condensing flow modeling”, *International Journal of Multiphase Flow - INT J MULTIPHASE FLOW*, v. 37, pp. 1245–1253, 11 2011. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.05.008.
- [153] MOSES, C. A., STEIN, G. D. “On the Growth of Steam Droplets Formed in a Laval Nozzle Using Both Static Pressure and Light Scattering Measurements”, *Journal of Fluids Engineering*, v. 100, pp. 311–322, 1978. doi: 10.1115/1.3448672.
- [154] TORO, E., VÁZQUEZ-CENDÓN, M. “Flux splitting schemes for the Euler equations”, *Computers & Fluids*, v. 70, pp. 1 – 12, 2012. ISSN: 0045-7930. doi: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.08.023>.
- [155] DAVIS, S. F. “Simplified second order Godunov-type methods”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, v. 9 (3), pp. 445–473, 1988.