

**VITOR VILELA**

**PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTO  
COMPUTACIONAL E APRENDIZAGEM ESTATÍSTICA  
APLICADOS EM SIMULAÇÃO EULERIANA REFINADA  
DA COLISÃO GOTA-PARTÍCULA**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
2020

**VITOR VILELA**

**PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTO  
COMPUTACIONAL E APRENDIZAGEM ESTATÍSTICA  
APLICADOS EM SIMULAÇÃO EULERIANA REFINADA  
DA COLISÃO GOTA-PARTÍCULA**

**Tese** apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. Francisco José de Souza

Uberlândia - MG

2020

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU  
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

F383  
2020 Ferreira, Vitor Maciel Vilela, 1986-  
Planejamento de experimento computacional e aprendizagem estatística aplicados em simulação euleriana refinada da colisão gota-partícula [recurso eletrônico] / Vitor Maciel Vilela Ferreira. - 2020.

Orientador: Francisco José de Souza.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2020.106>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Engenharia mecânica. I. Souza, Francisco José de, 1973-, (Orient.). II. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

CDU: 621

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:  
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091  
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**  
Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
Mecânica

Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica,  
Uberlândia-MG, CEP 38400-902

Telefone: (34) 3239-4282 - [www.posgrad.mecanica.ufu.br](http://www.posgrad.mecanica.ufu.br) -  
[secposmec@mecanica.ufu.br](mailto:secposmec@mecanica.ufu.br)



### ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Tese de Doutorado, nº 294, COPEM				
Data:	vinte e um de fevereiro de dois mil e vinte	Hora de início:	13:30	Hora de encerramento:	16:45
Matrícula do Discente:	11613EMC015				
Nome do Discente:	Vitor Maciel Vilela Ferreira				
Título do Trabalho:	Planejamento de Experimento Computacional e Aprendizagem Estatística Aplicados em Simulação Euleriana Refinada da Colisão Gota-Partícula				
Área de concentração:	Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos				
Linha de pesquisa:	Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor				
Projeto de Pesquisa de vinculação:					

Reuniu-se no Auditório do MFlab - Bloco 5P, Campus Santa Mônica, da Universidade Federal de Uberlândia, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Dirceu Noriler - UNICAMP; Rigoberto Eleazar Melgarejo Morales - UTFPR; Carlos Henrique Ataíde - FEQUI/UFU; João Marcelo Vedovoto - FEMEC/UFU e Francisco José de Souza - FEMEC/UFU, orientador(a) do(a) candidato(a).

Iniciando os trabalhos o(a) presidente da mesa, Dr(a). Francisco José de Souza, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato(a), agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a

arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Francisco José de Souza, Professor(a) do Magistério Superior**, em 21/02/2020, às 16:42, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **João Marcelo Vedovoto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 21/02/2020, às 16:44, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **RIGOBERTO ELEAZAR MELGAREJO MORALES, Usuário Externo**, em 21/02/2020, às 16:45, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Carlos Henrique Ataide, Professor(a) do Magistério Superior**, em 21/02/2020, às 16:46, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Dirceu Noriler, Usuário Externo**, em 21/02/2020, às 16:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://www.sei.ufu.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1885872** e o código CRC **F0F6C071**.

*Aos meus ascendentes, de igual forma aos parentes, que se constituíram exemplo ao entregarem suas vidas às causas que lhes eram nobres.*

## AGRADECIMENTOS

Sou grato a Deus pelos últimos quatro anos de um relacionamento fascinante como pai e instrutor. É difícil acreditar que eu vivi tantas experiências distintas e desafiadoras nesse tempo, e com resultados tão gratificantes. *“Through You I can do anything, I can do all things; cause it's You who give me strength, nothing is impossible”*.

Agradeço ao professor Francisco José de Souza pela habilidade de lidar com personalidades extremamente distintas de orientados, sendo referencial de pesquisador e líder — não tenho dúvida alguma de que sem ele este trabalho não teria sido concluído; à comunidade de desenvolvedores e usuários do código Basilisk; aos amigos e colegas de trabalho do MFLab; à Faculdade de Engenharia Mecânica – UFU, ao Programa de Pós-graduação; à Petrobras e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Minha gratidão à família por viver comigo as alegrias deste tempo; em especial a minha esposa, Mariana, por abraçar os desafios inerentes da vida vivida sem medo.

*"No one takes it from me, but I lay it down of myself."*

*John 10.18*

*"There is no fear in love, but perfect love casts out fear."*

*1 John 4.18*

VILELA, V., **Planejamento de Experimento Computacional e Aprendizagem Estatística Aplicados em Simulação Euleriana Refinada da Colisão Gota-Partícula**. 2020. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

## RESUMO

A colisão entre gota e partícula tem atraído um crescente interesse da comunidade científica devido à alta demanda pelo controle e otimização dos processos industriais, como exemplo o craqueamento catalítico em leito fluidizado e a limpeza de gases por aspersão de gotas. A presente tese aborda esse tema em duas etapas, utilizando o código Basilisk para simulação numérica. A primeira etapa simula o impacto entre gota e partícula esférica em ambiente inicialmente quiescente. Essa etapa visa, com o auxílio do planejamento de experimento computacional e de algoritmos de *machine learning*, caracterizar a lamela formada após a colisão, analisar o escoamento interfacial por uma perspectiva energética e construir um modelo preditivo em função dos parâmetros adimensionais do escoamento. O estudo estatístico, em conformidade com a análise energética, demonstrou que os números de Reynolds e Weber apresentam um efeito negativo e positivo sobre a área da lamela formada, respectivamente. A segunda etapa da tese prospecta a combinação da mecânica dos fluidos computacional e o método *deep learning* denominado *multilayer perceptron*. Através de milhares de simulações bidimensionais da colisão entre gota e aglomerado de partículas, objetiva-se construir um banco de dados extenso para análise do efeito do arranjo das partículas sobre área superficial do líquido e a área molhada das partículas.

*Palavras-Chave: Colisão gota-partícula, Aglomerado de partículas, Basilisk, Planejamento de experimento computacional, Aprendizagem estatística.*

VILELA, V., **Design of Computer Experiment and Statistical Learning Applied on Detailed Eulerian Simulation of Droplet-Particle Collision.** 2020. Doctoral Dissertation, Federal University of Uberlândia, Uberlândia.

## ABSTRACT

The droplet-particle collision is a common phenomenon in nature and industry, covering processes from the fluid catalytic cracking to the cleaning of dusty gases. Recently, it has brought more attention from the scientific community because of the growing demand for process control and optimization. In this way, this doctoral dissertation covers in two steps the research on droplet-particle collision; both use the Basilisk code for numerical simulation. The first step simulates the impact of a droplet onto a spherical particle in an initially quiescent environment. With the assistance of the design of computer experiment and machine learning, this step aiming at characterizing the lamella formed due to the collision, analyzing the interfacial flow by a mechanical energy viewpoint, and building a predictive statistical model as a function of the flow dimensionless parameters. In agreement with our mechanical energy analysis of interfacial flows for the analyzed parameters range, the Reynolds and Weber numbers show a negative and a positive effect on the lamella area, respectively. The second step of this work prospects the bidimensional simulation of the droplet collision against a cluster of particles. It objects to build a broad database as a basis for the phenomenon analyses, notably the particles arrangement effect over the liquid surface area and particles wet area, using deep learning models.

*Keywords: Droplet-particle collision, Cluster of particles, Basilisk, Design of Computer Experiment, Statistical learning.*

## Lista de Figuras

1.1	Construção de unidade composta pelo PAC-RC na refinaria Capuava, Mauá, São Paulo. <a href="http://www.ogj.com">www.ogj.com</a> , acessado em 30 de maio de 2017. . . . .	4
1.2	PAC-RC, à direita, e conjunto de dispersores de carga <i>UltraMist</i> <sup>®</sup> , à esquerda (EINSFELDT, 2005). . . . .	5
1.3	Matriz de compatibilidade dos métodos disponíveis no <i>Basilisk</i> . <a href="http://basilisk.fr/src/compatibility">http://basilisk.fr/src/compatibility</a> , acessado em 06 de janeiro de 2020. . . . .	7
2.1	Ligações externas desconectadas de uma molécula na interface (V)apor-(L)íquido (MARCHAND <i>et al.</i> , 2011). . . . .	11
2.2	(a) <i>Gerris lacustris</i> sobre a superfície de um lago e (b) formiga interagindo com gota d'água esférica. <a href="http://keyword-suggestions.com">http://keyword-suggestions.com</a> , acessado em 11 de julho de 2016. . . . .	11
2.3	Elipsóide. <a href="https://en.wikipedia.org/wiki/Ellipsoid">https://en.wikipedia.org/wiki/Ellipsoid</a> , acessado em 16 de maio de 2016. . . . .	12
3.1	Representação geométrica de um planejamento fatorial $2^{k=3}$ (MONTGOMERY, 2013). . . . .	24
3.2	<i>Normal probability plot</i> e histograma para dois tipos de erros experimentais. . . . .	26
3.3	Exemplo gráfico do funcionamento do algoritmo <i>decision tree regression</i> (GERON, 2017). . . . .	31

3.4	<i>Multilayer perceptron</i> . <a href="https://cambridgecoding.com">https://cambridgecoding.com</a> , acessado em 10 de abril de 2019. . . . .	33
3.5	Exemplo de <i>back-propagation</i> para obtenção das derivadas parciais analíticas nó-a-nó no grafo computacional. <a href="http://cs231n.stanford.edu/">http://cs231n.stanford.edu/</a> , acessado em 10 de abril de 2019. . . . .	40
3.6	Exemplos de funções de ativação: (a) <i>sigmoid</i> , (b) tangente hiperbólica, (c) <i>rectified linear unit</i> (ReLU) e (d) <i>leaky</i> ReLU. . . . .	41
4.1	Domínio das simulações de colisão gota-partícula com formação de lamela. . . . .	44
4.2	Dimensões da gota, partícula e lamela. . . . .	46
4.3	Seção transversal da evolução temporal da lamela para $C1$ em malha com nível de refinamento máximo $l_{11}$ . . . . .	48
4.4	Seção transversal da evolução temporal da lamela para $C2$ em malha com nível de refinamento máximo $l_{12}$ . . . . .	49
4.5	Medidas da lamela para $C1$ , à esquerda, e $C2$ , à direita, para $t^* = 1, 7$ . Separação decimal em formatação inglesa. . . . .	50
4.6	Seção transversal da malha <i>octree</i> adaptativa em $C1$ . Momento inicial, acima, momento final, abaixo. Visão geral, à esquerda, ampliação, à direita. . . . .	51
4.7	Seção transversal da malha <i>octree</i> adaptativa em $C2$ . Momento inicial, acima, momento final, abaixo. Visão geral, à esquerda, ampliação, à direita. . . . .	52
4.8	Quantidade de volumes de controle da malha numérica ( <i>grid size</i> ) para níveis de refinamento de $l_9$ à $l_{12}$ em função do tempo adimensional $t^*$ . . . . .	53
4.9	Perspectiva isométrica da lamela ( $\alpha = 0,5$ ), azul, e da partícula, vermelho, em $t^* = 2, 26$ . . . . .	54
4.10	Perspectiva isométrica da lamela ( $\alpha = 0,5$ ), azul, e da partícula, vermelho, em $t^* = 2, 38$ . . . . .	55

4.11 Vista inferior da lamela, azul, se estendendo sobre a partícula, vermelho, para $C1$ e $C2$ em $t^* = 1,7$ e nível de refinamento $l11$ . . . . .	56
4.12 Vista frontal da lamela, azul, para $C1$ e $C2$ em $t^* = 1,7$ e nível de refinamento $l11$ . . . . .	56
4.13 Espessura adimensional do filme líquido sobre a partícula, $h^*/D_d$ , em função do tempo adimensional, $t^*$ , para níveis de refinamento de malha variados. . . . .	58
4.14 Perfis numéricos, contorno em linha, e experimentais, fundo semitransparente, para $C1$ . Resultados numéricos correspondentes ao nível de refinamento $l11$ . . . . .	59
4.15 Perfis numéricos, contorno em linha, e experimentais, fundo semitransparente, para $C2$ . Resultados numéricos correspondentes ao nível de refinamento $l11$ . . . . .	60
4.16 (a) Diâmetro de base e (b) altura adimensional da lamela para o tempo adimensional $t^* = 2,75$ . Dados experimentais com barras de erro de $\pm 10\%$ . . . . .	61
4.17 Vista frontal, em corte, da lamela e da partícula em $t^* \approx 1$ . Casos extremos do planejamento fatorial: à esquerda, $Re = 10^3$ $We = 10^2$ , e à direita, $Re = 10^4$ $We = 10^3$ . . . . .	62
4.18 Cenários utilizados como réplicas no planejamento fatorial. Variação do formato inicial da gota na simulação e de sua distância até a partícula: gota (cinza), partícula (preto). . . . .	63
4.19 (a) Esquema ilustrativo-conceitual do elipsóide. (b) Formato da gota em $t^* = 0$ : experimento de Banitabaei e Amirfazli (2017), fundo preto, gota numérica com esfericidade $\varphi = 0,8$ , contorno cinza. . . . .	64
4.20 <i>Normal probability plot</i> do resíduo juntamente com seu histograma.	65
4.21 Variação da área adimensional da lamela em função do tempo adimensional e dos números de Reynolds e Weber. O planejamento fatorial é realizado com foco no instante $t^* \approx 1$ . . . . .	66

4.22 Energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de baixo número de Reynolds e baixo número de Weber ( <i>C1</i> ). . . . .	69
4.23 Energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de alto número de Reynolds e alto número de Weber ( <i>C2</i> ) . . . . .	70
4.24 Balanço de energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de baixo número de Reynolds e baixo número de Weber ( <i>C1</i> ) . . . . .	73
4.25 Balanço de energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de alto número de Reynolds e alto número de Weber ( <i>C2</i> ) . . . . .	74
4.26 Coeficiente de determinação dos modelos preditivos da área adimensional da lamela. . . . .	76
4.27 <i>Root Mean Squared Error</i> dos modelos preditivos da área adimensional da lamela. . . . .	77
4.28 Erro relativo médio (MAPE) dos modelos preditivos da área adimensional da lamela. . . . .	78
4.29 Coeficiente de determinação e <i>Mean Squared Error</i> dos modelos elementares preditivos da área adimensional da lamela. . . . .	80
4.30 Coeficiente de determinação e <i>Mean Squared Error</i> dos modelos de grupo preditivos da área adimensional da lamela. . . . .	81
4.31 Domínio das simulações bidimensionais da colisão gota-partículas, com origem situada no ponto central e inferior do domínio. A linha pontilhada representa a zona de partículas. . . . .	83
4.32 Refinamento inicial da gota e da zona de partículas para o domínio padrão ( <i>a</i> ), e o estendido ( <i>b</i> ). Os tons mais escuros indicam regiões de malha mais refinada. . . . .	84

4.33	Histograma destacando a distribuição uniforme dos números de Reynolds ( <i>a</i> ) e Weber ( <i>b</i> ) selecionados aleatoriamente para a construção dos casos simulados. . . . .	85
4.34	Histograma destacando a distribuição uniforme do número de partículas ( <i>a</i> ), diâmetro da primeira partícula ( <i>b</i> ), e suas respectivas posições ( <i>c</i> ) e ( <i>d</i> ), selecionados aleatoriamente nas simulações. . . . .	86
4.35	Histograma de $X_{p2}$ antes ( <i>a</i> ) e depois ( <i>b</i> ) do deslocamento para processamento do banco de dados. Os cenários com apenas uma partícula são representados por $X_{p2} = 0$ . . . . .	87
4.36	Posicionamento aleatório das partículas no domínio padrão de simulação para quatro casos distintos. . . . .	88
4.37	<i>PDF</i> das variáveis de entrada $C_{sg}$ , $C_{ls}$ e $A_{ls}$ estimada com base nas 4.000 configurações de simulação distintas geradas aleatoriamente. . . . .	89
4.38	Matriz de correlação utilizando o coeficiente de Spearman ( <i>a</i> ), re-escala de cores para a faixa de interesse ( <i>b</i> ). . . . .	92
4.39	<i>Box plot</i> da média e do desvio-padrão temporal da área interfacial de sólido molhada. . . . .	93
4.40	<i>Box plot</i> da média e do desvio-padrão temporal da área interfacial de líquido. . . . .	93
4.41	Interação entre gota e aglomerado de partículas em quatro instantes <i>i</i> , <i>ii</i> , <i>iii</i> e <i>iv</i> de um cenário aleatório do banco de dados padrão. . . . .	94
4.42	<i>Mean squared error</i> de teste dos modelos <i>dummy</i> e de <i>machine learning</i> . . . . .	98
4.43	<i>Loss function</i> de treinamento e validação dos modelos de <i>deep learning</i> para STD(Wa): ( <i>a</i> ) sem <i>data augmentation</i> , ( <i>b</i> ) com <i>data augmentation</i> . . . . .	99
4.44	Histograma dos dados de saída e número de partículas do <i>dataset</i> após o corte de <i>outliers</i> e valores próximos de zero ( <i>a</i> ), <i>loss function</i> de treinamento e validação dos modelos de <i>deep learning</i> para STD(Wa) com corte ( <i>b</i> ). . . . .	100

4.45 *Loss function* de treinamento e validação dos modelos de *deep learning* para AVG(Wa) e STD(Wa) conjunto: (a) 6 variáveis de entrada, (b) 18 variáveis de entrada. *Loss function* para AVG(La) e STD(La) conjunto: (c) 6 variáveis de entrada, (d) 18 variáveis de entrada. . . . . 102

## Lista de Tabelas

2.1	Volume e área da esfera e do elipsóide. . . . .	13
4.1	Dimensões e propriedades físicas utilizadas na simulação da colisão gota de água com partícula de vidro em ar. . . . .	45
4.2	Casos simulados para validação. Parâmetros baseados nas proprie- dades do líquido. . . . .	46
4.3	Valores de $A^*$ obtidos por simulação. . . . .	62
4.4	Síntese das variáveis de saída para a amostra de 4.000 simulações. .	91
4.5	Coeficientes de correlação de Spearman. . . . .	92
4.6	Percentual relativo das variáveis de saída para a amostra de 1.000 simulações para o domínio estendido em relação ao banco de dados padrão. . . . .	94
4.7	Percentual relativo das variáveis de saída para a amostra de 1.000 simulações para o domínio estendido e refinado em relação ao banco de dados de domínio estendido. . . . .	94
4.8	Percentual relativo das variáveis de saída para a amostra de 1.000 simulações em relação à amostra de 4.000 simulações em relação ao domínio padrão. . . . .	95

## Lista de Símbolos

### Abreviações

<i>FCC</i>	- Craqueamento catalítico em leito fluidizado
<i>PAC – RC</i>	- Conversor avançado da Petrobras no craqueamento de resíduo
<i>MPI</i>	- Message Passing Interface
<i>VOF</i>	- Volume of Fluid
<i>DOE</i>	- Planejamento de experimento
<i>MSE</i>	- Mean Squared Error
<i>RMSE</i>	- Root Mean Squared Error
<i>MAE</i>	- Mean Absolute Error
<i>MSLE</i>	- Mean Squared Logarithmic Error
<i>MAPE</i>	- Mean Absolute Percentage Error
<i>API</i>	- Application Programming Interface
<i>MLP</i>	- Multilayer Perceptron
<i>CNN</i>	- Convolutional Neural Network
<i>SGD</i>	- Stochastic Gradient Descent
<i>ReLU</i>	- Rectified Linear Unit
<i>SELU</i>	- Scaled Exponential Linear Unit
<i>RAM</i>	- Random Access Memory
<i>PLIC</i>	- Piecewise Linear Interface Capturing
<i>CART</i>	- Decision Tree Regressor
<i>SVR</i>	- Support Vector Regressor
<i>PDF</i>	- Função densidade de probabilidade
<i>AVG(Wa)</i>	- Média temporal da área de sólido molhada
<i>STD(Wa)</i>	- Desvio-padrão da área de sólido molhada
<i>AVG(La)</i>	- Média temporal da área interfacial do líquido
<i>STD(La)</i>	- Desvio-padrão da área interfacial do líquido
<i>VI</i>	- Quantidade de variáveis independentes

**Grego**

$\gamma$	-	Coeficiente de tensão superficial
$\kappa$	-	Curvatura da interface líquido-gás
$\delta$	-	Deslocamento ou Tensor delta de Kronecker
$\tau$	-	Tensor das tensões viscosas
$\rho$	-	Densidade
$\mu$	-	Viscosidade dinâmica ou Média populacional
$\nabla$	-	Operador gradiente
$\nabla \cdot$	-	Operador divergente
$\partial_t$	-	Derivada parcial temporal
$\Delta$	-	Espaçamento da malha ou Variação de uma propriedade
$\Delta t$	-	Passo temporal
$\Delta x$	-	Comprimento do volume de controle
E	-	Efeito de um fator
$\alpha$	-	Nível de significância
$\sigma$	-	Desvio-padrão ou Função de ativação
$\eta$	-	Taxa de aprendizado
$\theta$	-	Ângulo de contato
$\varphi$	-	Nível de esfericidade
$\lambda$	-	Fator dimensionador de domínio computacional

**Latino**

$c$	- Fração volumétrica
$E$	- Energia
$A$	- Área interfacial líquido-gás
$T$	- Temperatura
$V$	- Volume
$N$	- Número de moléculas ou Número de dados
$W$	- Peso físico ou Matriz de coeficientes
$r$	- Raio
$D_r$	- Razão de diâmetros gota-partícula
$D_d$	- Diâmetro da gota
$D_p$	- Diâmetro da partícula
$q$	- Quantidade de movimento linear
$u$	- Velocidade
$u_f$	- Velocidade na face
$p$	- Pressão
$a$	- Aceleração
$C_s$	- Velocidade do som
$S_c$	- Termo fonte da equação advectiva da fração volumétrica
$l$	- Fase líquida ou Nível de refinamento
$g$	- Fase gasosa ou Aceleração da gravidade
$F_c$	- Fluxo advectivo da fração volumétrica
$F_{cq}$	- Fluxo advectivo da quantidade de movimento linear
$i$	- Fase do escoamento multifásico
$k$	- Número de fatores do planejamento experimental
$e$	- Erro ou resíduo estatístico
$y$	- Referência da verdade
$\hat{y}$	- Valor predito
$\bar{E}$	- Efeito médio
$t$	- Valor da distribuição <i>t-student</i>
$n$	- Número de réplicas ou Grau da combinação linear
$S^2$	- Variância amostral
$w$	- Coeficientes de uma combinação linear
$S$	- Soma dos resíduos ao quadrado
$x$	- Variável independente
$\bar{x}$	- Média da variável independente
$z$	- Variável dependente padronizada
$L1$	- Norma valor absoluto
$L2$	- Norma Euclidiana
$L$	- Loss function
$A^*$	- Área adimensional
$t^*$	- Tempo adimensional
$V_d$	- Velocidade inicial da gota
$H$	- Altura da lamela
$H^*$	- Altura adimensional da lamela

$D_b$	-	Diâmetro de base da lamela
$D_b^*$	-	Diâmetro de base adimensional da lamela
$h$	-	Espessura de filme líquido
$h^*$	-	Espessura adimensional de filme líquido
$R^2$	-	Coefficiente de determinação
$M$	-	Quantidade de células na malha computacional
$Re$	-	Número de Reynolds
$We$	-	Número de Weber
$Oh$	-	Número de Ohnesorge
$CI$	-	Intervalo de confiança
$E_G$	-	Energia potencial gravitacional
$E_k$	-	Energia cinemática
$E_\gamma$	-	Energia interfacial
$m$	-	Massa
$C_{sg}$	-	Fração volumétrica de sólido
$C_{ls}$	-	Fração volumétrica de líquido em relação ao sólido
$A_{ls}$	-	Razão de área inicial entre gota e partículas
$N_p$	-	Número de partículas
$X_p$	-	Coordenada $x$ da partícula
$Y_p$	-	Coordenada $y$ da partícula
$T$	-	Tempo total de simulação
$T^*$	-	Tempo total adimensional de simulação
$r_{xy}$	-	Coefficiente de correlação de Pearson
$r_s$	-	Coefficiente de correlação de Spearman

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
1.1	Colisão gota-partícula na indústria do petróleo . . . . .	3
1.1.1	Craqueamento catalítico em leito fluidizado . . . . .	5
1.2	Modelo numérico-computacional . . . . .	6
1.2.1	Basilisk . . . . .	7
1.3	Organização da tese . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Fenomenologia</b>	<b>10</b>
2.1	Física dos escoamentos interfaciais . . . . .	10
2.2	Dinâmica da colisão gota-partícula . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	<b>17</b>
3.1	Formulação conservativa das equações de transporte . . . . .	17
3.1.1	Procedimento numérico . . . . .	19
3.2	Planejamento de experimento computacional . . . . .	22
3.3	Aprendizagem estatística . . . . .	27
3.3.1	Machine learning . . . . .	28
3.3.2	Deep learning . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>43</b>
4.1	Caracterização da lamela . . . . .	43
4.1.1	Configuração . . . . .	44
4.1.2	Simulação numérica . . . . .	46
4.1.3	Validação . . . . .	56

	1
4.1.4	Planejamento de experimento computacional . . . . . 62
4.1.5	Energia mecânica do escoamento . . . . . 67
4.1.6	Machine learning . . . . . 74
4.2	Aglomerado de partículas . . . . . 82
4.2.1	Configuração . . . . . 82
4.2.2	Deep learning . . . . . 95
<b>5</b>	<b>Conclusão</b> <b>104</b>
<b>6</b>	<b>Trabalhos futuros</b> <b>109</b>
	<b>Referências bibliográficas</b> <b>112</b>

# CAPÍTULO I

## Introdução

A colisão entre gotas e partículas é um fenômeno físico amplamente encontrado na natureza e presente na indústria desde seus primórdios, mas atualmente esse tema tem atraído um crescente interesse pela comunidade científica devido à alta demanda pelo controle e otimização dos processos industriais, como exemplo o craqueamento catalítico em leito fluidizado, (MALGARINOS; NIKOLOPOULOS; GAVAISES, 2017b), e a limpeza de gases por aspersão de gotas, (SHRAIBER; DUBROVSKY; PODVYSOTSKY, 2014). O estudo numérico de fenômenos interfaciais de grande complexidade tornou-se recentemente possível em virtude dos avanços de métodos numérico-computacionais de alta fidelidade (LING *et al.*, 2017; FUSTER; POPINET, 2018).

Esta tese de doutorado possui dois objetivos: *I.* o estudo da física e a modelagem numérica da colisão gota-partícula utilizando simulação tridimensional detalhada, planejamento de experimento computacional e *machine learning*, e *II.* a criação de um extenso banco de dados obtidos a partir de várias simulações computacionais bidimensionais da colisão entre gota e aglomerado de partículas para análise de correlações e criação de modelos preditivos utilizando *deep learning*.

A pesquisa e os desenvolvimentos têm por maior propósito aprimorar os processos industriais onde essas interações multifásicas ocorrem, através do

entendimento detalhado de sua dinâmica e da elaboração de modelos numéricos para simulações em escala industrial. Tem-se especial atenção no processo de craqueamento catalítico da indústria do petróleo, onde câmaras de dispersão são utilizadas para pulverizar jatos líquidos de óleo, cujas gotas colidem no *riser* com corrente cruzada de partículas catalisadoras.

### **1.1 Colisão gota-partícula na indústria do petróleo**

O processo de quebra de moléculas de hidrocarbonetos oriundos do petróleo em produtos de elevado valor comercial tem sido explorado na indústria petroquímica desde o início do século XX. Inicialmente, o craqueamento era termo ativado; posteriormente, substâncias não consumíveis e aceleradoras das reações químicas foram introduzidas, dando início a uma série de processos de craqueamento catalítico: em leito fixo, leito deslizante e leito fluidizado.

As unidades de craqueamento catalítico em leito fluidizado (FCC) operam desde então basicamente com duas correntes de fluido, uma de catalisador transportado pneumaticamente e recuperado após a seção de reação química e outra de hidrocarbonetos provenientes da destilação do petróleo, comumente referenciados como carga.

A primeira unidade de FCC a entrar em operação era alimentada com a carga no estado de vapor. Esse processo gerava um excesso de energia térmica, que era extraído através de resfriadores externos. A conseguinte introdução da carga líquida em detrimento da gasosa significou um avanço, dispensando os resfriadores. No entanto, apesar do aumento de eficiência energética, a fragmentação do jato líquido seguido da vaporização de suas gotas trouxe maior complexidade ao processo físico-químico.

No Brasil, o aumento da produção de petróleo de baixa qualidade em função da escassez dos recursos naturais leves na Bacia de Campos demandou o desenvolvimento de tecnologias capazes de craquear os hidrocarbonetos oriundos do resíduo da destilação do petróleo. Um dos principais desafios era projetar equipamentos e processos capazes de minimizar a formação de coque e gás combustível

e maximizar a produção de produtos nobres, como a gasolina, o gás liquefeito de petróleo e o óleo diesel.

Segundo o Relatório de Tecnologia da Petrobras de 2013, o conversor avançado da Petrobras no craqueamento de resíduo (PAC-RC) foi a resposta a essa demanda. Como resultado de desenvolvimentos multidisciplinares, ele havia sido implantado até 2013 em três unidades da companhia, somando 20 mil  $m^3/dia$  de capacidade de craqueamento desses resíduos Fig. 1.1.



Figura 1.1: Construção de unidade composta pelo PAC-RC na refinaria Capuava, Mauá, São Paulo. [www.ogj.com](http://www.ogj.com), acessado em 30 de maio de 2017.

A compreensão progressiva dos processos físico-químicos encontrados nas unidades de craqueamento catalítico tem sido o resultado de quase uma década de pesquisas e desenvolvimentos tecnológicos. Apesar de ser considerada consolidada, a tecnologia PAC-RC continua evoluindo, visando o aumento de sua eficiência (EINSFELDT, 2005).

Einsfeldt (2005) afirma que os desafios existentes na indústria do petróleo, especialmente em função da disponibilidade decrescente de matéria-prima de boa qualidade, serão superados com a melhor compreensão dos fenômenos envolvidos em seus processos e equipamentos, e suas conseqüentes otimizações. É nesse contexto que a presente tese apresenta sua contribuição.

### 1.1.1 Craqueamento catalítico em leito fluidizado

Einsfeldt (2005) desenvolveu um modelo matemático para as variáveis operacionais do PAC-RC. Em especial correlação com o presente trabalho, a autora descreveu o processo de craqueamento catalítico do PAC-RC e o dispersor de carga *UltraMist*<sup>®</sup>.

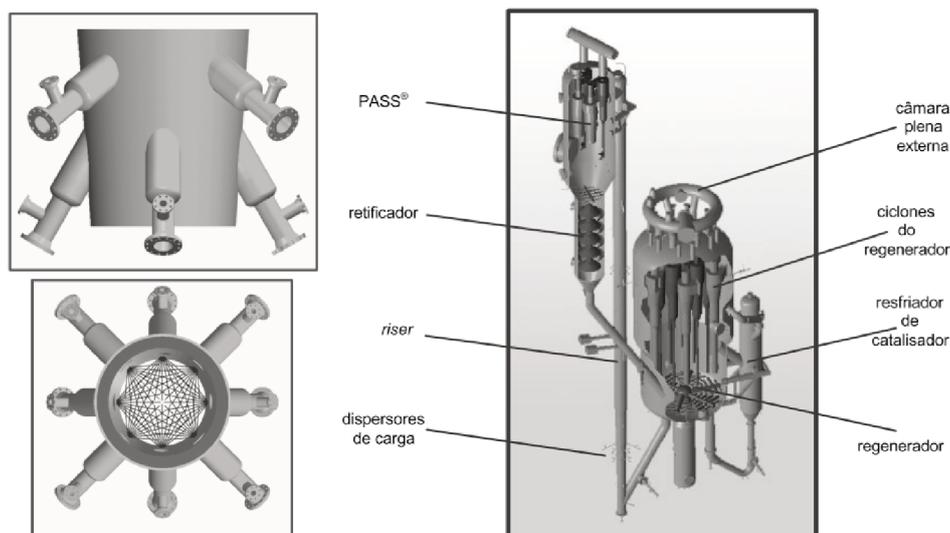


Figura 1.2: PAC-RC, à direita, e conjunto de dispersores de carga *UltraMist*<sup>®</sup>, à esquerda (EINSFELDT, 2005).

Conforme mostra a Figura 1.2, o PAC-RC forma um ciclo para o catalisador, admite carga bruta e exporta produtos de interesse comercial. Saindo do regenerador, o catalisador é transportado ascendentemente por uma corrente de vapor superaquecido à montante dos dispersores de carga *UltraMist*<sup>®</sup>. Nesses, a carga é injetada no estado líquido e sofre pulverização na câmara de mistura. À medida que os hidrocarbonetos atomizados são vaporizados no *riser*, eles são craqueados sob influência da corrente de catalisador. No sistema de separação *PASS*<sup>®</sup>, os produtos das reações químicas são separados do catalisador, o qual retorna ao regenerador.

A carga é distribuída aos dois grupos de dispersores de inclinações distintas por *headers* independentes. Nestes dispersores, vapor superaquecido de média pressão é inserido axialmente. Este escoamento de vapor superaquecido cruza o escoamento de carga, no estado líquido, de forma perpendicular. Tal con-

dição de escoamento cruzado de jato líquido, rompe a estrutura intacta do líquido, atomizando-a. Na sequência, a nuvem de líquido atomizado em cada dispersor passa por um rasgo no final de sua câmara de mistura cônica e assume um perfil de leque. A Figura 1.2 ilustra esses oito dispersores distribuídos equidistante e radialmente, projetados para formarem a rede homogênea de pulverização no *riser*. Essa configuração visa à maior exposição da nuvem pulverizada dos hidrocarbonetos à corrente de catalisador.

Einsfeldt (2005) enfatizou a influência do dispersor de carga do sistema PAC-RC na eficiência e na correta conversão dos hidrocarbonetos pesados em produtos de elevado valor comercial.

No *riser*, a região de saída da câmara de atomização apresenta alta frequência de colisão de partículas devido às interações entre os leques de líquido atomizado que saem dos dispersores. Além disso, a aspensão de carga líquida, devido ao contato com a corrente quente bifásica vapor-catalisador, tem redução na penetração no *riser*, bem como redução do tempo de vaporização das gotas. O presente trabalho tem como objetivo compreender a colisão gota-partícula com vistas à aplicação futura do fenômeno térmico de vaporização da carga-líquida pulverizada.

## 1.2 Modelo numérico-computacional

Quando se objetiva extrair informações integrais (e.g., distribuição do tamanho de gota) e de campo (e.g., distribuição espacial da energia cinética turbulenta) de escoamentos multifásicos, é essencial utilizar modelos numérico-computacionais.

Visando escolher corretamente um conjunto de métodos, dentre os existentes para simulação de escoamentos interfaciais, é necessário considerar aquele que equilibra fidedignidade física e viabilidade computacional da solução. Basicamente, quatro critérios devem ser atendidos:

1. Forma conservativa das equações de transporte;

2. Método de captura e transporte da interface pouco difusivo;
3. Estratégia de controle do avanço temporal e do tamanho da malha numérica-computacional;
4. Algoritmo de paralelização da simulação.

### 1.2.1 *Basilisk*

O código de mecânica dos fluidos computacional denominado *Basilisk* é baseado em malha quad/octree adaptativa, apta ao processamento paralelo com equilíbrio dinâmico da carga entre processos. Ele tem sido aplicado à simulação de escoamentos de múltiplas naturezas, no entanto, no que concerne ao escopo deste trabalho, os métodos de solução numérica das leis de conservação, Navier-Stokes, Volume de Fluido (VOF) e tensão superficial são os mais relevantes.

A Figura 1.3 apresenta a matriz de compatibilidade de seus métodos disponíveis. Por exemplo, atualmente não é possível utilizar processamento paralelo (MPI) com definições de sólidos (*Solids*) no domínio de simulação.

Id	Feature	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	1D	-														
2	2D		-													
3	3D			-												
4	Solids	maybe	yes	yes	-											
5	MPI	maybe	yes	yes	no	-										
6	Periodic BC	yes	yes	yes	maybe	yes	-									
7	Saint-Venant	yes	yes	yes	yes	yes	yes	-								
8	Navier-Stokes	maybe	yes	yes	yes	yes	yes		-							
9	Conservation laws	yes	yes	yes	yes	yes	yes			-						
10	Compressible flows	maybe	yes	yes	yes	yes	yes				-					
11	Volume-Of-Fluid	no	yes	yes	maybe	yes	yes		yes		no	-				
12	Height functions	no	yes	yes	maybe	yes	yes		yes		yes	yes	-			
13	Surface tension	no	yes	yes	maybe	yes	yes		yes		no	yes	yes	-		
14	Metric	yes	yes	yes	maybe	yes	yes	yes	no	maybe	maybe	maybe	no	no	-	
15	Adaptivity	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	-
16	dump/restore	yes	yes	yes	no	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes

Figura 1.3: Matriz de compatibilidade dos métodos disponíveis no *Basilisk*. <http://basilisk.fr/src/compatibility>, acessado em 06 de janeiro de 2020.

Duas abordagens estão disponíveis para a modelagem de escoamentos

interfaciais: a solução numérica das equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis na forma não-conservativa, baseada no arranjo centrado e colocalizado das variáveis, e a solução da forma conservativa (FUSTER; POPINET, 2018) para escoamentos a qualquer Mach (Critério 1). Ambas utilizam o método VOF para distinção e acompanhamento das fases no escoamento.

A utilização da abordagem que contempla a forma conservativa das equações de Navier-Stokes é fundamental para a minimização de erros na posição da interface causados pela dissipação numérica e por correntes espúrias, e que se não forem controlados, propagam e se intensificam com o tempo. Sua importância é tão grande quanto maior for o salto de densidade entre as fases do escoamento. A implementação desse algoritmo é extremamente recente em diversos códigos computacionais, assim como a consolidação do método.

Para um campo de fração volumétrica,  $c$ , capaz de descrever interfaces esbeltas, a aproximação da equação de advecção de  $c$  pode ser realizada com o esquema conservativo, não-difusivo, denominado *Piecewise Linear Interface Capturing* (Critério 2). Esse é um método geométrico, fidedigno de captura e transporte da interface.

O termo de aceleração da equação de transporte de quantidade de movimento engloba a parcela proveniente da modelagem da tensão superficial. O coeficiente de tensão superficial,  $\gamma$ , é um parâmetro dependente do par de fluidos e a curvatura da interface,  $\kappa$ , é calculada com base no campo de fração volumétrica. Uma interpretação macroscópica da tensão superficial relaciona seus efeitos com o salto de pressão existente entre as fases, o qual é proporcional a  $\gamma\kappa$ . Existe uma gama de modelos para o cálculo da curvatura da interface, sendo cada um indicado para uma configuração específica de escoamento ou um conjunto de métodos numéricos adotados; no Basilisk, tem-se a função `altura`.

O avanço temporal das simulações é um dos parâmetros mais importantes na definição da viabilidade computacional do conjunto de métodos numérico-computacionais. Em escoamentos interfaciais, ele é influenciado pelo período de oscilação da menor onda de capilaridade. Quanto mais rígida a interface maior será

sua frequência de oscilação e menor será a velocidade de avanço da simulação. Por outro lado, baseado no número de Weber, quanto menos rígida a interface, menor serão as forças resistivas às forças inerciais do escoamento, intensificando a fragmentação e a consequente multiplicação das escalas do escoamento, seguido pelo refinamento de malha e do passo de tempo (Critério 3).

Com relação ao processamento paralelo, o Basilisk possui um algoritmo eficiente (Critério 4). Sua principal característica consiste na possibilidade do balanceamento dinâmico da carga ocorrer no nível mais fino da estrutura quad/octree. Isso é essencial em escoamentos que apresentam alto grau de heterogeneidade na distribuição de fases ou grandes diferenças entre as dimensões do domínio.

### 1.3 Organização da tese

Esta tese inicia-se com a apresentação da física dos escoamentos interfaciais na Seção 2.1 e da dinâmica da colisão gota-partícula na Seção 2.2. O Capítulo 3 descreve as teorias e abordagens relacionadas à formulação conservativa das equações de transporte na Seção 3.1, ao planejamento de experimento computacional na Seção 3.2, e à aprendizagem estatística na Seção 3.3. Os resultados são divididos em duas partes: caracterização tridimensional da lamela na simulação da interação entre gota e partícula, com criação de modelo preditivo baseado em *machine learning*, Seção 4.1; e estudo da colisão entre gota e aglomerado de partículas com base em simulação bidimensional e *deep learning*, Seção 4.2. Por fim, os Capítulos 5 e 6 apresentam as conclusões da tese e as sugestões de trabalhos futuros, respectivamente.

# CAPÍTULO II

## Fenomenologia

### 2.1 Física dos escoamentos interfaciais

O entendimento da capilaridade e da física dos escoamentos interfaciais envolve o conhecimento de termodinâmica, mecânica dos fluidos e física estatística. Desta forma, esta seção apresenta uma visão geral do conceito mais importante relacionado aos escoamentos interfaciais: a tensão superficial. Tensão superficial,  $\gamma$ , é a energia,  $E$ , necessária para incrementar em uma unidade a área interfacial,  $A$ , de um sistema multifásico (MARCHAND *et al.*, 2011),

$$\gamma = \left( \frac{\partial E}{\partial A} \right)_{T,V,N}, \quad (2.1)$$

mantendo-se constante a temperatura,  $T$ , o volume,  $V$ , e o número de moléculas,  $N$ . Ela é comumente expressada em termos de força por unidade de comprimento,  $N/m$ , ou energia por unidade de área,  $J/m^2$ .

Na perspectiva termodinâmica, toda molécula na região interfacial tem suas ligações externas desconectadas, o que promove o aumento da energia livre Fig. 2.1. A tensão superficial é proporcional à energia dessas ligações e possui orientação paralela à interface.

O coeficiente de tensão superficial,  $\gamma$ , depende do par de fluidos que

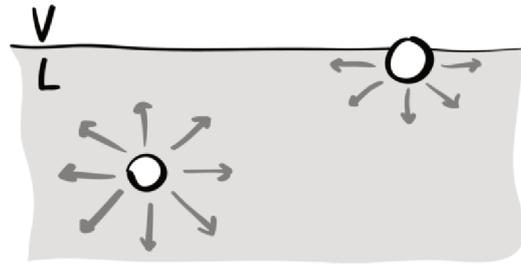


Figura 2.1: Ligações externas desconectadas de uma molécula na interface (V)apor-(L)íquido (MARCHAND *et al.*, 2011).

constitue a interface (e.g. ar-água, ar-óleo ou óleo-água) e é avaliado em função da força de tensão superficial que age em uma superfície plana. Para superfícies curvas, a intensidade da tensão superficial se modifica com sua curvatura.

Adicionalmente, esse coeficiente varia com a temperatura do fluido e com a presença de contaminantes. Por exemplo, o coeficiente de tensão superficial de um sistema limpo ar-água pode ser aproximado linearmente com  $\pm 99\%$  de acurácia, considerando-se um intervalo de temperatura entre 0 e 100 °C (WHITE, 2006),

$$\gamma \left( \frac{J}{m^2} \right) \approx 0,076 - 0,00017 \cdot T (^{\circ}C), \quad (2.2)$$



(a)



(b)

Figura 2.2: (a) *Gerris lacustris* sobre a superfície de um lago e (b) formiga interagindo com gota d'água esférica. <http://keyword-suggestions.com>, acessado em 11 de julho de 2016.

O *Gerris lacustris* repousando em água, Fig. 2.2, é um bom cenário para ilustrar o conceito energético da tensão superficial. Levando-se em conta o peso do inseto,  $W$ , e analisando-se a água como um meio elástico, a energia

potencial elástica de sua superfície deformada pode ser expressada de acordo com o trabalho realizado pelo peso do inseto  $E = W \cdot \delta$ , onde  $\delta$  é a diferença de nível d'água próximo às patas do inseto. A tensão superficial equivale, portanto, à energia potencial elástica aplicada para deformar a superfície d'água dividido pelo correspondente incremento de área dessa superfície.

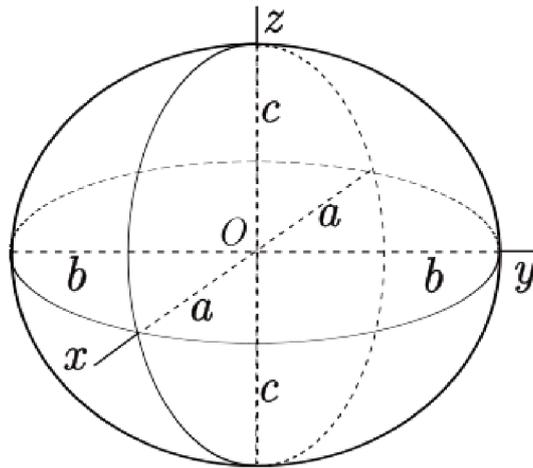


Figura 2.3: Elipsóide. <https://en.wikipedia.org/wiki/Ellipsoid>, acessado em 16 de maio de 2016.

Uma vez que todo sistema livre tende a se mover para seu estado de mínima energia, a definição de tensão superficial também implica que um sistema bifásico libera energia para atingir seu ponto de menor área interfacial. Com o objetivo de ilustrar esse conceito, estima-se a energia liberada durante a deformação de um sistema gás-líquido, inicialmente elipsoidal, para a forma esférica Fig. 2.3.

A esfera possui a menor área interfacial entre todas as formas geométricas tridimensionais de igual volume, o que lhe confere a menor energia interfacial. A área do elipsóide, por sua vez, pode ser aproximada pela equação apresentada na Tabela 2.1, com erro correspondente de 1% para  $p = 1,6075$  (CAO; VERBEEK, 2013). Na Tabela 2.1,  $r$  é o raio da esfera, e  $a$ ,  $b$  e  $c$  são os comprimentos do elipsóide ilustrados na Figura 2.3.

Considerando um raio  $r = 1 \text{ mm}$ , o volume e a área da esfera são iguais à  $4,19 \text{ mm}^3$  e  $12,57 \text{ mm}^2$ , respectivamente. Para um sistema de volume constante, a área aproximada do elipsóide é de  $12,63 \text{ mm}^2$ ; portanto, as áreas inicial e final diferem 0,5%. Com base no coeficiente de tensão superficial do ar-

Tabela 2.1: Volume e área da esfera e do elipsóide.

	Esfera	Elipsóide
Volume	$\frac{4}{3}\pi r^3$	$\frac{4}{3}\pi abc$
Área	$4\pi r^2$	$4\pi \sqrt{\frac{a^p b^p + a^p c^p + b^p c^p}{3}}$

água à 20 °C,  $\gamma = 7,26 \cdot 10^{-2} \text{ J/m}^2$  Eq. 2.2, a energia correspondente à mudança de área é de  $4,36 \cdot 10^{-9} \text{ J}$ .

Em escoamentos interfaciais, a interface deformada pode acelerar o fluido vizinho por liberação de energia, diminuindo sua tensão superficial; de maneira contrária, a desaceleração do fluido nas proximidades da interface (i.e., perda de energia cinética) pode prover a energia necessária para sua deformação, aumentando a tensão superficial.

## 2.2 Dinâmica da colisão gota-partícula

Os efeitos da colisão gota-partícula dependem da dinâmica do escoamento multifásico, incluindo a natureza do contato líquido-sólido. A gota pode se fragmentar em múltiplas porções de líquido, com ou sem a formação de lamela; rebater ou permanecer sobre a partícula (MITRA *et al.*, 2013b).

Quando ocorre a formação de lamela, suas características e o percentual da superfície molhada da partícula são funções da razão de diâmetro gota-partícula  $D_r = D_d/D_p$ , dos números de Weber ( $We$ ) e Reynolds ( $Re$ ), e da molhabilidade do sólido, expressada através da relação hidrofílica ou hidrofóbica com a fase líquida.

A transferência entre energia cinética do líquido para energia interfacial da gota durante o impacto causa sua deformação, com respectivo aumento de área da interface bifásica, e é função do coeficiente de tensão superficial. Por outro lado, a transferência entre energia cinética do líquido para energia cinética do gás é função da viscosidade dinâmica do gás. Esses dois potenciais de transferência energética do escoamento multifásico são manifestados nos números de Weber e Reynolds, respectivamente.

Uma razão de diâmetro gota-partícula tendendo a zero se aproxima do cenário da colisão da gota com uma superfície plana, com formação típica de filme líquido e de estruturas com formato de coroa (ROISMAN; BERBEROVIĆ; TROPEA, 2009). Apesar de extensa a literatura sobre a interação de gotas com superfícies planas, ainda existem pontos abertos na interação com superfícies esféricas. Banitabaei e Amirfazli (2017) listou três sub-áreas de interesse científico atual: efeitos da colisão para o intervalo  $1 < D_r < 3$ , para o qual há possibilidade de formação de lamela; sensibilidade da geometria da lamela com relação à molhabilidade, expressada através do ângulo de contato no ponto triplo líquido-sólido-gás; e efeito da velocidade de impacto. Adicionalmente, os autores estudaram uma faixa mais ampla do número de Weber, 0,1 até 1.150, do que o encontrado na literatura.

A seguir são apresentados em ordem cronológica, entre os anos de 1992 a 2017, alguns trabalhos experimentais, teóricos e numéricos relacionados ao estudo mecânico da colisão gota-partícula. Outros estudos mais recentes têm dado ênfase na colisão com múltiplas partículas (MALGARINOS; NIKOLOPOULOS; GAVAISES, 2017c), nos fenômenos térmicos e evaporativos (MITRA *et al.*, 2018; MALGARINOS; NIKOLOPOULOS; GAVAISES, 2017a), e no impacto com meios porosos (AJITH, 2019).

Dubrovsky, Podvysotsky e Shraiber (1992) estudaram experimental e numericamente a interação entre gotas e partículas com diferentes tamanhos, em uma faixa de velocidade de impacto de moderada à alta. Os autores verificaram que os efeitos da colisão incluíam a fragmentação da gota em frações de líquidos dispersos, e correlacionaram os parâmetros do escoamento com as dimensões e as velocidades dos fragmentos gerados pelo impacto.

Bakshi, Roisman e Tropea (2007) investigaram teórica e experimentalmente o impacto de uma gota com uma esfera com foco na descrição temporal e espacial do filme líquido formado sobre o sólido e na correlação do número de Reynolds e da razão de diâmetros gota-esfera com a dinâmica do filme. Os autores classificaram a dinâmica do escoamento em três etapas: a fase inicial de deforma-

ção da gota, uma etapa dominada pelos efeitos inerciais, e outra etapa dominada pelos efeitos viscosos. O trabalho demonstrou que para uma razão de diâmetros fixa, a curva adimensional temporal da espessura do filme líquido é única, e que o tempo de transição para a etapa dominada pelos efeitos viscosos é função do número de Reynolds.

Antonini, Amirfazli e Marengo (2012) realizaram experimentos para estudar o efeito da molhabilidade da superfície plana sobre a dinâmica da colisão de uma gota, cobrindo uma faixa ampla desde sólidos hidrofílicos a superhidrofóbicos. O trabalho futuro de Banitabaei e Amirfazli (2017) expandiu essas análises para o impacto com superfícies esféricas. Os autores variaram a velocidade de impacto da gota e concluíram que dois regimes podem ser encontrados dependendo do número de Weber: o primeiro regime,  $30 < We < 200$ , para o qual a molhabilidade afeta o espalhamento do líquido sobre o sólido, e o segundo regime,  $We > 200$ , no qual os efeitos inerciais superam as forças de capilaridade, tornando a molhabilidade secundária.

Mitra *et al.* (2013a) estudaram experimentalmente, e através de simulação bidimensional com o método VOF e malha adaptativa, o impacto ortogonal de múltiplas gotas d'água com uma partícula esférica de vidro em queda livre. Os autores variaram as velocidades das gotas e da partícula para analisar os efeitos da colisão, e concluíram que a gota experimenta uma colisão inelástica, resultando na deposição completa do líquido sobre a partícula com formação de filme. Adicionalmente, mostrou-se que a mudança de trajetória da partícula é significativa e é função do número de Weber e da velocidade da partícula.

Malgarinos *et al.* (2014) apresentaram um novo procedimento numérico, não baseado em condição de contorno, para a modelagem da dinâmica do ângulo de contato durante o impacto entre gota e superfície plana. Trabalhos futuros dos mesmos autores aplicaram esse algoritmo para superfícies esférica (MALGARINOS; NIKOLOPOULOS; GAVAISES, 2016).

Outros estudos experimentais e numéricos concentraram-se na investigação da colisão gota-partícula com relação à razão de diâmetros gota-partícula,

e aos números adimensionais do escoamento. Shraiber, Dubrovsky e Podvysotsky (2014) e Mitra *et al.* (2015) cobriram a faixa da colisão entre gotas grandes, 3,41 *mm*, e partículas pequenas, até 1,13 *mm*; Mitra *et al.* (2017) a faixa de gota e partícula com diâmetros semelhantes; e Charalampous e Hardalupas (2017) a faixa da colisão entre gotas pequenas, 170  $\mu\text{m}$  a 280  $\mu\text{m}$ , e partículas grandes 500  $\mu\text{m}$  a 2000  $\mu\text{m}$ .

O presente trabalho focou no estudo da colisão gota-partícula para condições que ocorrem a formação da lamela, segundo a configuração experimental e os intervalos dos parâmetros adimensionais do escoamento apresentados em Banitabaei e Amirfazli (2017), lançando mão de simulação numérica refinada, planejamento de experimento computacional e métodos de aprendizagem estatística para compreensão das relações entre os parâmetros do escoamento e os resultados da colisão, como a área da lamela, Seção 4.1, e a superfície molhada das partículas, Seção 4.2.

# CAPÍTULO III

## Metodologia

### 3.1 Formulação conservativa das equações de transporte

A forma conservativa das equações de transporte da quantidade de movimento,  $q_i = \rho_i u_i$ , para a fase  $i$  em escoamentos interfaciais compostos por dois fluidos imiscíveis é dada por

$$\partial_t q_i + \nabla \cdot (q_i u_i) = -\nabla p_i + \nabla \cdot \tau_i + \rho_i a_i, \quad (3.1)$$

onde  $\rho$  é a densidade,  $u$  é a velocidade,  $p$  é a pressão definida pela equação de estado em escoamentos compressíveis ou pela equação de Poisson em escoamentos incompressíveis,  $\tau$  é o tensor das tensões viscosas,

$$\tau = \mu \left( \nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right) - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{u} \delta, \quad (3.2)$$

e  $a$  é um termo de aceleração, e.g., gravitacional e devido à tensão superficial,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica, e

$$\delta_{lm} = [l = m] \quad (3.3)$$

é o tensor delta de Kronecker. Como o presente trabalho é dedicado ao estudo de escoamentos incompressíveis, o segundo termo da Eq. 3.2 é considerado nulo, e portanto não é incorporado no algoritmo numérico.

A equação da continuidade é expressada por

$$\partial_t \rho_i + \nabla \cdot (\rho_i u_i) = 0, \quad (3.4)$$

e a pressão evolui, desconsiderando efeitos de dissipação e de dilatação térmica (FUSTER; POPINET, 2018), segundo a equação

$$\partial_t p + u \cdot \nabla p = -\rho C_s^2 \nabla \cdot u, \quad (3.5)$$

onde  $C_s$  é a velocidade do som, avaliada segundo as propriedades do fluido e sua temperatura.

Para o caso incompressível ( $C_s = \infty$ ), a Equação 3.5 se simplifica no divergente nulo da velocidade, sendo a pressão derivada via processo de projeção. O procedimento numérico é apresentado na Seção 3.1.1.

A posição da interface bifásica é determinada pelo transporte passivo da fração volumétrica,  $c$ , através da equação advectiva

$$\partial_t c + u \cdot \nabla c = S_c. \quad (3.6)$$

através do método VOF (HIRT; NICHOLS, 1981). O termo fonte/sumidouro  $S_c$  é usualmente nulo, porém pode ser utilizado em modelagens que envolvem transformações Euler-Lagrange (FONTES *et al.*, 2019) ou evaporação (MITRA *et al.*, 2018), por exemplo.

Considerando-se um escoamento bifásico, líquido ( $l$ ) e gás ( $g$ ), a fração volumétrica é dada por

$$c = \frac{V_l}{V_l + V_g}, \quad (3.7)$$

onde  $V$  expressa o volume de cada fase. As propriedades do fluido são calculadas com base na fração volumétrica

$$\begin{aligned}\rho &= (1 - c) \rho_g + c \rho_l, \\ \mu &= (1 - c) \mu_g + c \mu_l,\end{aligned}\tag{3.8}$$

onde  $c = 1$  define o líquido e  $c = 0$  o gás.

O método VOF é um dos mais utilizados para solução numérica de escoamentos multifásicos, cumprindo com o propósito de conservar o volume das fases e rastrear sua interface. Ele pode ser realizado com o esquema conservativo, não-difusivo, denominado VOF geométrico — através do algoritmo *Piecewise Linear Interface Capturing* (LÓPEZ *et al.*, 2008). Esse é um método fidedigno de captura e transporte da interface, porém é computacionalmente mais caro do que outros métodos, conhecidamente difusivos, baseados na discretização da equação advectiva, como o CICSAM (UBBINK, 1997) e o HRIC (MUZAFERIJA *et al.*, 1998).

### 3.1.1 Procedimento numérico

A abordagem numérica utilizada no presente trabalho segue o desenvolvimento apresentado por Fuster e Popinet (2018), simplificado para escoamentos incompressíveis. O esquema numérico é baseado na formulação co-localizada em malha *octree* (POPINET, 2015; LINDEN *et al.*, 2018) e em métodos de advecção por etapas.

Destaca-se a consistência entre o tratamento dos fluxos advectivos da fração volumétrica,  $F_c$ , e da quantidade de movimento linear,  $F_{cq}$ , a qual previne a difusão numérica e reduz erros de advecção na região da interface bifásica, e atenua as instabilidades numéricas usualmente presentes em simulações incompressíveis com grande diferença na densidade das fases (e.g.,  $10^3$ ).

A advecção da fração volumétrica ocorre separadamente em cada dire-

ção. Parte-se da Equação 3.6 rearranjada na forma

$$\partial_t c + \nabla \cdot (uc) = c \nabla \cdot u, \quad (3.9)$$

resultante da propriedade

$$\nabla \cdot (uc) = c \nabla \cdot u + u \cdot \nabla c. \quad (3.10)$$

O último termo da Equação 3.9 representa a variação volumétrica de uma das fases devido aos efeitos de compressibilidade, e portanto, é considerado nulo para escoamentos incompressíveis. A equação discretizada torna-se

$$c^{n+1} = c^n - \sum_f F_c (u_f \Delta t / \Delta x, c), \quad (3.11)$$

sendo  $F_c = c_{adv} \cdot u_f$  o fluxo de  $c$  na face  $f$  durante o período  $\Delta t$ , e  $c_{adv}$  avaliado geometricamente.

A solução numérica da equação de transporte da quantidade de movimento linear,  $q_i$ , é realizada para cada fase  $i$  em quatro etapas:

1. Etapa de advecção,

$$(c_i q_i)^* = (c_i q_i)^n - \sum_f F_{c_i q_i} (u_f \Delta t / \Delta x, c_i, q_i), \quad (3.12)$$

onde

$$F_{c_i q_i} (u_f \Delta t / \Delta x, c_i, q_i) = F_c (u_f \Delta t / \Delta x, c_i) q_{i,adv}. \quad (3.13)$$

Essa abordagem permite resolver separadamente  $F_{c_i}$  através do método PLIC e de  $q_{i,adv}$  via esquema Bell-Collela-Glaz, *upwind* de segunda ordem,

$$q_{i,adv} = q_i + \frac{1}{2} \text{sign}(u_f) \min \left( 1, 1 - \text{sign}(u_f) \frac{u_f \Delta t}{\Delta x} \right) \frac{\partial q_i}{\partial x} \Delta x, \quad (3.14)$$

se  $c_i > 0$ , ou  $q_{i,adv} = 0$ , caso contrário; onde  $c_i$  e  $q_i$  são valores centrados

no volume de controle *upwind* (i.e., no sentido contrário da velocidade). Os detalhes da consistência dessa abordagem podem ser vistos em (FUSTER; POPINET, 2018).

2. Etapa de incorporação dos termos de viscosidade e tensão superficial,

$$\frac{(q_i)^{**} - (q_i)^*}{\Delta t} = \nabla \cdot \tau_i, \quad (3.15)$$

$$\frac{(q_i)^{***} - (q_i)^{**}}{\Delta t} = \gamma \kappa \nabla c, \quad (3.16)$$

respectivamente, onde  $\gamma$  é o coeficiente de tensão superficial e  $\kappa$  é a curvatura. A precisão do modelo é extremamente sensível ao procedimento de cálculo da curvatura e, conseqüentemente, da força devida à tensão superficial. O algoritmo utilizado se baseia na função *level-set* e recupera fidedignamente o equilíbrio com a pressão na interface bifásica (ABU-AL-SAUD; POPINET; TCHELEPI, 2018).

3. Etapa de solução da pressão via equação de Poisson, originada da projeção por divergente nulo,

$$\nabla \cdot \left( \frac{\Delta t}{\rho} \right) \nabla p = \nabla \cdot u^{***}. \quad (3.17)$$

Nesse estágio, a velocidade de cada fase é extraída da quantidade de movimento linear, de forma a considerar a densidade do fluido na matriz de coeficientes da pressão média,  $p = cp_1 + (1 - c)p_2$ , e o divergente é computado por interpolação linear dos valores centrados do campo de velocidade provisório,  $u^{***}$ . O sistema linear é resolvido utilizando o método *Multigrid* (POPINET, 2015).

4. Etapa de incorporação da pressão na equação de transporte da quantidade

de movimento linear,

$$(q_i)^{n+1} - (q_i)^n = \Delta t \nabla^c p, \quad (3.18)$$

atualizando a velocidade nas faces,

$$(u)^{n+1} - (u)^{***} = -\frac{\Delta t}{\rho} \nabla p, \quad (3.19)$$

e a quantidade de movimento linear centrada. O gradiente de pressão centrado é obtido como uma média simples de seus valores nas faces.

Como a pressão média utilizada na equação de Poisson é ponderada pela fração volumétrica das fases, na região de interface a pressão em cada fase deve ser calculada com a relação de Laplace

$$\begin{aligned} p_1 &= p + (1 - c) \gamma \kappa, \\ p_2 &= p - \gamma \kappa. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Desta forma, a pressão na face é definida pelo valor da pressão centrada de um dos dois volume de controle vizinhos que contém a maior fração volumétrica.

### 3.2 Planejamento de experimento computacional

Planejamento de Experimento (do inglês, DOE) é uma plataforma estatística consolidada no contexto da bancada experimental (MONTGOMERY, 2013), mas é ainda modesta para o cenário do experimento computacional, o qual se baseia em simulação numérica (JR., 2002). Isso ocorre em razão das muitas diferenças entre os experimentos físicos e os computacionais — a mais notável delas sendo a natureza determinística da maioria das simulações numéricas (JR., 2002; LAW, 2009; LAW, 2017; SANTNER; WILLIAMS; NOTZ, 2018).

O DOE tem sido expandido dos cenários de experimento físico para os computacionais desde a década de oitenta (JR., 2002). No entanto, devido às

diferenças mencionadas, o planejamento, a análise e as conclusões dos estudos baseados em simulação numérica requerem atenção especial.

Os fatores sob análise em uma bancada experimental podem ser de quatro tipos: controlados, ambientais (i.e., ruído), agrupados e confusos. Além disso, para assegurar uma análise estatística válida, as estratégias de aleatoriedade, agrupamento e replicabilidade das amostras é essencial. Por outro lado, nenhuma dessas estratégias faz sentido no experimento computacional, exceto pela replicabilidade, que ganha uma interpretação distinta no contexto da simulação numérica; além disso, o fator associado aos modelos empregados se torna relevante (SANTNER; WILLIAMS; NOTZ, 2018).

Fundamentalmente, quando alguém pensa sobre os possíveis erros experimentais, vêm à mente as variabilidades relacionadas à reproducibilidade (e.g., condição inicial, desgaste de peças), às fontes externas de ruído (e.g., vibração) e à limitação da acurácia das ferramentas de medição. No entanto, o pesquisador pode controlar todas essas variáveis na simulação numérica, e a diferença entre a realidade e o experimento computacional passa a ser baseada em uma série de erros associados aos esquemas de integração espacial e temporal, dependência de malha e do passo temporal, modelos adotados, simplificações matemáticas e hipóteses físicas.

Os métodos do planejamento experimental foram concebidos de forma a otimizar a quantidade de informação conseguida à partir do mínimo número possível de dados. O mais simples deles é o planejamento fatorial  $2^k$ , onde  $k$  é o número de fatores avaliados. A Figura 3.1 ilustra geometricamente o planejamento fatorial  $2^{k=3}$ , onde cada fator avaliado forma uma dimensão espacial e cada um dos vértices (1),  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $ab$ ,  $ac$ ,  $bc$ ,  $abc$  representa a soma dos resultados das simulações relativas às  $n$  réplicas, dadas pela combinação dos fatores  $A$ ,  $B$  e  $C$ .

O planejamento fatorial  $2^k$  é pouco utilizado em experimentos computacionais por assumir que o comportamento das funções nos intervalos definidos para cada fator é monotônico e linear (LAW, 2017). No entanto, ele é extremamente útil para uma etapa puramente prospectiva, quando seguida por outros métodos

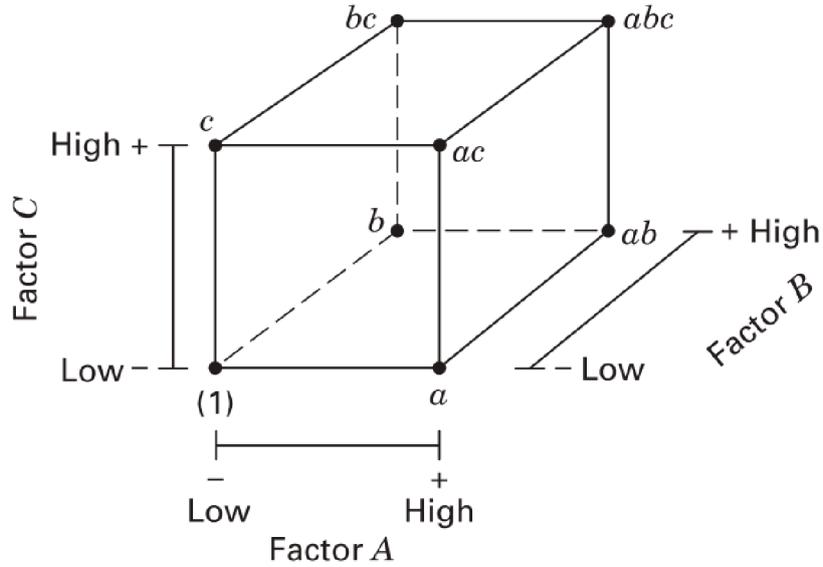


Figura 3.1: Representação geométrica de um planejamento fatorial  $2^{k=3}$  (MONTGOMERY, 2013).

que requerem mais combinações distintas dos fatores, como a construção de um modelo preditivo utilizando aprendizagem estatística.

Quando, por algum motivo, a construção do metamodelo não é possível, como exemplo devido à inviabilidade da realização de várias simulações numéricas, outros métodos de planejamento experimental (e.g., *Latin Hypercube*) são indicados para os experimentos computacionais (SANTNER; WILLIAMS; NOTZ, 2018). Esses métodos são mais genéricos do que o planejamento fatorial  $2^k$  e demandam uma quantidade de simulações intermediária entre o  $2^k$  e os métodos de aprendizagem estatística.

A partir do planejamento de experimento, são analisados dois pontos principais: *I.* os efeitos diretos e cruzados dos fatores e *II.* a análise da variância considerando as réplicas.

Considerando o fator *A* do planejamento fatorial ilustrado na Figura 3.1, seu efeito direto é dado por

$$E_A = \frac{1}{4n} [a + ab + ac + abc - (1) - b - c - bc], \quad (3.21)$$

i.e., a diferença média entre o resultado da simulação para os valores altos e baixos

do fator  $A$ . O mesmo procedimento se aplica no cálculo dos efeitos diretos dos fatores  $B$  e  $C$ .

O efeito da interação entre dois fatores é calculado pela diferença da resposta média das duas simulações cujos fatores são ambos máximos e mínimos e das duas simulações cujo um dos fatores é máximo e o outro é mínimo (MONTGOMERY, 2013).

Como mencionado por Law (2009), deve-se ter cautela ao concluir que um fator não tem relevância na resposta de um sistema somente pela magnitude de seu efeito direto, uma vez que seus efeitos cruzados podem ocultar sua importância.

A análise da variância verifica a significância estatística dos efeitos dos fatores avaliados no planejamento experimental. Essa etapa depende da existência de réplicas, que, no contexto do experimento computacional, significa qualquer variação na configuração da simulação com o objetivo imitar o experimento físico, seja pela sua reproduzibilidade ou limitação de acurácia; como exemplo, o perfil da velocidade de entrada, as propriedades do fluido, os desvios das medidas nominais e as flutuações na condição inicial.

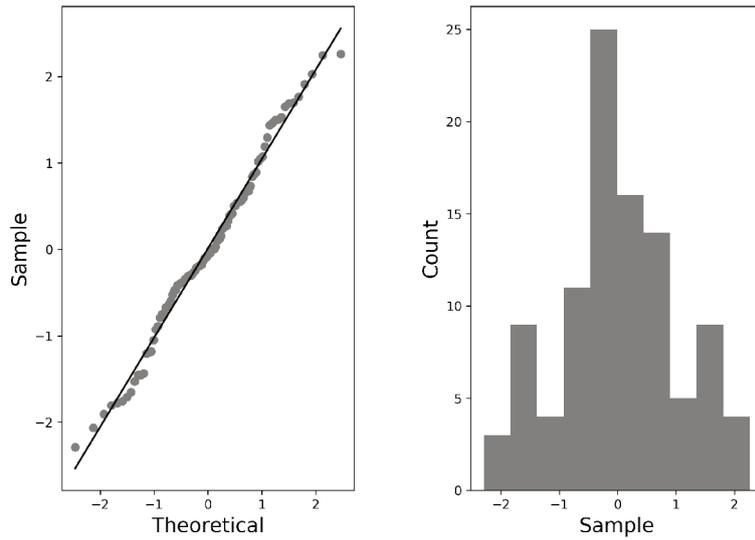
Réplicas permitem estimar o erro experimental, que é uma medida elementar para determinar a significância de um efeito, assim como aperfeiçoar a acurácia na estimativa da média populacional com base na média amostral durante o cálculo do intervalo de confiança (MONTGOMERY, 2013).

Além do requisito de que a função analisada através dos métodos de planejamento fatorial tenha comportamento monotônico no intervalo dos fatores, a variância em cada ponto do planejamento experimental deve ser semelhante, e a distribuição do erro (i.e., resíduo),

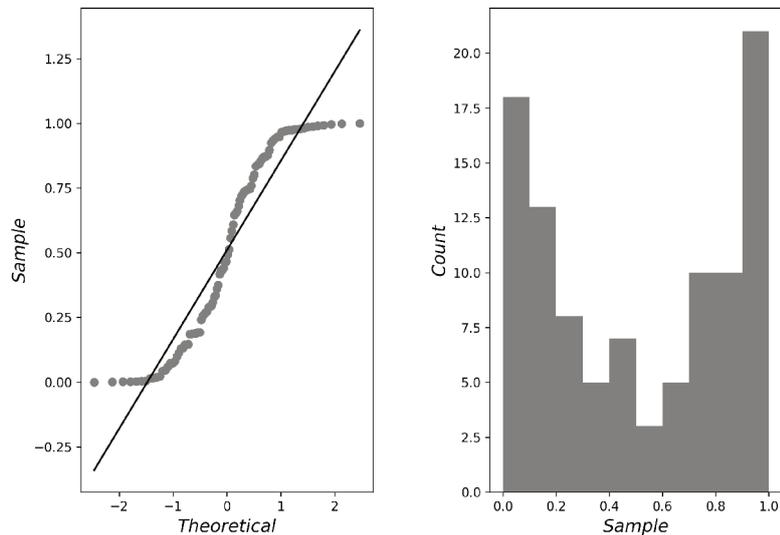
$$e = \hat{y} - y, \tag{3.22}$$

deve ser normal, Fig. 3.2; onde  $\hat{y}$  é o valor predito pelo modelo gerado no planejamento fatorial e  $y$  é o resultado da simulação, i.e., referência de verdade na modelagem estatística.

Law (2017) argumenta que o requisito da distribuição do erro é dificilmente atingido em simulações numéricas. No entanto, tratar as réplicas como uma imitação das variações observadas no experimento físico contribui para atender às hipóteses assumidas.



(a) Distribuição Normal



(b) Distribuição Beta

Figura 3.2: *Normal probability plot* e histograma para dois tipos de erros experimentais.

A Figura 3.2 mostra como os erros experimentais podem fugir da distribuição normal. Por exemplo, se os erros tendem a se acumularem próximos dos

valores extremos, ele seguirá uma distribuição Beta com coeficientes  $\alpha = \beta = 0,5$ ; um erro uniforme e um erro aleatório apresentarão um padrão intermediário às amostras com distribuição Normal e Beta.

Considerando as características do planejamento de experimento computacional, Law (2017) aponta a construção de um intervalo de confiança para cada efeito dos fatores como uma melhor abordagem na verificação de sua significância estatística frente ao usual teste de hipótese comumente aplicado nos experimentos físicos.

O intervalo de confiança  $100(1 - \alpha)$  é dado por

$$\bar{E} \pm t_{n-1, 1-\alpha/2} \sqrt{S^2/n}, \quad (3.23)$$

onde  $\bar{E}$  é o efeito médio,  $n$  é o número de réplicas,  $t$  é o valor da distribuição *t-student* para  $n - 1$  graus de liberdade e nível de significância  $\alpha$ , e  $S^2$  é a variância amostral do efeito.

As conclusões das análises de um experimento computacional devem ser restritas ao conjunto de modelos numéricos utilizados, assim como de seus parâmetros, e das faixas atendidas das condições iniciais e de contorno. Adicionalmente, as interpretações devem sempre ser seguidas pela apresentação da acurácia da validação com o experimento físico, considerando os esquemas de integração espacial e temporal, e a dependência da malha numérica e do passo de tempo sobre a precisão dos resultados.

### 3.3 Aprendizagem estatística

A aprendizagem estatística é formada por uma classe de métodos numéricos que têm como base a álgebra linear, a matemática tensorial e a teoria estatística. Esses métodos têm como objetivo o reconhecimento de padrões de conjunto de dados; no contexto do aprendizado supervisionado, isso significa obter a relação entre as variáveis independentes (i.e., variáveis de entrada) e as variáveis dependentes (i.e., variáveis de saída). O primeiro algoritmo dessa categoria a ser

proposto foi o método dos mínimos quadrados, como base do método de regressão linear, no início da década de 90; o qual foi seguido no final da mesma década pelo primeiro método não-linear denominado *decision tree regression* (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2009).

Quando métodos computacionais são construídos a partir dessa plataforma numérica teórica, surgem as áreas de pesquisa e desenvolvimento denominadas *machine learning* e *deep learning*. De acordo com Geron (2017), *machine learning* é a ciência e a arte de criar programas de computador de forma que eles aprendam com dados. O termo *deep learning* foi proposto em 2006 em um trabalho com redes neurais composta por várias camadas, que objetivava o reconhecimento de letras escritas à mão.

No contexto de *machine learning*, o presente trabalho utilizou a biblioteca *scikit-learn* (PEDREGOSA *et al.*, 2011) para treinamento, teste, validação e criação dos modelos preditivos. No escopo de *deep learning*, foram utilizadas as bibliotecas *TensorFlow* e *Keras* (ABADI *et al.*, 2015; CHOLLET *et al.*, 2015).

### 3.3.1 *Machine learning*

O método de regressão linear é assim chamado por tratar cada variável dependente,  $\hat{y}(w, x)$ , como uma combinação linear de  $p$  variáveis independentes,  $x_i$ ,

$$\hat{y}(w, x) = w_0 + w_1x_1 + \dots + w_px_p, \quad (3.24)$$

onde  $w_i$  são os coeficientes dessa combinação e  $w_0$  o termo *bias* ou *intercept*.

O algoritmo tem como base o método dos mínimos quadrados, no qual os coeficientes são otimizados visando minimizar a soma dos resíduos,  $e_i$ , ao quadrado,

$$S = \sum_{i=1}^N e_i^2, \quad (3.25)$$

no espaço definido por todos os dados,  $N$ ; o resíduo é definido como a diferença

entre a variável dependente predita e a referência de verdade,  $y$ ,

$$e_i = \hat{y}_i - y_i. \quad (3.26)$$

No presente trabalho, a referência de verdade advém de simulação numérica-computacional.

O método dos mínimos quadrados pressupõe a independência entre as variáveis de entrada. Caso exista significativa correlação entre essas variáveis, o modelo se torna altamente sensível aos erros aleatórios da variável de saída, gerando ampla variância. Esse tipo de situação é comum quando os dados são coletados sem um planejamento experimental (PEDREGOSA *et al.*, 2011).

A regressão polinomial é uma extensão do método de regressão linear que considera uma combinação de grau  $n > 1$  das variáveis independentes (e.g.,  $x_1^2$ ,  $x_1x_2$ ). Ela é utilizada para ajustar uma curva, superfície de resposta ou hiper-superfície para variáveis de entrada contendo 1, 2 ou  $> 2$  dimensões, respectivamente, criando modelos lineares para funções não-lineares. Essa combinação de variáveis independentes faz parte de um conjunto de utilidades de pré-processamento do *scikit-learn*, e pode ser aplicada não somente à regressão polinomial, como também aos outros métodos.

Uma abordagem de pré-processamento de dados frequentemente utilizada após a combinação polinomial das variáveis de entrada é a padronização via centralização e dimensionamento, i.e., subtração da média,  $\bar{x}$ , e divisão pelo desvio-padrão,  $\sigma$ , de cada variável independente do banco de dados de treinamento, respectivamente,

$$z_i = \frac{x_i - \bar{x}}{\sigma}. \quad (3.27)$$

Essa operação resulta em distribuições com média nula e variância unitária. Por ser o modelo treinado utilizando o banco de dados padronizado, os mesmos valores das médias e variâncias desse processo devem ser utilizados na padronização do banco de dados de teste e das variáveis de entrada em predições

futuras.

A transformação das variáveis independentes visa atender aos requisitos de eficácia e eficiência dos métodos (e.g., *support vector regression*), uma vez que a maioria deles depende que as distribuições das variáveis de entrada sejam próximas de uma distribuição normal padronizada. Isso contribui com o requisito de que elas apresentem escalas e ordem da variância similares. Variáveis independentes com maior variância têm a tendência de dominar o processo de aprendizagem (i.e., otimização dos parâmetros do modelo), o que pode anular o efeito das outras variáveis relevantes (PEDREGOSA *et al.*, 2011).

Uma vez que o processo de criação do modelo preditivo é posterior ao planejamento experimental, a etapa de seleção das variáveis independentes que possuem relevância significativa sobre as variáveis dependentes é previamente realizada. No entanto, cada método de *machine learning* exige um tratamento distinto para a avaliação da relevância das variáveis originadas pela combinação polinomial das variáveis primárias. No caso da regressão polinomial, uma alternativa é a análise da variância de cada coeficiente (MONTGOMERY, 2013), enquanto no caso da *decision tree regression*, essa seleção é realizada automaticamente em função da natureza do algoritmo.

A biblioteca *scikit-learn* disponibiliza funções para a automação desse processo de seleção para as etapas pré e pós treinamento do modelo preditivo. Para o pós treinamento, tem-se, por exemplo, a eliminação recursiva das variáveis e a seleção baseada em valor limitante dos coeficientes (e.g., regressão polinomial) ou da importância das variáveis (e.g., *decision tree regression*).

Na regressão polinomial, apenas as variáveis de entrada cujo valor absoluto do coeficiente é maior do que a média dos coeficientes são consideradas relevantes e mantidas no modelo; o que requer que os dados de treinamento tenham sido padronizados para que seus coeficientes sejam comparáveis. No entanto, como mencionado na seção de planejamento de experimento computacional, a ausência de um termo direto (e.g.,  $x_1$ ) não implica em sua insignificância sobre as variáveis de saída, uma vez que esse efeito pode estar oculto em alguma interação

de variáveis (e.g.,  $x_1x_2$ ).

Diferentemente da regressão linear e métodos afins, a regressão por *decision tree* é um método indicado para problemas complexos, uma vez que o modelo é não-linear, não-paramétrico (i.e., independente de suposições a respeito da distribuição dos dados), apresenta baixo custo computacional e é capaz de lidar com múltiplas variáveis de saída.

Esse algoritmo busca subdividir os espaços dimensionais das variáveis independentes com base nos dados de treinamento Fig. 3.3, de forma a minimizar o *Mean Squared Error* (MSE), de acordo com a função custo,

$$C = \frac{n_{left}}{N}MSE_{left} + \frac{n_{right}}{N}MSE_{right}, \quad (3.28)$$

onde  $N$ ,  $n_{left}$  e  $n_{right}$  são, respectivamente, a quantidade total de dados, a quantidade de dados na subdivisão à esquerda e na subdivisão à direita relativo à um valor de referência otimizável. A média utilizada no cálculo do MSE é a média aritmética dos dados pertencentes aos intervalos em questão. O modelo é otimizado com base no número máximo de camadas de subdivisões (*depth*) e na quantidade mínima de dados permitidos nesses intervalos (GERON, 2017).

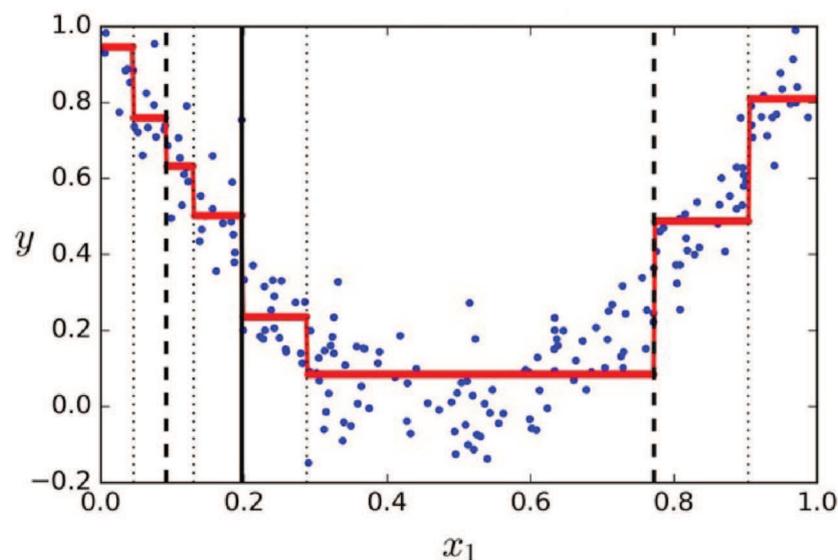


Figura 3.3: Exemplo gráfico do funcionamento do algoritmo *decision tree regression* (GERON, 2017).

Em virtude das subdivisões nos espaços dimensionais serem ortogonais, esse método é sensível às transformações de rotação das variáveis independentes. Outro ponto peculiar desse algoritmo diz respeito a sua alta sensibilidade às pequenas variações no banco de dados de treinamento, resultando em um conjunto diferente de parâmetros otimizados para cada cenário minimamente distinto.

Os detalhes sobre a teoria numérica, a API e a implementação computacional dos métodos apresentados, assim como de outros algoritmos utilizados no corpo do presente trabalho, podem ser encontrados em Geron (2017), Pedregosa *et al.* (2011) e no repositório da biblioteca *scikit-learn* no GitHub.

### 3.3.2 *Deep learning*

Entre as várias categorias e sub-categorias dos métodos de *deep learning* existentes, este trabalho tem como foco a abordagem supervisionada baseada em *multilayer perceptron* (MLP). O estudo das diferentes arquiteturas (e.g., quantidade e tipos de camadas) e da otimização dos hiperparâmetros da rede neural lançou mão das plataformas conjuntas TensorFlow (ABADI *et al.*, 2015) e Keras (CHOLLET *et al.*, 2015).

Apesar da *convolutional neural network* (CNN) ter promovido um grande salto na acurácia de problemas envolvendo reconhecimento de padrões em campos bidimensionais (e.g., classificação de imagens) e tridimensionais, em relação à *multilayer perceptron* (GERON, 2017), é essencial analisar as características e os objetivos de cada problema e explorar o potencial máximo da MLP antes de recorrer à CNN.

No contexto da mecânica dos fluidos, por mais que o escoamento contenha naturalmente padrões tempo-espaciais, em muitas aplicações as frequências e os números de onda do escoamento não são capturáveis pelas resoluções admitidas das arquiteturas de redes convolucionais bidimensionais existentes atualmente, tornando-as insignificantes na correlação entre variáveis de entrada e de saída. Portanto, o uso da CNN nessas situações seria excessivo e desnecessário em relação à utilização da MLP.

A Figura 3.4 apresenta a arquitetura elementar de uma *multilayer perceptron*, detacando as camadas de entrada, intermediárias (i.e., *hidden layers*), e de saída, assim como a aplicação da função de ativação não-linear  $\sigma$  (e.g., sigmoid, ReLU) à função linear  $f(x, W)$  em cada neurônio artificial. Quando todos os *perceptrons* da rede neural estão conectados entre si, as camadas da rede são denominadas *fully connected layers*.

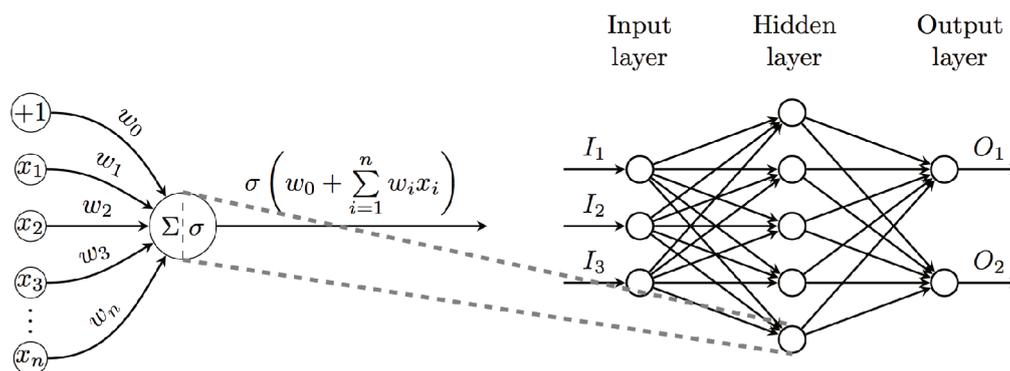


Figura 3.4: *Multilayer perceptron*. <https://cambridgecoding.com>, acessado em 10 de abril de 2019.

O objetivo de uma rede neural alimentada por dados rotulados é de otimizar seus parâmetros, i.e., pesos da regressão linear presentes nos neurônios artificiais da rede, valendo-se da otimização dos hiperparâmetros que compõem o algoritmo em si (e.g., taxa de aprendizado e *loss function*).

Desta forma, vários conceitos são importantes em uma rede neural, entre eles: norma (e.g., L1 e L2), *score function*, *loss function*, otimização, taxa de aprendizado, *back-propagation*, função de ativação, *weight initialization* e *batch normalization*.

A norma da distância entre dois vetores  $I_1$  e  $I_2$  serve como medida de semelhança entre eles, e é função de uma operação elemento a elemento. A norma L1 é calculada como a soma do valor absoluto das diferenças

$$L_1(I_1, I_2) = \sum_p |I_1^p - I_2^p|, \quad (3.29)$$

onde  $p$  representa a posição do vetor. Outra maneira de comparar dois vetores é

através da norma  $L_2$ ,

$$L_2(I_1, I_2) = \sqrt{\sum_p (I_1^p - I_2^p)^2}. \quad (3.30)$$

A norma  $L_2$  é mais rígida do que a norma  $L_1$ , uma vez que privilegia vetores com diferenças moderadas, mesmo que em grande quantidade, ao invés de vetores com apenas um elemento de expressiva diferença. No entanto, a norma da distância entre dois vetores como critério de semelhança deve ser utilizada com senso crítico, uma vez que é possível existirem múltiplos vetores diametralmente distintos que possuem a mesma norma em relação a um vetor de referência.

O classificador ou regressor linear,

$$y_i = f(x_i, W, b) = Wx_i + b, \quad (3.31)$$

para  $y_i$  discreto ou contínuo, respectivamente, é um tipo de *score function*, a qual cumpre com o objetivo de mapear as variáveis de entrada,  $x_i$ , com respeito à variável de saída,  $y_i$  através dos parâmetros  $W$ , denominados matriz de coeficientes, e  $b$ , vetor *bias*. Considerando que o banco de dados de treinamento contenha  $N$  elementos, com  $D$  variáveis independentes, e cuja variável dependente seja dividida em  $K$  intervalos de classificação (i.e., regressão discreta), o vetor de entrada, a matriz de coeficientes, o vetor *bias* e o vetor de saída têm dimensões  $[D; 1]$ ,  $[K; D]$ ,  $[K; 1]$  e  $[K; 1]$ , respectivamente.

É comum apresentar os parâmetros  $W$  e  $b$  em uma única matriz de coeficientes,

$$y_i = Wx_i, \quad (3.32)$$

com o vetor de entrada e a matriz de coeficientes portando dimensões  $[(D+1); 1]$  e  $[K; (D+1)]$ , respectivamente, onde o elemento extra do vetor de entrada possui valor unitário e o vetor extra da matriz de coeficientes é igual ao vetor *bias*.

Cada linha da matriz de coeficientes pode ser interpretada através do

espaço dimensional  $\mathbb{R}^D$  como sendo um classificador de uma das classes em  $\mathbb{R}^K$ , onde  $\mathbb{R}$  representa o espaço dos números reais. Outra interpretação possível é que cada linha da matriz  $W$  corresponda a um *template* de classe, cuja similaridade é medida utilizando o produto interno entre  $W$  e o vetor de entrada de avaliação  $x$ .

Quando o vetor de entrada é formado por variáveis distintas, os processos de normalização (i.e., subtração pela média) e dimensionamento (i.e., divisão pelo desvio-padrão) ocorrem separadamente para cada variável independente, considerando todos os dados de treinamento. No caso do vetor de entrada ser formado por pontos de um campo discreto, e.g., pixels de uma imagem ou valores do campo de pressão de um escoamento, a normalização ocorre conjuntamente para todo elemento do vetor de entrada e todos os dados de treinamento.

A função objetivo, ou *loss function*, mede o grau de assertividade dos pesos na relação de mapeamento  $x_i \rightarrow y_i$  durante o processo de otimização, com base no banco de dados de treino. Existem vários tipos de *loss function*, mas dado o contexto do presente trabalho, as mais relevantes são aquelas relacionadas com a regressão.

Entre elas, a função *mean squared error*,

$$MSE = \langle (\hat{y}_i - y_i)^2 \rangle_N, \quad (3.33)$$

onde  $\langle \rangle_N$  é o operador média sobre uma amostra de  $N$  elementos,  $\hat{y}_i$  é o valor predito pelo produto interno  $Wx_i$ , e  $y_i$  é a referência de verdade do elemento  $i$ . Ela é principalmente indicada quando a variável de saída tem distribuição normal. A função *mean absolute error*,

$$MAE = \langle |\hat{y}_i - y_i| \rangle_N, \quad (3.34)$$

é utilizada quando a variável de saída tem uma tendência à distribuição normal e apresenta *outliers* que representam ruídos; caso os *outliers* sejam característicos da variável dependente (i.e., não são ruídos), a função MSE é recomendada. Para redes neurais, é importante que a função MAE seja acompanhada por uma taxa

de aprendizado decrescente para convergência próximo ao ponto de mínimo.

Nenhuma dessas funções, no entanto, é eficiente quando a distribuição da variável de saída é extremamente concentrada próximo a um valor, mas também possui valores de interesse em outra faixa distante. Para cenários como esse, uma alternativa é transformar a variável de saída buscando a distribuição normal, ou utilizar outras funções objetivos, como exemplo a *huber loss*. A *huber loss* tem comportamento de MAE em regiões de erro alto e MSE em regiões de erro baixo. O ajuste da transição é dado por um hiperparâmetro:  $\delta = 0,1$  (muito quadrática) a  $\delta = 10$  (muito plana).

A função *mean squared logarithmic error*,

$$MSLE = \langle (\ln(\hat{y}_i) - \ln(y_i))^2 \rangle_N, \quad (3.35)$$

é sugerida para situações onde a variável de saída é mais dispersa, ou quando as variáveis de entrada não estão dimensionadas. Finalmente, a função *mean absolute percentage error*,

$$MAPE = 100 \cdot \left\langle \left| \frac{\hat{y}_i - y_i}{y_i} \right| \right\rangle_N, \quad (3.36)$$

é utilizada por sua interpretação intuitiva dada em porcentagem relativa; no entanto, essa não é uma função indicada quando a variável de saída possui valores nulos, em virtude da divisão por zero.

Outras funções objetivos são *log-cosh loss*, com propriedades semelhantes à *huber loss* além de possuir a vantagem de ser duplamente diferenciável, e a *quantile loss*, para predições de intervalos. A escolha da melhor *loss function* depende, por exemplo, da distribuição da variável de saída, da existência e natureza dos *outliers*, eficiência do método de otimização e nível de confiança das predições.

Otimização é o processo pelo qual a *loss function*,

$$L = \langle f(\hat{y} = f(W \cdot x), y) \rangle_N, \quad (3.37)$$

é minimizada com respeito à matriz de coeficientes,  $W$ , de dimensão  $[K; (D + 1)]$ , em cada *perceptron*,  $P$ , da rede neural, cada qual contém uma função de ativação não-linear aplicada a função linear  $\hat{y} = f(W \cdot x)$ . Na rede neural,  $D$  e  $K$  são iguais à quantidade de conexões de entrada e de saída de cada neurônio artificial, respectivamente. Portanto, o espaço dimensional de otimização depende da quantidade de variáveis de entrada, de variáveis de saída e de *perceptrons* nas camadas intermediárias. Adicionalmente, o valor da função objetivo é uma média das  $N$  amostras do banco de dados de treinamento.

O gradiente de  $L$  tem a mesma dimensão da variável a qual está sendo derivada:  $\partial L/\partial \hat{y}$ ,  $\partial L/\partial W$  e  $\partial L/\partial x$  têm dimensões  $[K; 1]$ ,  $[K; (D + 1)]$  e  $[(D + 1); 1]$ . Uma vez que  $L$  é uma expressão analítica, seu gradiente é calculado também analiticamente, ao invés de numericamente via diferenças finitas. Como a otimização ocorre na matriz de coeficientes, o algoritmo se baseia na derivada  $\partial L/\partial W$ .

Dada a *MSE loss function* na forma

$$L(w) = \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N e^2, \quad (3.38)$$

onde

$$e = y_n - (Xw)_n, \quad (3.39)$$

sua derivada analítica em relação a  $W$  é

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = -\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_{nj} (y_n - (Xw)_n) = -\frac{1}{N} x_j^T e, \quad (3.40)$$

onde  $x_j$  é a coluna  $j$  de  $X$ . Portanto,

$$\nabla_w L(w) = -\frac{1}{N} X^T e. \quad (3.41)$$

Na prática,  $\nabla_w L(w)$  é obtido através do processo denominado *back-propagation*.

Desta forma, a otimização via método *gradient descent* é dada com a atualização da matriz de coeficientes em sua direção negativa, com o avanço definido pela taxa de aprendizado,  $\eta$ ,

$$W^{n+1} = W^n - \eta \cdot \nabla L(w), \quad (3.42)$$

para a iteração  $n + 1$ . As abordagens dessa atualização variam de acordo com cada método de otimização, como *mini-batch gradient descent*, *stochastic gradient descent*, *RMSProp* e *Adam*.

Como mencionado anteriormente, o cálculo da *loss function* é realizado sobre o número total,  $N$ , de dados de treinamento. No entanto, para aplicações de grande escala isso se torna impraticável pelo custo computacional, sendo possível estimar  $L$  a partir de um lote  $N^* \ll N$  (e.g., 64, 128, 256), e calcular o gradiente com base nesse lote. Esse procedimento é a premissa do método *mini-batch gradient descent*, cuja eficácia repousa no fato dos dados de treinamento serem correlacionados e de  $L(N^*)$  ser uma boa estimativa amostral da média populacional  $L(N)$ .

Teoricamente, quando  $N^* = 1$ , o método é chamado *stochastic gradient descent* (SGD). No entanto, a sigla SGD tem se mantido na literatura independentemente da quantidade de dados avaliados por lote, sendo mais apropriado utilizar  $N^* > 1$  por eficiência computacional. Algumas variações do método SGD visam aprimorar as características do algoritmo original, como a adição de um termo de inércia (*momentum*) na atualização da matriz de coeficientes, e a variação *Nesterov*.

O método de otimização *RMSProp* introduz o conceito de taxa de decaimento da taxa de aprendizado durante a convergência da matriz de coeficientes. Por fim, o método *Adam* é o mais indicado por combinar a abordagem inercial, uma etapa de correção de *bias* e o algoritmo *RMSProp*. O algoritmo *Adam* inicia-se com os termos de inércia iguais a zero,  $m_1 = m_2 = 0$ , e segue o processo iterativo até que o número de ciclos (*epochs*) seja atingido. A primeira etapa consiste no

cálculo do gradiente  $\nabla_w L(w)$ , seguido pela atualização dos termos inerciais

$$\begin{aligned} m_1 &= \beta_1 \cdot m_1 + (1 - \beta_1) \cdot \nabla_w L(w), \\ m_2 &= \beta_2 \cdot m_2 + (1 - \beta_2) \cdot (\nabla_w L(w))^2, \end{aligned} \quad (3.43)$$

e os termos de correção de *bias*

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{m_1}{1 - \beta_1^t}, \\ b_2 &= \frac{m_2}{1 - \beta_2^t}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Por fim, o parâmetro  $W$  é atualizado,

$$W^{n+1} = W^n - \eta \cdot \frac{b_1}{\sqrt{b_2} + 10^{-7}}. \quad (3.45)$$

A *multilayer perceptron* é desenvolvida sobre a plataforma de grafos computacionais, onde cada nó representa uma operação. O processo de *back-propagation* utiliza a regra da cadeia para realizar a derivada parcial da função de interesse  $f(W)$  em relação a  $W$ , com base nas etapas definidas em cada nó do grafo. Desta forma, sendo  $\hat{y} = W \cdot x$ ,

$$\frac{\partial L}{\partial W} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial W}. \quad (3.46)$$

Como exemplo da operação *back-propagation* em um grafo computacional, suponha a função  $f$  definida no espaço tridimensional  $x, y, z$ ,

$$f(x, y, z) = g(x, y) \cdot z, \quad (3.47)$$

onde

$$g(x, y) = x + y. \quad (3.48)$$

Dividindo cada operação elementar em uma função distinta das variáveis independentes, como a operação em grafos propõe.

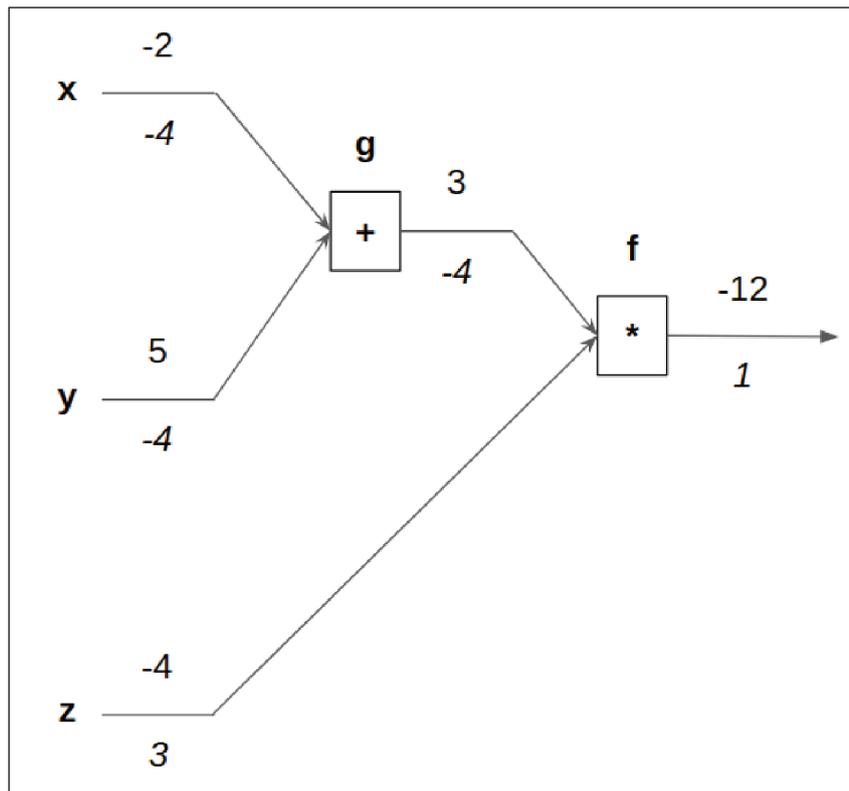


Figura 3.5: Exemplo de *back-propagation* para obtenção das derivadas parciais analíticas nó-a-nó no grafo computacional. <http://cs231n.stanford.edu/>, acessado em 10 de abril de 2019.

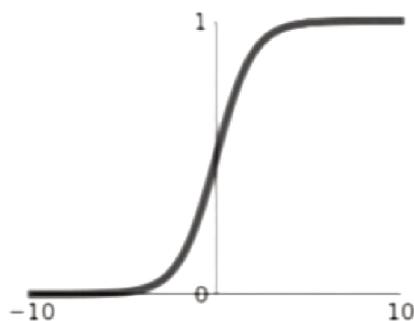
A Figura 3.5 mostra acima de cada seta os resultados da operação de avanço, i.e., os valores arbitrários das variáveis de entrada ou os valores resultantes das operações de cada nó do grafo:  $g = x + y$ ,  $f = g \cdot z$ . As derivadas parciais são computadas no sentido contrário, seguindo a operação de *back-propagation*:  $\partial f / \partial f$ ,  $\partial f / \partial z$ ,  $\partial f / \partial g$ ,  $\partial g / \partial x$ ,  $\partial g / \partial y$ ,  $\partial f / \partial x = \partial f / \partial g \cdot \partial g / \partial x$  e  $\partial f / \partial y = \partial f / \partial g \cdot \partial g / \partial y$ ; seus valores resultantes são apresentados abaixo de cada seta.

Como ilustrado na Figura 3.4, a função de ativação não-linear,  $\sigma$ , é um componente essencial de uma rede neural, sem a qual sua complexidade se restringiria a uma função linear. Existem múltiplas funções de ativação, cada qual contendo suas peculiaridades Fig. 3.6.

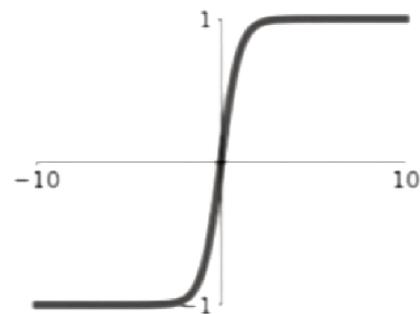
A função *sigmoid* responde qualquer valor de entrada com um valor de saída no intervalo  $[0, 1]$ . Seus pontos negativos incluem apresentar resposta não centrada em zero, prejudicando o processo de normalização da camada seguinte

de *perceptrons*; seus platôs de resposta para valores de entrada positivos e negativos muito elevados anulam o gradiente, não permitindo que o neurônio artificial continue colaborando com a otimização da matriz de coeficientes; a função exponencial ser custosa computacionalmente. Na prática, essa função não é mais utilizada. A função tangente hiperbólica corrige a não centralidade em zero da *sigmoid*, sendo também mais econômica computacionalmente, porém mantêm os platôs e seu problema com o gradiente nulo.

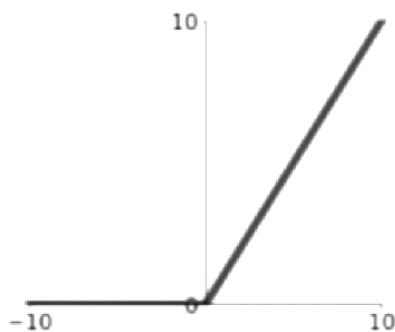
A função *rectified linear unit* (ReLU) não apresenta platô para a região positiva das variáveis de entrada, permitindo sempre a existência de gradiente. No entanto, ela não é centrada em zero e seu platô na região negativa das variáveis de entrada tem a tendência de desbalancear os gradientes; ainda assim, essa tem sido a função mais utilizada atualmente, com convergência superior às funções anteriormente citadas na ordem de seis vezes. A função *leaky ReLU* é uma variante que corrige as deficiências da ReLU.



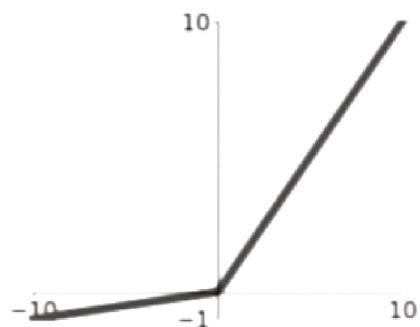
$$(a) \sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$



$$(b) \sigma(x) = \tanh(x)$$



$$(c) \sigma(x) = \max(0, x)$$



$$(d) \sigma(x) = \max(0.1x, x)$$

Figura 3.6: Exemplos de funções de ativação: (a) *sigmoid*, (b) tangente hiperbólica, (c) *rectified linear unit* (ReLU) e (d) *leaky ReLU*.

Um aspecto fundamental da rede neural é o denominado *weight initialization*, ou inicialização da matriz de coeficientes. Enquanto inializar todos os coeficientes nulos produz *perceptrons* idênticos durante a otimização, iniciá-los com valores aleatórios a partir de uma distribuição normal ( $\mu_w = 0$ ,  $\sigma_w = 0,01$ ) soluciona o problema apenas para as primeiras camadas da rede neural. As camadas mais profundas sofrem com o acúmulo da operação multiplicativa entre coeficientes e valores de entrada,  $W \cdot x$ , resultados da ativação da camada precedente. Um algoritmo eficaz, indicado para a maioria dos casos, é a inicialização *Modified Xavier*, que inicializa cada camada a partir de uma distribuição normal com média zero e desvio-padrão em função do número de variáveis de entrada de cada camada,  $n_x$ ,

$$\sigma_w = \frac{1}{\sqrt{n_x/2}}. \quad (3.49)$$

Embora a normalização das variáveis de entrada seja um requisito para a eficiente operação das funções de ativação, a normalização realizada para as variáveis independentes durante a etapa de pré-processamento dos dados somente atende a esse requisito para a primeira camada de *perceptrons*. Como as variáveis de entrada das camadas seguintes são os resultados da ativação da camada anterior, seus valores são dinâmicos, e requerem um processo distinto de normalização.

A *batch normalization* transforma os valores de entrada de cada camada em uma distribuição normal padronizada, calculando a média e a variância a partir de uma amostra. Essa transformação ocorre para cada variável de entrada separadamente, da mesma forma que nas variáveis independentes da primeira camada. A operação é realizada antes de se aplicar a função de ativação.

# CAPÍTULO IV

## Resultados

### 4.1 Caracterização da lamela

Esta seção investiga a colisão entre gota e partícula esférica em escoamento isotérmico, não-reativo, utilizando o método VOF em conjunto com a formulação conservativa da equação de transporte de quantidade de movimento linear em malha *octree* adaptativa.

As simulações são validadas, Seção 4.1.3, seguindo a configuração experimental de Banitabaei e Amirfazli (2017) apresentada na Seção 4.1.1, para a qual a razão de diâmetro gota-partícula é  $D_r = 1,75$ . Para esse fim, são considerados os parâmetros geométricos da lamela formada após o impacto: altura, diâmetro da base e espessura do filme líquido sobre a partícula.

A área interfacial e a espessura da lamela são fatores determinantes na transferência de massa e energia térmica em vários processos industriais. Em virtude disso, essas variáveis são analisadas através de um planejamento de experimento computacional para o intervalo dos parâmetros adimensionais  $Re [10^3 - 10^4]$  e  $We [10^2 - 10^3]$ , Seção 4.1.4.

A transformação de energia mecânica do escoamento é descrita na Seção 4.1.5, e uma correlação é proposta na forma  $A^* = f(Re, We, t^*)$  através de métodos de *machine learning*, Seção 4.1.6.

#### 4.1.1 Configuração

O experimento de Banitabaei e Amirfazli (2017) utilizou uma seringa de  $50 \mu\text{l}$  para geração das gotas de água com a dimensão e as propriedades físicas descritas na Tabela 4.1. A seringa foi posicionada acima de uma esfera fixa de vidro, de forma que a gota alcançasse as velocidades pré-impacto de  $C1 = 1,8 \text{ m/s}$  e  $C2 = 5,0 \text{ m/s}$ , partindo do repouso e sendo acelerada apenas pela gravidade. A modelagem numérica da gota, porém, considerou sua velocidade inicial, não-nula, na posição imediata à colisão, Fig. 4.1. A incerteza da posição pré-impacto da gota em relação à partícula no momento definido como inicial pelos experimentalistas é um fator de erro que deve ser considerado na validação.

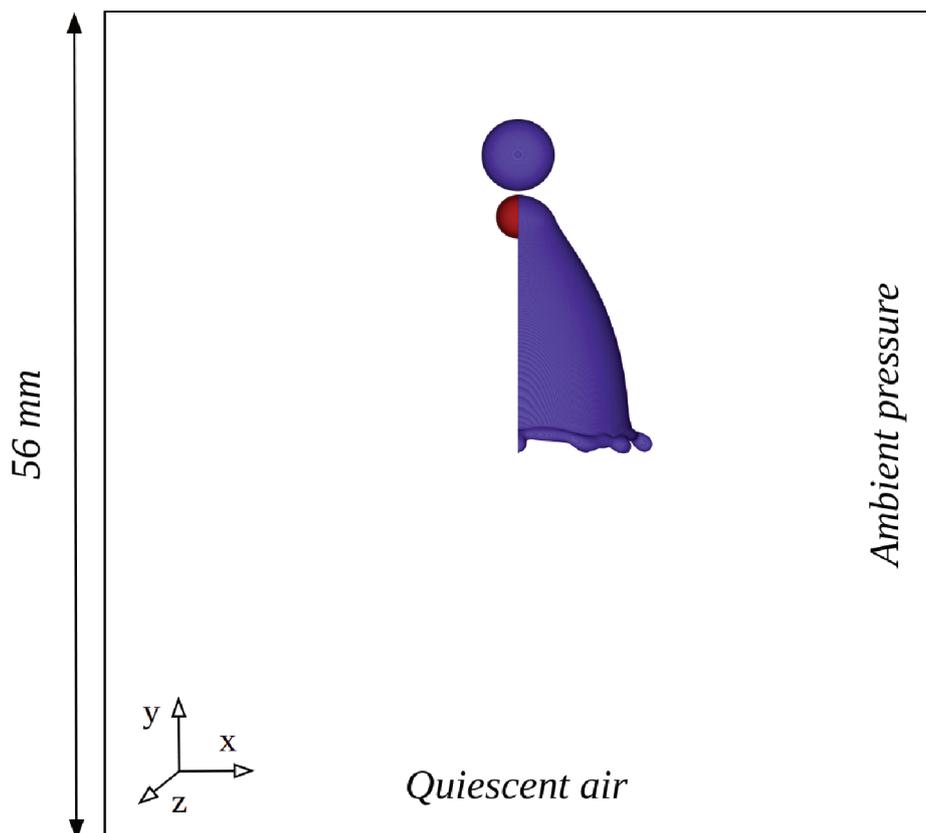


Figura 4.1: Domínio das simulações de colisão gota-partícula com formação de lamela.

No experimento, a gota desprendida da seringa se deforma no percurso até o contato com a partícula fixa em consequência do arrasto promovido pelo gás, do movimento interno do líquido e da tensão superficial; essas deformações são

tratadas neste trabalho como variações experimentais não controladas na seção de planejamento de experimento computacional.

Tabela 4.1: Dimensões e propriedades físicas utilizadas na simulação da colisão gota de água com partícula de vidro em ar.

$D_d [m]$	$D_p [m]$	$\rho_l [kg/m^3]$	$\rho_g [kg/m^3]$	$\mu_l [Pa \cdot s]$	$\mu_g [Pa \cdot s]$	$\gamma [N/m]$
$3,3 \cdot 10^{-3}$	$2,0 \cdot 10^{-3}$	1.000	1	$1,0 \cdot 10^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{-6}$	0,0728

Adicionalmente, a partícula de vidro sofreu tratamento superficial visando o nível de molhabilidade desejado com a água, tornando-a hidrofóbica. A molhabilidade deve ser modelada numericamente através da imposição do ângulo de contato no ponto triplo gota-gás-partícula, no caso estudado  $\theta = 118^\circ$ . No entanto, o presente trabalho contou apenas com o fato de que os métodos de captura da interface e transporte garantiram um ângulo de contato  $\theta > 90^\circ \approx 118^\circ$ , o que é suficiente para a modelagem de muitos fenômenos físicos. A modelagem numérica controlada do ângulo de contato é um item a ser contemplado em trabalhos futuros, que garantirá maior precisão nos resultados e permitirá a simulação de uma ampla variedade de pares de líquido-sólido com distintas molhabilidades.

As simulações numéricas realizadas por Banitabaei e Amirfazli (2017) consideraram um domínio de seção longitudinal  $28 \times 8 \text{ mm}^2$ , com condição de contorno de pressão ambiente e simetria axial no plano que divide a partícula e a gota em duas partes iguais. O presente trabalho não considerou a simetria e utilizou um domínio cúbico com aresta de  $56 \text{ mm}$ , o dobro da maior dimensão utilizada pela referência, Fig. 4.1. As dimensões extendidas do domínio não oneram a simulação, uma vez que a malha *octree* é adaptativa, e asseguram a condição de contorno de Neumann para a velocidade.

A Figura 4.2 ilustra as dimensões da partícula, da gota e da lamela, utilizadas como (a) condições iniciais e para (b) validação com a referência. A partícula, representada em vermelho, é fixa e possui diâmetro  $D_p$ , enquanto a gota, representada em azul, possui diâmetro  $D_d$ , e velocidade inicial  $V_d$  não nula. Essa velocidade é imposta para o momento anterior ao impacto, sendo a gota posteriormente acelerada pela ação da gravidade, e desacelerada pela colisão com

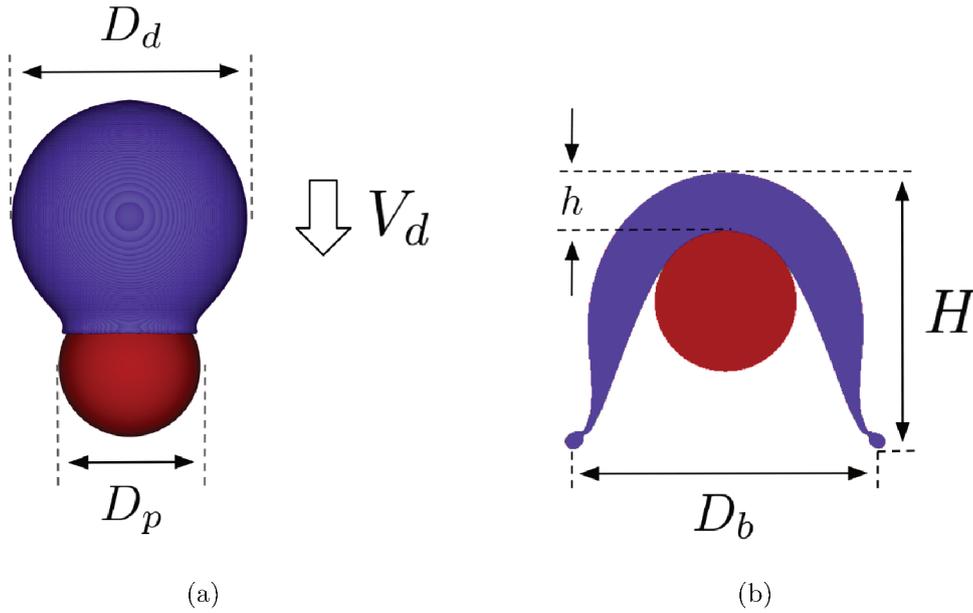


Figura 4.2: Dimensões da gota, partícula e lamela.

a partícula e pelos efeitos viscosos com o gás. A altura da lamela,  $H$ , é definida como a distância entre os pontos de líquido mais distantes na dimensão  $y$ , e o diâmetro da sua base,  $D_b$ , é dado pela distância entre os pontos de líquido mais distantes na dimensão  $x$ , enquanto  $h$  equivale à altura do filme líquido formado sobre a partícula.

#### 4.1.2 Simulação numérica

As simulações numéricas dos dois casos apresentados na Tabela 4.2 foram realizadas com o código Basilisk (FUSTER; POPINET, 2018). As simulações são baseadas na abordagem conservativa das equações de transporte em malha *octree* adaptativa, sem modelagem direta do ângulo de contato líquido-sólido, e com a partícula sendo representada com método de fronteira imersa não-conservativo — via imposição de velocidade nula nos volumes de controle localizados em seu interior.

Tabela 4.2: Casos simulados para validação. Parâmetros baseados nas propriedades do líquido.

Caso	$V_d$ [m/s]	Re	We	Oh
C1	1,8	5.940	146	0,002
C2	5,0	16.500	1.133	0,002

Os casos apresentados na Tabela 4.2 representam dois extremos baixo-Reynolds/baixo-Weber e alto-Reynolds/alto-Weber, para os quais há formação de lamela pela colisão gota-partícula com razão de diâmetro  $D_r = 1,75$ . Ambos os casos possuem o mesmo número de Ohnesorge. No cenário de colisão gota-partícula, os parâmetros adimensionais são usualmente dados em função das propriedades do líquido, segundo

$$\text{Re} = \frac{\rho_l D_d V_d}{\mu_l}, \quad (4.1)$$

$$\text{We} = \frac{\rho_l D_d V_d^2}{\gamma}, \quad (4.2)$$

e

$$\text{Oh} = \frac{\sqrt{\text{We}}}{\text{Re}}. \quad (4.3)$$

Os recursos computacionais utilizados possibilitaram resultados em concordância com a literatura experimental, Seção 4.1.3. Para o caso com maior número de Weber,  $C2$ , utilizou-se nível máximo de refinamento  $l12$ , equivalente à  $D_p/\Delta = 240$ . Como a espessura estimada da lamela para o caso com menor número de Weber,  $C1$ , é inferior à  $C2$ , utilizou-se para esse caso o nível máximo de refinamento  $l11$ , equivalente à  $D_p/\Delta = 120$ .

As Figuras 4.3 e 4.4 apresentam a evolução temporal da formação da lamela para os dois casos estudados,  $C1$  e  $C2$ , respectivamente, através de cortes transversais da fração volumétrica do líquido, representado em vermelho, e da partícula sólida, representada em preto. Os resultados são apresentados na faixa de tempo adimensional,  $t^* = t \cdot V_d/D_d$ , de 0,39 a 2,26 para  $C1$ , e de 0,21 a 2,38 para  $C2$ .

Objetivando a comparação das duas simulações, cinco regiões da lamela são destacadas: filme líquido sobre a partícula, região de descolamento lamela-

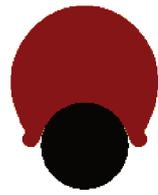
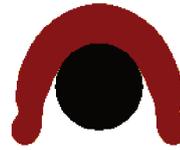
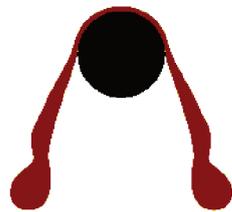
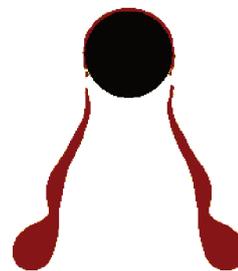
(a)  $t^* = 0,39$ (b)  $t^* = 0,86$ (c)  $t^* = 1,71$ (d)  $t^* = 2,26$ 

Figura 4.3: Seção transversal da evolução temporal da lamela para  $C1$  em malha com nível de refinamento máximo  $l11$ .

partícula, fração mais espessa pré-anel da lamela, área de constricção e diâmetro do anel. A Figura 4.5 apresenta as medidas dessas regiões em milímetros, seguidas entre parênteses pela porcentagem em relação ao diâmetro inicial da gota.

As espessuras do filme líquido sobre a partícula e da fração mais espessa

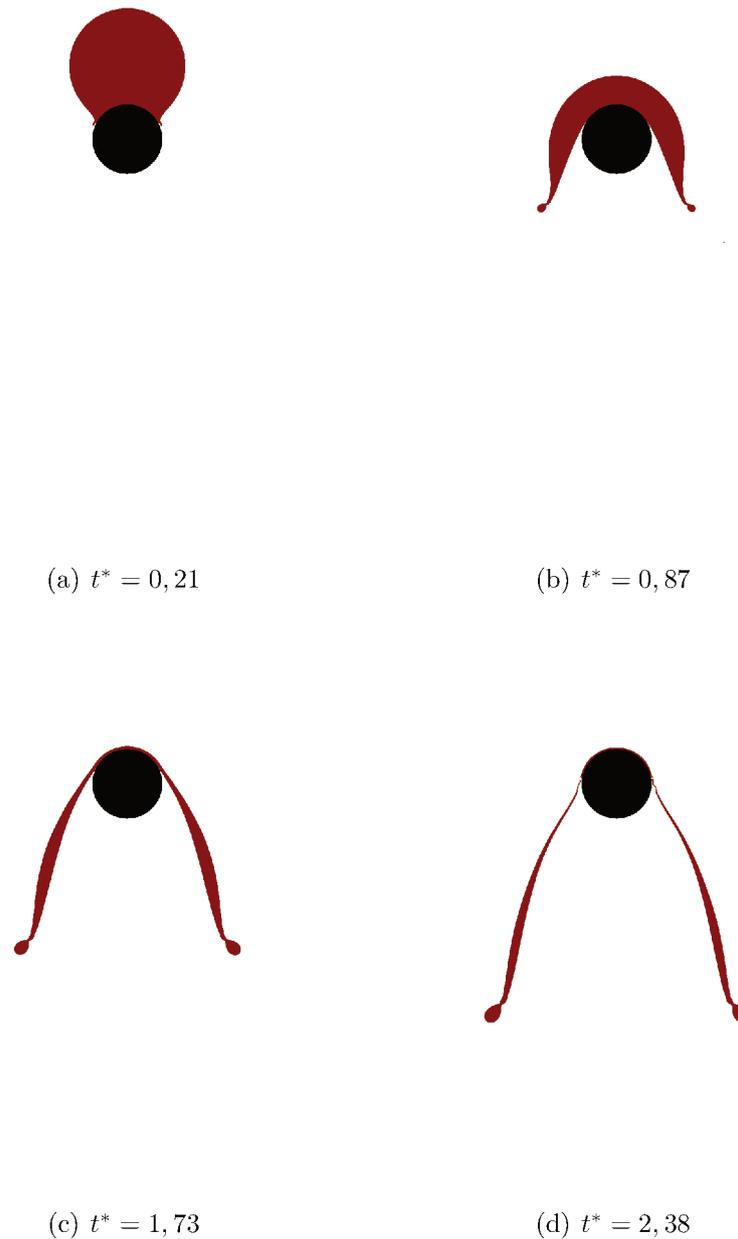


Figura 4.4: Seção transversal da evolução temporal da lamela para  $C2$  em malha com nível de refinamento máximo  $l12$ .

pré-anel da lamela em  $C2$  corresponderam à 80% dos valores apresentados em  $C1$ , enquanto a região de descolamento lamela-partícula e o diâmetro do anel reduziram pela metade de  $C2$  para  $C1$ . A espessura da área de constricção apresentou a maior variação, quadruplicando de  $C2$  para  $C1$ .

Apesar das medidas absolutas da lamela na comparação de  $C1$  com  $C2$  apresentarem as tendências de diminuição reportadas, é necessário analisar esses valores em relação à razão dos parâmetros adimensionais dos dois casos. Essas

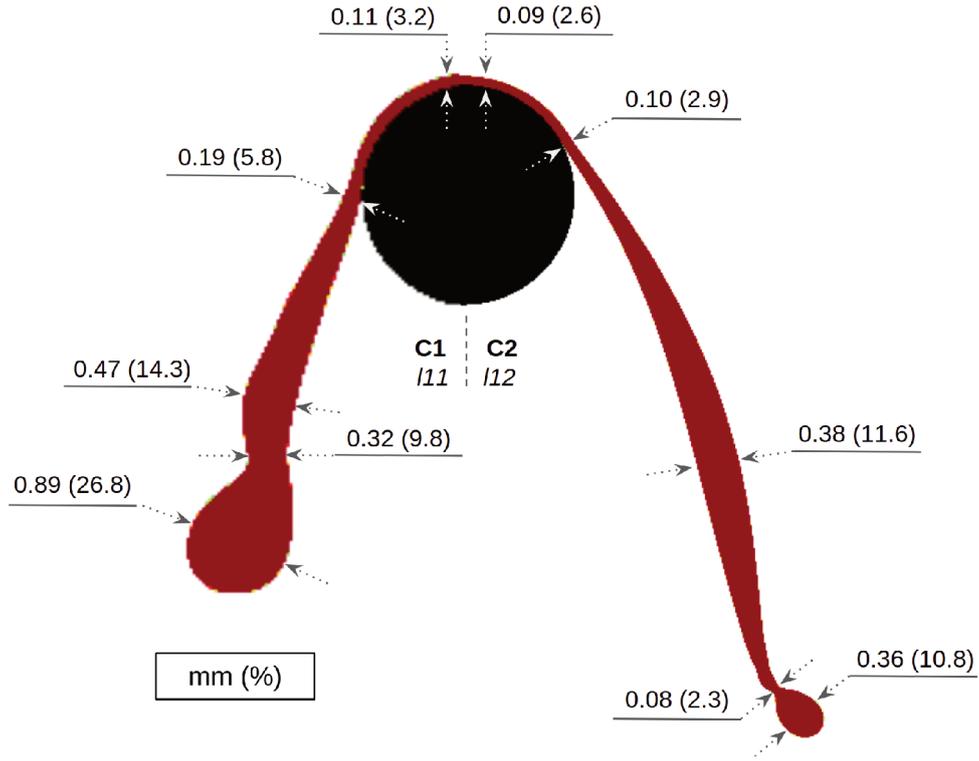


Figura 4.5: Medidas da lamela para  $C1$ , à esquerda, e  $C2$ , à direita, para  $t^* = 1,7$ . Separação decimal em formatação inglesa.

relações são  $Re_{C2}/Re_{C1} = 2,8$ ,  $We_{C2}/We_{C1} = 7,8$  e

$$\frac{\sqrt{We_{C2}/We_{C1}}}{Re_{C2}/Re_{C1}} \approx 1,0. \quad (4.4)$$

Trabalhos futuros podem contemplar a investigação da relação entre os parâmetros do escoamento (e.g.,  $D_r$ ,  $Re$ ,  $We$ ) e a geometria detalhada da lamela, dependendo do interesse teórico e prático.

As Figuras 4.6 e 4.7 apresentam a malha *octree* com refinamento adaptativo, em dois instantes da simulação, para  $C1$  e  $C2$ , respectivamente. Em ambas as figuras, uma perspectiva geral do domínio é apresentado à esquerda, (a) e (c), e uma ampliação na região de interesse é exibida à direita, (b) e (d); tons de cinza mais escuros representam volumes de controle menores em níveis de refinamento mais elevados.

Tanto a região de interface da gota (i.e., líquido-gás) quanto da partícula (i.e., sólido-gás) são inicialmente refinadas com o nível  $l11$ , para  $C1$ , e  $l12$ , para

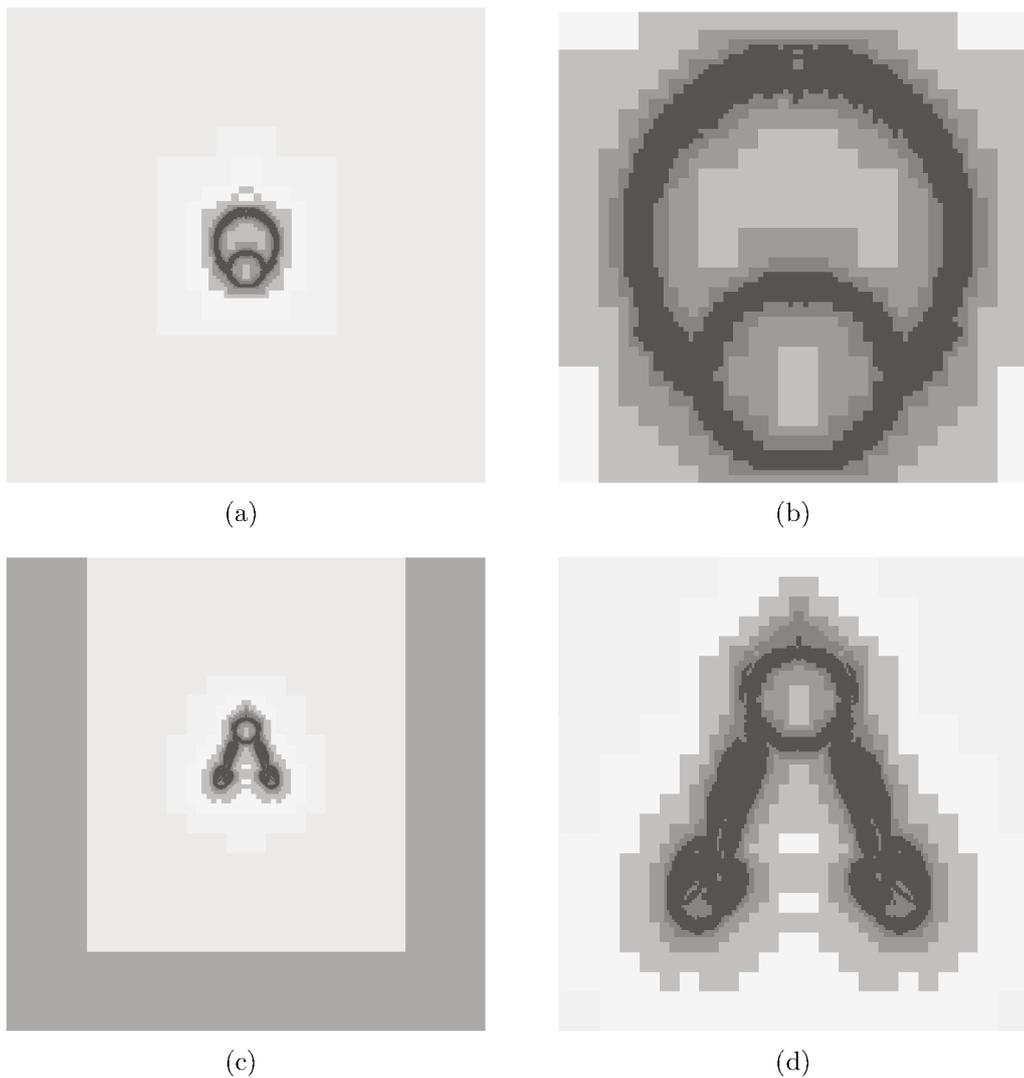


Figura 4.6: Seção transversal da malha *octree* adaptativa em  $C1$ . Momento inicial, acima, momento final, abaixo. Visão geral, à esquerda, ampliação, à direita.

$C2$ . A malha é adaptada durante a simulação de acordo com os erros dos campos da fração volumétrica e da velocidade, de acordo com a função *wavelet*, com tolerâncias de  $1 \cdot 10^{-3}$  e  $1 \cdot 10^{-2}$ , respectivamente.

A Figura 4.7-*d* ilustra as zonas de refinamento acompanhando o filme líquido com ângulo de abertura menor do que as zonas de refinamento dos vórtices, desprendidos pela movimentação descendente da lamela.

O refinamento adaptativo garante que a resolução espacial das equações discretizadas seja adequada em regiões específicas do domínio para capturar fenômenos de interesse. O emprego da malha *octree* permitiu estender as dimensões do domínio de simulação, garantindo que as condições de contorno (i.e., pressão

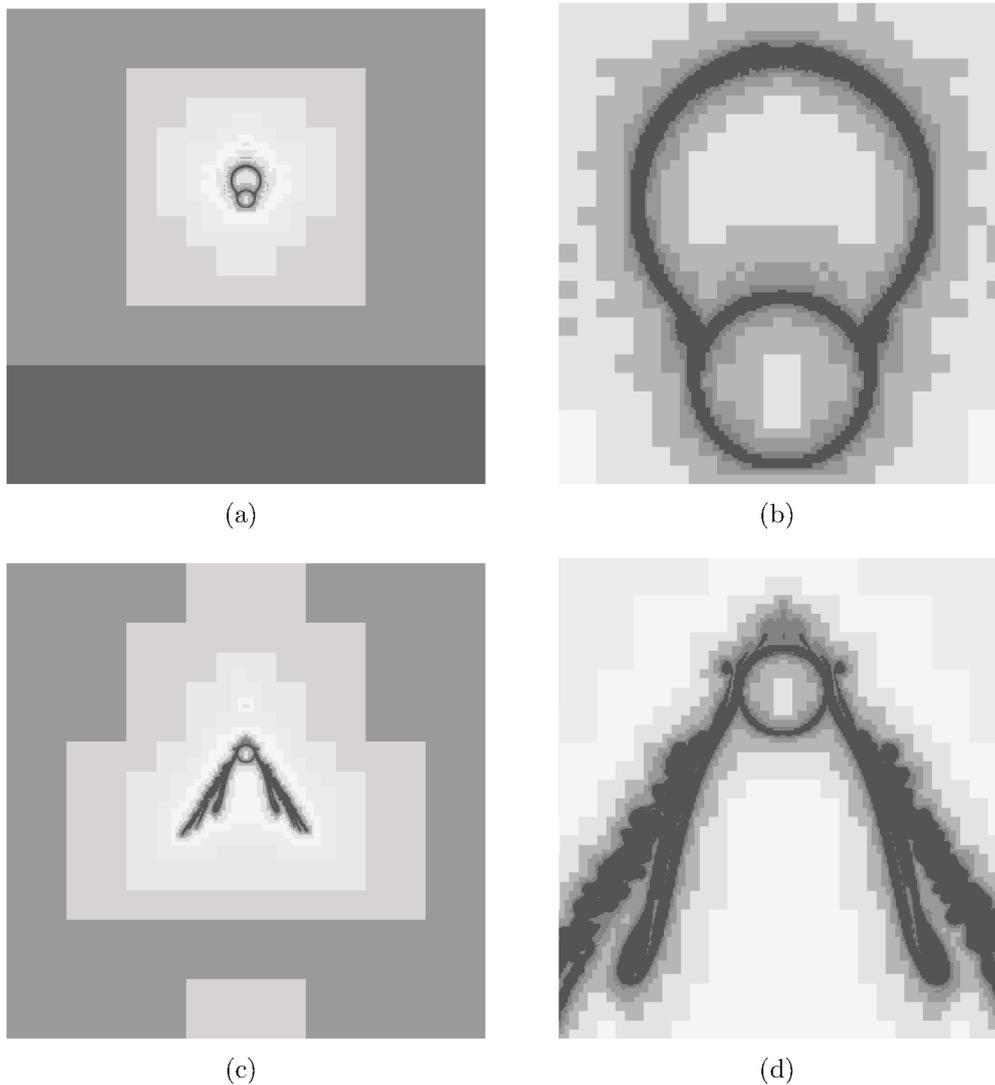
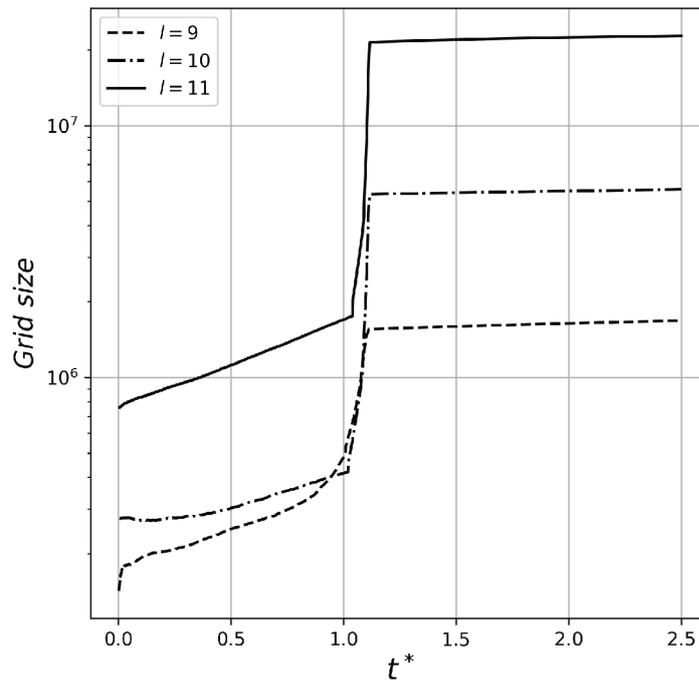


Figura 4.7: Seção transversal da malha *octree* adaptativa em  $C2$ . Momento inicial, acima, momento final, abaixo. Visão geral, à esquerda, ampliação, à direita.

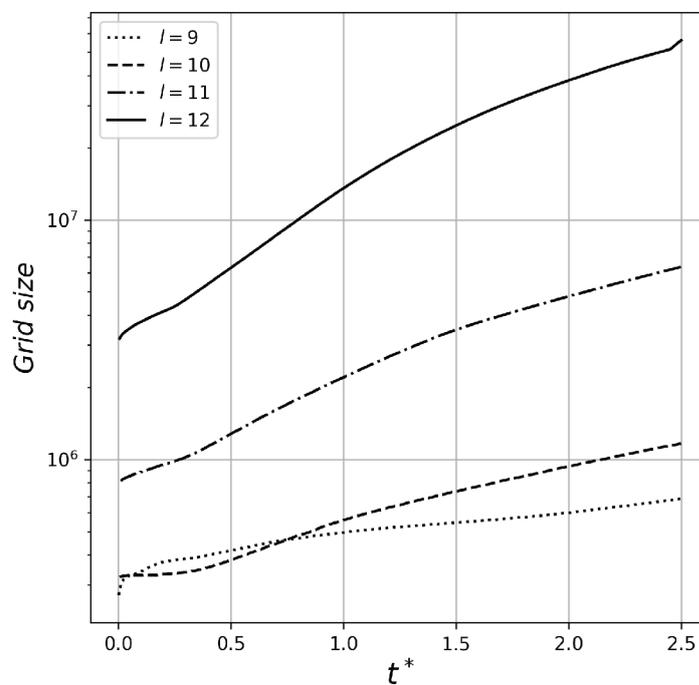
ambiente imposta e derivada nula da componente tangencial da velocidade) fossem respeitadas e não influenciassem o escoamento em sua região central.

A Figura 4.8 mostra que no instante final,  $t^* = 2,5$ , das simulações com nível de refinamento mais grosseiro,  $l9$ ,  $C1$  apresentou aproximadamente 3 vezes mais elementos do que  $C2$ . Além das diferenças morfológicas da lamela e da dinâmica do escoamento entre os dois casos, isso se deve ao fato de que a fração volumétrica do líquido sofre perdas quando a resolução espacial não é suficientemente refinada para a representação da interface bifásica, Figs. 4.9 e 4.10.

O comprimento dos menores volumes de controle dos níveis de refina-



(a) C1



(b) C2

Figura 4.8: Quantidade de volumes de controle da malha numérica (*grid size*) para níveis de refinamento de  $l_9$  à  $l_{12}$  em função do tempo adimensional  $t^*$ .

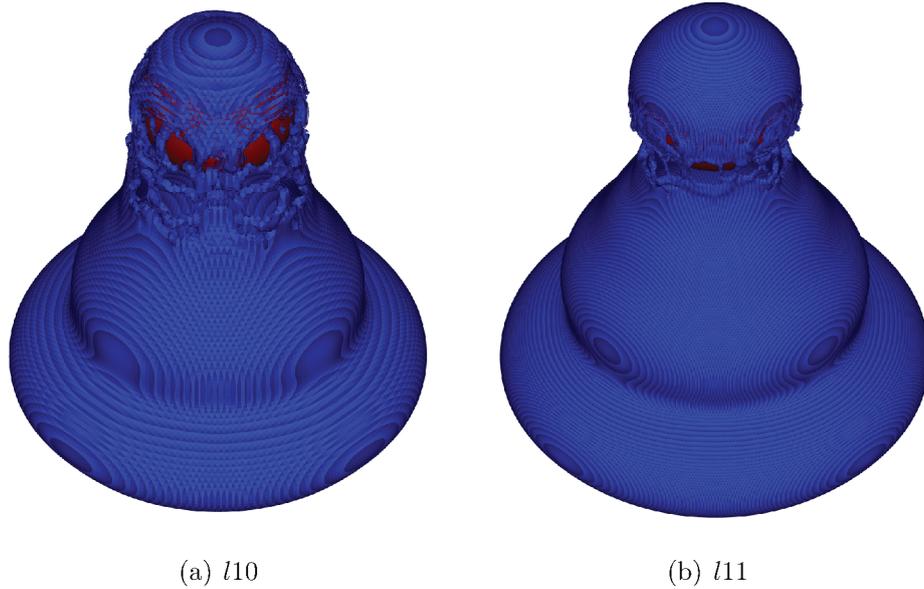


Figura 4.9: Perspectiva isométrica da lamela ( $\alpha = 0,5$ ), azul, e da partícula, vermelho, em  $t^* = 2,26$ .

mento  $l_9$  e  $l_{12}$  são 30 e 240 vezes menores do que o diâmetro da gota, equivalentes em valores absolutos à  $67 \mu m$  e  $8 \mu m$ , respectivamente.

A simulação com maior densidade de malha foi  $C2$  com nível de refinamento  $l_{12}$ , para a qual foram utilizados 62 milhões de elementos. Considerando que cada 1 *Gb* RAM comportou aproximadamente 350 mil elementos, o máximo de recurso computacional utilizado foi de 155 *Gb* RAM.

Um detalhamento do custo computacional para capturar todo o filme líquido é apresentado na próxima seção, no entanto, simulações considerando condição de contorno periódica em todas as direções apontaram uma redução de  $1/3$  desse custo. Isso ocorre porque a condição periódica deixa o sistema mais livre, não requisitando o refinamento na fronteira como ocorre com a condição de contorno de Neumann. Levando em conta que o escoamento não atinge as fronteiras do domínio no tempo de simulação de interesse, a condição periódica é igualmente válida no sistema estudado.

As Figuras 4.9 e 4.10 destacam o efeito do nível de refinamento sobre a representação morfológica da cortina de filme líquido. Lamelas mais finas favorecem a fragmentação, com liberação de gotículas nas extremidades de seus anéis, como observável em  $C2$  e não em  $C1$ . Adicionalmente, à medida que a representação

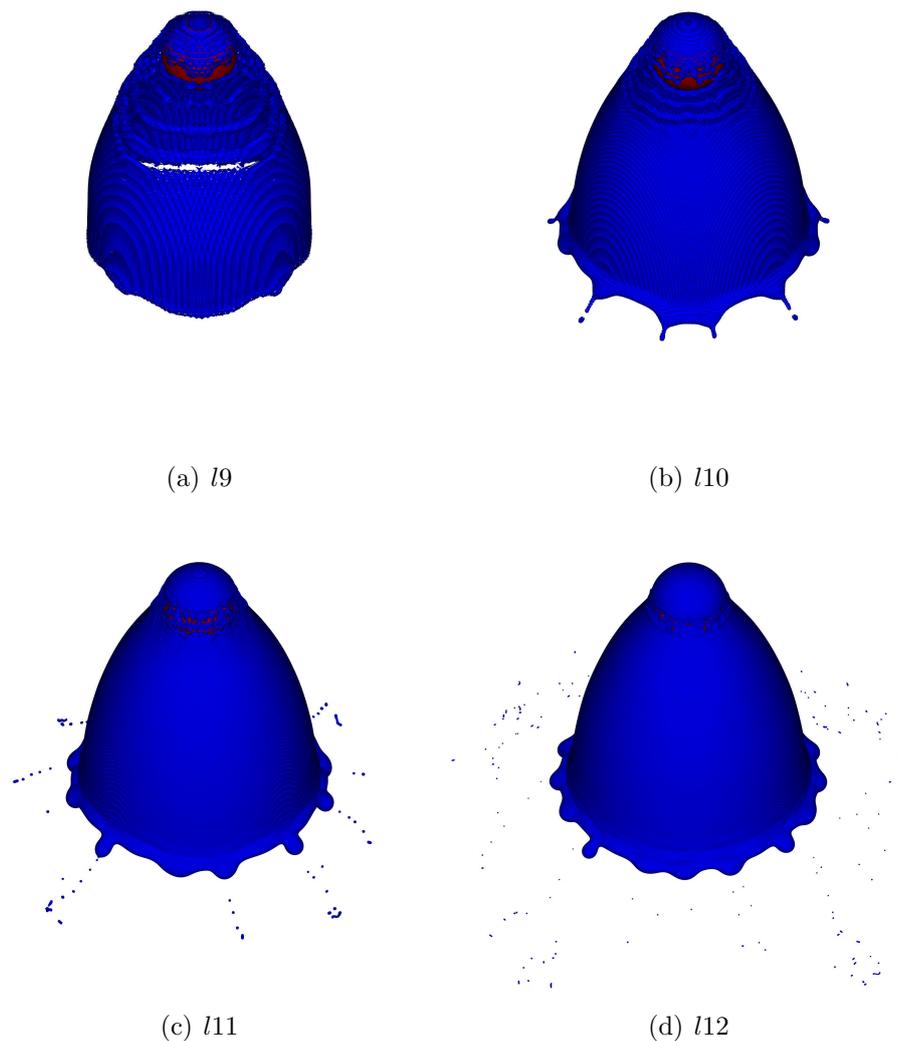


Figura 4.10: Perspectiva isométrica da lamela ( $\alpha = 0,5$ ), azul, e da partícula, vermelho, em  $t^* = 2,38$ .

da interface bifásica se torna mais fidedigna, é possível observar a maior frequência de *breakup* e a correta previsão do tamanho das gotas.

O escopo do presente estudo não contemplou a caracterização da fragmentação do filme, nem tampouco a relação desse fenômeno com as características do escoamento e da colisão; no entanto, é possível observar na Figura 4.10 a dinâmica da formação da lamela, de seus anéis e do comprimento de onda das franjas que culminam na fragmentação em gotas.

Para o mesmo tempo adimensional,  $t^* = 1,7$ , as Figuras 4.11 e 4.12 mostram as diferenças morfológicas das lamelas, predominantemente decorrentes da razão do número de Weber: seu diâmetro de base e seu comprimento longi-

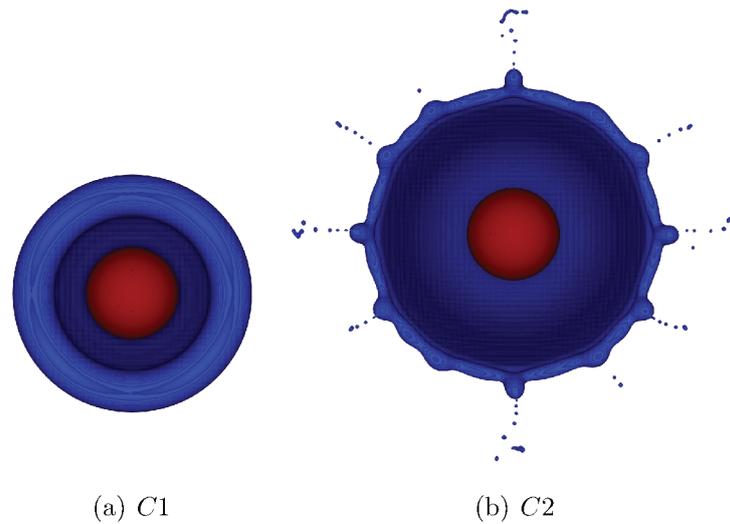


Figura 4.11: Vista inferior da lamela, azul, se estendendo sobre a partícula, vermelho, para  $C1$  e  $C2$  em  $t^* = 1,7$  e nível de refinamento  $l11$ .

tudinal em  $C2$  são ambos aproximadamente 1,4 vezes maiores do que em  $C1$ , desconsiderando a posição das gotas fragmentadas, quando existentes.

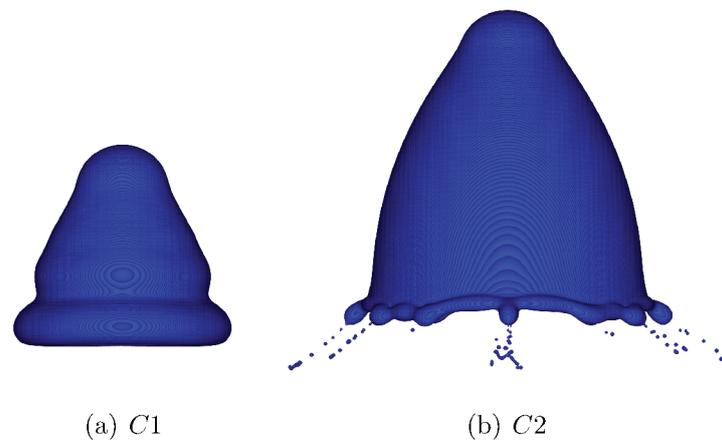


Figura 4.12: Vista frontal da lamela, azul, para  $C1$  e  $C2$  em  $t^* = 1,7$  e nível de refinamento  $l11$ .

#### 4.1.3 Validação

As simulações apresentadas anteriormente são validadas nesta seção com base no trabalho experimental de Banitabaei e Amirfazli (2017). Para tanto, são considerandos os parâmetros geométricos da lamela: diâmetro da base, altura e espessura do filme líquido sobre a partícula.

O filme líquido remanescente sobre a partícula, formado após a colisão

da gota e a deformação da lamela, chega a medir 1 milésimo do diâmetro inicial da gota, afinando-se à medida que o filme líquido é continuamente estirado. Nos resultados apresentados, a resolução espacial das simulações permitiram a captura da espessura do filme líquido até 1 centésimo do diâmetro inicial da gota.

A Figura 4.13 apresenta o gráfico da espessura adimensional do filme líquido em função do tempo adimensional. Observa-se a concordância com o experimento até os limite da resolução fornecida por cada nível de refinamento de malha.

Para  $C1$ , os níveis de refinamento  $l9$ ,  $l10$  e  $l11$  geraram malhas com 1.676.844, 5.573.086 e 22.715.792 de elementos, respectivamente. Para  $C2$ , esses valores foram, acrescidos do nível  $l12$ , 684.489, 1.165.298, 6.360.628 e 56.166.979, respectivamente. Com base nos resultados apresentados, observa-se uma tendência exponencial de crescimento do tamanho da malha com relação ao nível de refinamento.

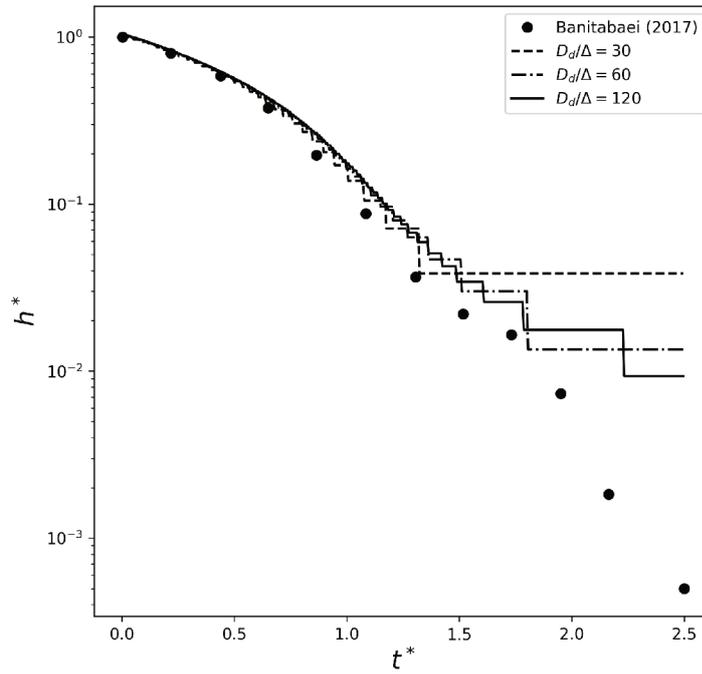
Aumentar em uma unidade o nível de refinamento (e.g.,  $l11$  para  $l12$ ), ou seja, dobrar a resolução espacial, equivale a reduzir em oito vezes o tamanho do volume de controle. Portanto, para sair de centenas de micrometro para 1 micrometro, a fim de se alcançar a resolução experimental do filme líquido em  $t^* = 2,5$ , seria necessário o nível de refinamento  $l16$ ; ainda, para garantir a descrição do filme, com no máximo 4 elementos em seu interior, seria necessário o nível de refinamento  $l18$ .

Esses valores foram estimados à partir das equações exponenciais ajustadas para  $C1$  e  $C2$ , respectivamente,

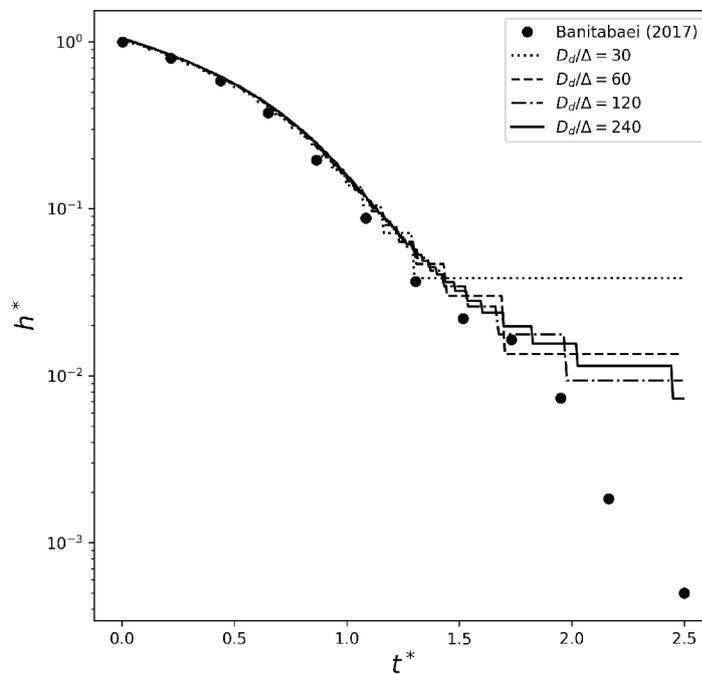
$$M_{C1} = 13,08 \cdot e^{1,30l}, \quad (4.5)$$

com coeficiente de determinação  $R^2 = 0,99$ ; onde  $M$  é o número de volumes de controle da malha e  $l$  é o nível de refinamento, e

$$M_{C2} = 0,65 \cdot e^{1,49l}, \quad (4.6)$$



(a) C1



(b) C2

Figura 4.13: Espessura adimensional do filme líquido sobre a partícula,  $h^*/D_d$ , em função do tempo adimensional,  $t^*$ , para níveis de refinamento de malha variados.

com  $R^2 = 0,94$ .

O trabalho de Banitabaei e Amirfazli (2017) não apresentou o gráfico da Figura 4.13 com o eixo  $y$  na forma logarítmica, o que impede a compreensão dos desafios da simulação de microfilmes em domínio computacional da ordem de dezenas de milímetros. No entanto, os autores propuseram uma relação  $h^* = f(t^*)$ ,

$$h^* = a \cdot e^{-\frac{(t^*-b)^2}{c}}, \quad (4.7)$$

onde  $a = 1,06$ ,  $b = -0,22$  e  $c = 0,71$ , cuja variável normalizada independe do caso analisado (i.e., números de Reynolds e Weber).

As Figuras 4.14 e 4.15 mostram a validação realizada com relação ao comprimento e ao diâmetro da base da lamela, para  $C1$  e  $C2$ , respectivamente, em dois tempos adimensionais distintos. Nessas imagens, o fundo semi-transparente corresponde aos resultados experimentais da referência utilizada, enquanto o contorno em linha sobreposta se refere aos resultados numéricos do presente trabalho.

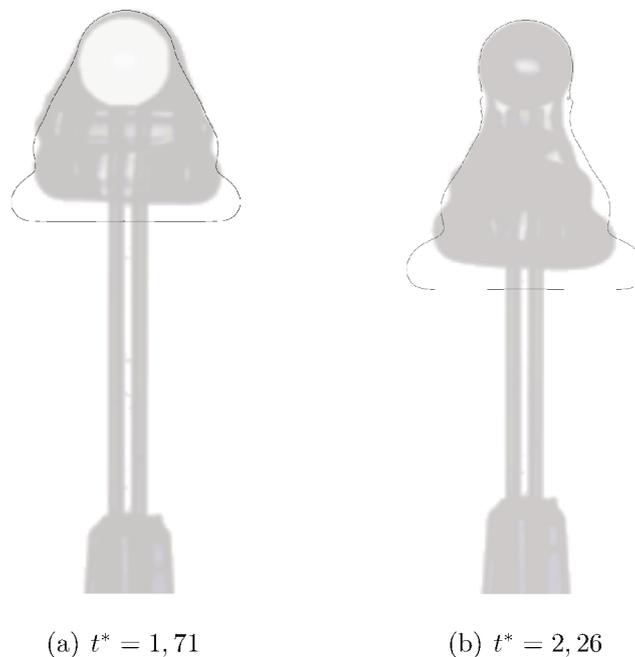


Figura 4.14: Perfis numéricos, contorno em linha, e experimentais, fundo semi-transparente, para  $C1$ . Resultados numéricos correspondentes ao nível de refinamento  $l11$ .

Na presente validação, considerou-se a variação do espaçamento gota-

partícula, no momento definido como inicial nos experimentos. Esses valores são apresentados em relação ao diâmetro da partícula, sendo mínimo de 4%, máximo de 42% e médio de 16%. Isso significa que, embora no experimento a distância inicial da gota em relação à partícula tenha variado significativamente de um caso para outro, o valor relativo de 8% foi adotado em todas as simulações realizadas.

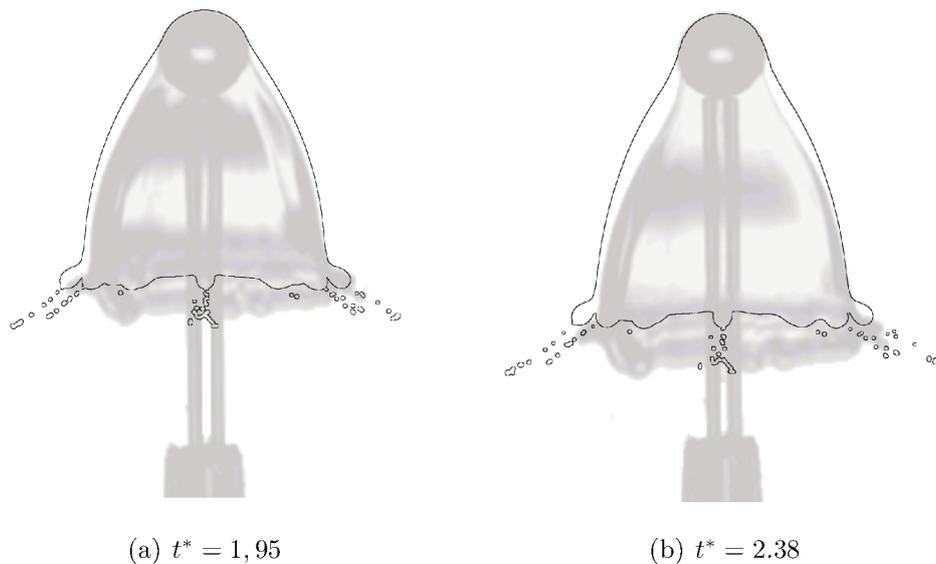
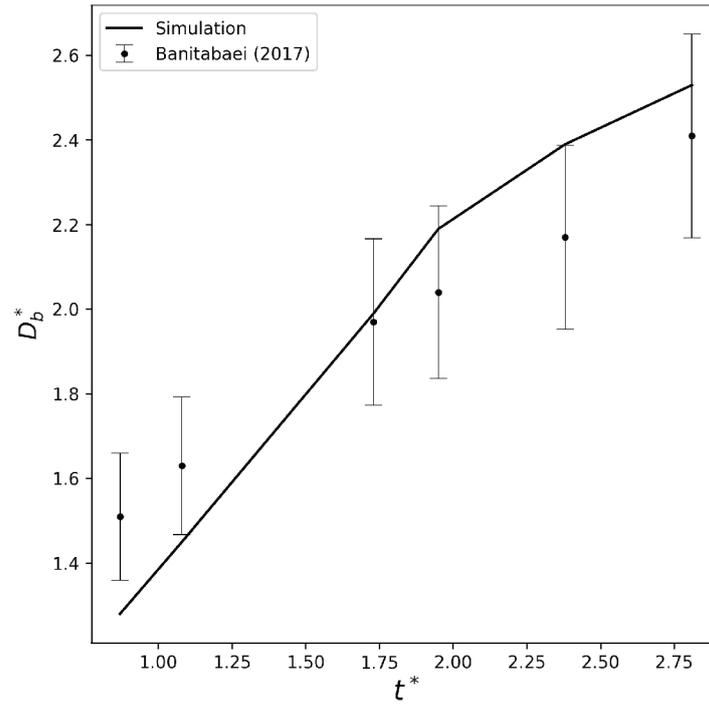


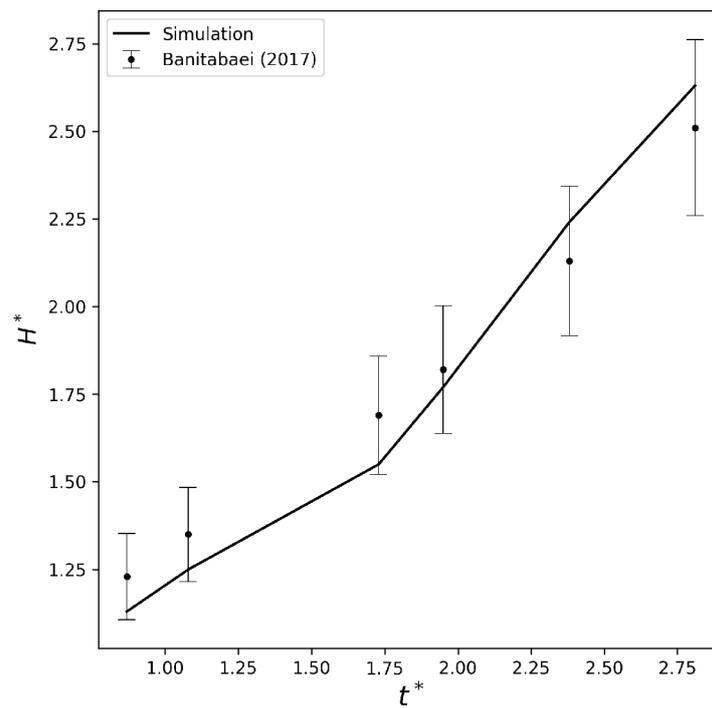
Figura 4.15: Perfis numéricos, contorno em linha, e experimentais, fundo semi-transparente, para  $C2$ . Resultados numéricos correspondentes ao nível de refinamento  $l11$ .

Os perfis numéricos e experimentais apresentam correspondência dentro do esperado. No entanto, a modelagem do ângulo de contato de  $118^\circ$  afeta diretamente a geometria da lamela, e a sua ausência neste trabalho certamente influenciou a precisão dos resultados numéricos.

A Figura 4.16 apresenta a validação quantitativa do diâmetro de base e altura adimensional da lamela, para o tempo adimensional  $t^* = 2,75$ . Considerando as incertezas envolvidas na reprodução das condições exatas do experimento, assim como a ausência da modelagem numérica controlada do ângulo de contato, os resultados apresentam concordância em termos de tendência e valores absolutos com o *benchmark*.



(a)



(b)

Figura 4.16: (a) Diâmetro de base e (b) altura adimensional da lamela para o tempo adimensional  $t^* = 2,75$ . Dados experimentais com barras de erro de  $\pm 10\%$ .

#### 4.1.4 Planejamento de experimento computacional

Através do planejamento fatorial  $2^k$ , esta seção analisa os efeitos dos números de Reynolds e Weber,  $k = 2$  fatores, sobre a área interfacial adimensional da lamela,  $A^* = A/A_d$ , no instante  $t^* \approx 1$ .

Como o tempo adimensional é definido pela razão do deslocamento da gota,  $t \cdot V_d$ , pelo seu diâmetro,  $D_d$ , compreende-se a avaliação da área da lamela no momento em que essa se deslocou uma unidade de diâmetro, Fig. 4.17.

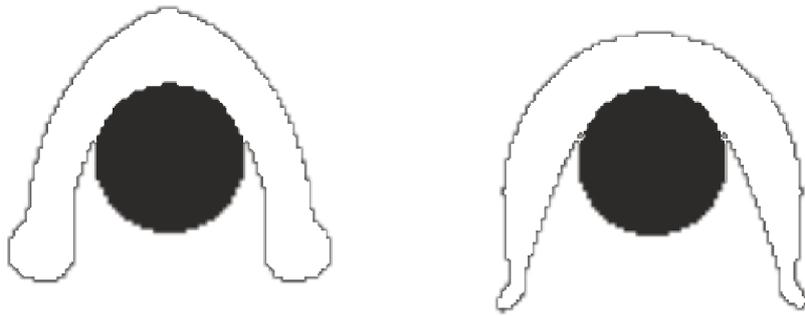


Figura 4.17: Vista frontal, em corte, da lamela e da partícula em  $t^* \approx 1$ . Casos extremos do planejamento fatorial: à esquerda,  $Re = 10^3$   $We = 10^2$ , e à direita,  $Re = 10^4$   $We = 10^3$ .

Cada fator é avaliado em dois níveis  $Re = [10^3 - 10^4]$  e  $We = [10^2 - 10^3]$ , com a hipótese de que a resposta nestes intervalos é monotônica e linear. Adicionalmente, são consideradas  $n = 3$  réplicas, totalizando-se  $n \cdot 2^k = 12$  simulações.

Tabela 4.3: Valores de  $A^*$  obtidos por simulação.

Vértice	Fator		Réplica		
	Re	We	I	II	III
(1)	$10^3$	$10^2$	1,86	1,66	1,46
a	$10^4$	$10^2$	1,65	1,48	1,31
b	$10^3$	$10^3$	2,26	2,03	1,78
ab	$10^4$	$10^3$	2,11	1,89	1,68

As réplicas permitem estimar o erro experimental, que se caracteriza como uma medida elementar para determinar se as diferenças nos resultados são estatisticamente significantes. Elas também contribuem com a maior precisão na estimativa da média populacional a partir da média amostral (MONTGOMERY,

2013).

Este planejamento fatorial utilizou réplicas que se diferenciam na forma inicial da gota, sendo variado o nível de esfericidade à semelhança do estágio pré-impacto observado no experimento,  $\varphi = 1,0, 0,9$  e  $0,8$ , e a consequente distância inicial gota-partícula, Fig. 4.18.

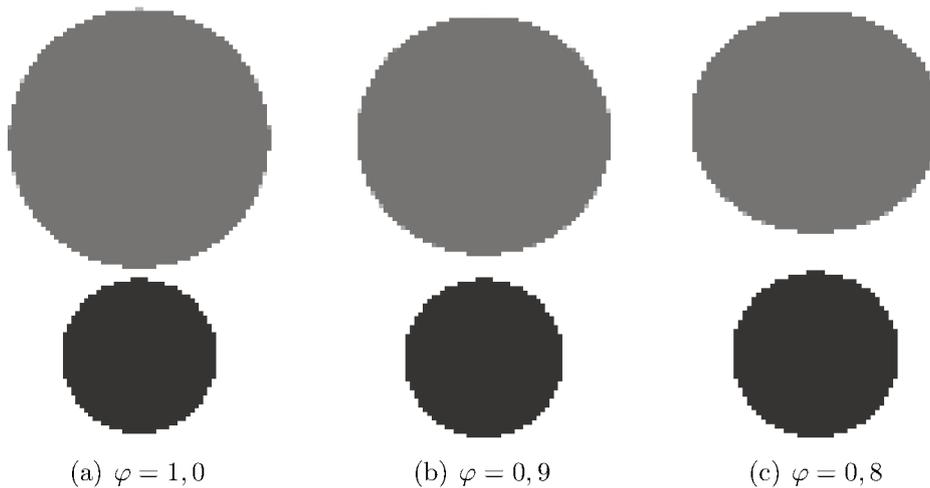


Figura 4.18: Cenários utilizados como réplicas no planejamento fatorial. Variação do formato inicial da gota na simulação e de sua distância até a partícula: gota (cinza), partícula (preto).

Para cada uma das três réplicas,  $R_b = 0,5 \cdot D_d/\varphi$ . Assim, manteve-se o volume inicial da gota,  $\frac{4}{3}\pi R_a R_b R_c$ , alterando as demais dimensões  $R_a = R_c = 0,5 \cdot \sqrt{\varphi} \cdot D_d$ , Fig. 4.19.

*ab*

Desta forma, as réplicas permitiram estimar o erro de experimento computacional associado às variações da condição inicial, diretos e indiretos, na relação entre variáveis controladas e a variável de saída analisada.

Quando se utilizam réplicas, é desejável atender dois pontos: as variâncias dos conjuntos de réplicas em cada vértice do planejamento fatorial, Tab. 4.3, devem ser similares, e o erro do experimento computacional deve possuir uma distribuição normal.

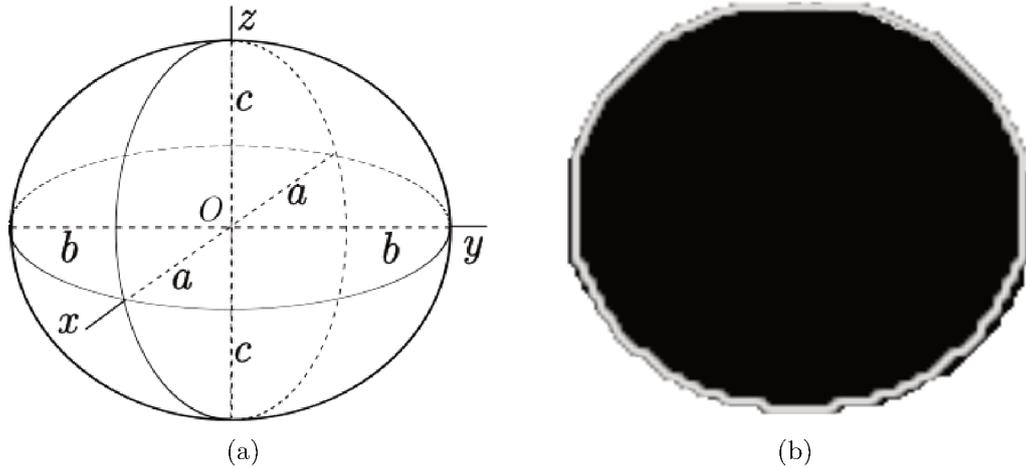


Figura 4.19: (a) Esquema ilustrativo-conceitual do elipsóide. (b) Formato da gota em  $t^* = 0$ : experimento de Banitabaei e Amirfazli (2017), fundo preto, gota numérica com esfericidade  $\varphi = 0,8$ , contorno cinza.

Os vértices (1),  $a$ ,  $b$  e  $ab$  apresentaram variância de 0,040, 0,029, 0,058 e 0,046, respectivamente. Considerando que em experimentos computacionais a magnitude dessas variâncias usualmente variam 10 vezes (LAW, 2009), os resultados atuais são considerados similares entre si.

O erro de experimento computacional,  $e$ , também denominado resíduo, é definido como a diferença entre os valores estimados pelo modelo de regressão linear,

$$\hat{y} = 1,764 - 0,078 \cdot x_1 + 0,194 \cdot x_2 + 0,013 \cdot x_1x_2, \quad (4.8)$$

e os resultados da simulação. As variáveis independentes  $x_1$  e  $x_2$  podem assumir os valores normalizados do planejamento de experimento  $-1$  ou  $1$ , correspondentes aos níveis avaliados dos números de Reynolds e Weber, respectivamente.

A Figura 4.20 apresenta uma *normal probability plot* e o histograma do resíduo, considerando os valores da simulação presentes na Tabela 4.3 e os valores estimados pela Equação 4.8.

A Figura 4.21 mostra graficamente a influência dos números de Reynolds e Weber no intervalo  $0 < t^* < 1,75$ , bem como do próprio tempo, sobre a área adimensional da lamela. Baseado nesse gráfico, o instante  $t^* \approx 1$  foi escolhido para

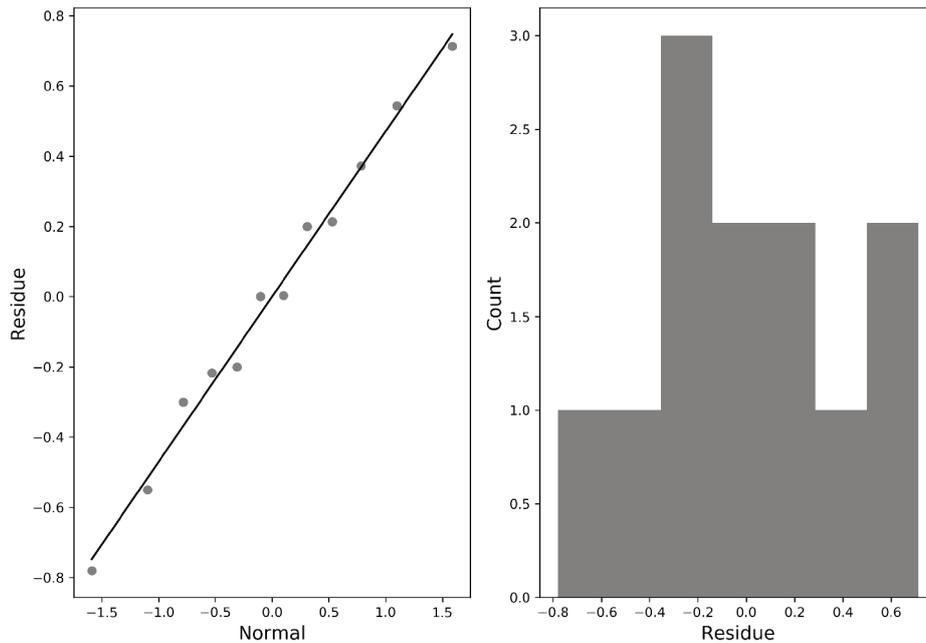


Figura 4.20: *Normal probability plot* do resíduo juntamente com seu histograma.

a análise do planejamento fatorial por representar o momento no qual as curvas de efeito não mais se cruzam.

O efeito do número de Reynolds sobre a área adimensional da lamela é calculado como a diferença da resposta média dos dois tratamentos cujo  $Re = 10^4$  e dos dois tratamentos cujo  $Re = 10^3$ . Semelhantemente, o efeito do número de Weber é baseado nos tratamentos de seus extremos  $We = 10^3$  e  $We = 10^2$ . O efeito da interação entre esses fatores é dado pela diferença da resposta média dos dois tratamentos cujo  $Re$  e  $We$  são ambos máximos e mínimos e dos dois tratamentos onde um dos fatores é máximo e o outro é mínimo.

Desta forma, os efeitos do número de Reynolds, número de Weber e o efeito de interação entre esses fatores são  $E_{Re} = -0,155$ ,  $E_{We} = 0,388$  e  $E_{ReWe} = 0,025$ , respectivamente. Analisando a magnitude relativa entre os efeitos e seus sinais, o planejamento fatorial sugere que aumentar o número de Reynolds tem uma tendência relativamente pequena de diminuir a área interfacial da lamela, enquanto aumentar o número de Weber tem uma tendência relativamente elevada de aumentar a área; o efeito cruzado apresenta uma tendência de aumento de área uma ordem de grandeza menor do que o efeito direto dos fatores.

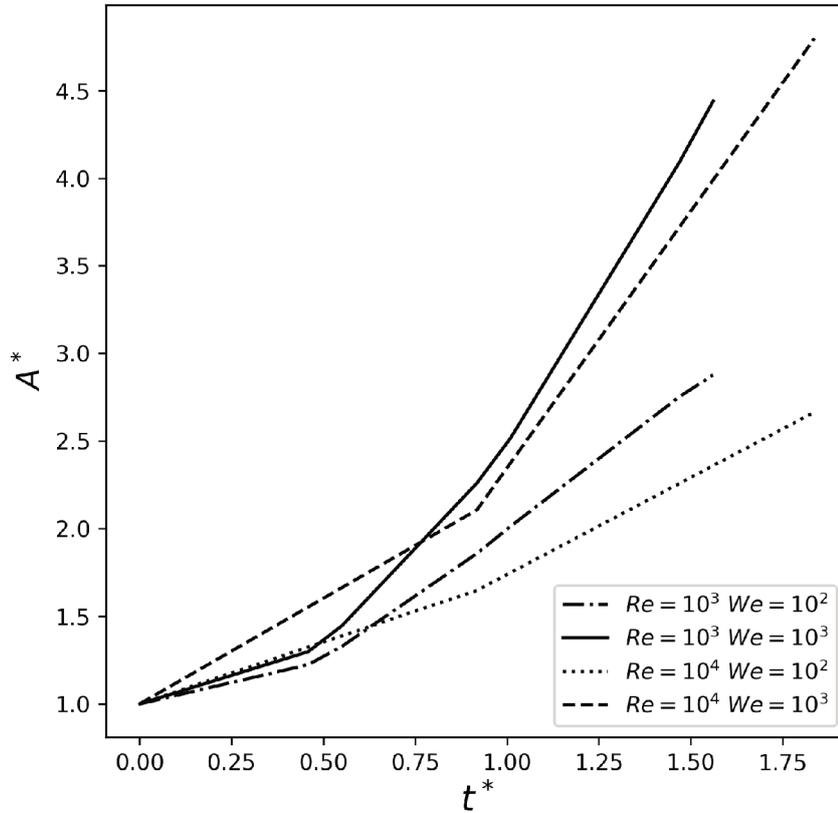


Figura 4.21: Variação da área adimensional da lamela em função do tempo adimensional e dos números de Reynolds e Weber. O planejamento fatorial é realizado com foco no instante  $t^* \approx 1$ .

Para verificar se esses efeitos são estatisticamente significativos e se as interpretações são coerentes, é necessário construir um intervalo de confiança para esses efeitos. Um intervalo de confiança de 95%, com correspondente nível de significância  $\alpha = 0,05$ , e  $(n - 1) = 2$  graus de liberdade, tem valor crítico de *t-value*  $t_{2;0,975} = 4,3027$ . As variâncias amostrais dos efeitos dos números de Reynolds e Weber, e efeito de interação são  $7,8 \cdot 10^{-4}$ ,  $1,8 \cdot 10^{-3}$  e  $3,0 \cdot 10^{-5}$ , respectivamente.

Os intervalos de confiança resultantes (Eq. 3.23) são, portanto,

$$CI_{Re} = -0,155 \pm 0,069, \quad (4.9)$$

$$CI_{We} = 0,388 \pm 0,106, \quad (4.10)$$

$$CI_{ReWe} = 0,025 \pm 0,012. \quad (4.11)$$

Uma vez que esses intervalos não contêm 0, é possível concluir que esses efeitos são estatisticamente significantes.

Ser estatisticamente significativo no contexto apresentado significa que as variações da condição inicial do formato da gota, assim como os efeitos indiretos do escoamento que influenciaram esse formato, não têm relevância estatística nos efeitos calculados, sendo esses principalmente resultantes dos parâmetros controlados no planejamento de experimento computacional, i.e.,  $Re$  e  $We$ .

Como discutido em Law (2017), significância estatística não implica significância prática, o que deve ser avaliado em função da aplicação. Uma análise da energia mecânica do escoamento com vistas aos números de Reynolds e Weber é apresentada na próxima seção.

#### 4.1.5 *Energia mecânica do escoamento*

Como ilustrado na Figura 4.21, existe uma tendência do efeito negativo do número de Reynolds sobre a área da lamela ganhar expressividade com o tempo decorrido do impacto (i.e., curva contínua se distancia da curva tracejada e curva traço-ponto se distancia da curva pontilhada), assim como o efeito positivo do número de Weber (i.e., curva contínua se distancia da curva traço-ponto e curva tracejada se distancia da curva pontilhada).

Considerando os resultados obtidos na Seção 4.1.4, a definição de tensão superficial apresentada no Capítulo 2, e as expressões do números de Reynolds e Weber, conclui-se sob a ótica energética para os escoamentos interfaciais que o acréscimo do número de Weber aumenta a área da lamela por esse representar a

transferência de energia inercial (i.e., cinética) do líquido para energia de superfície, enquanto que o acréscimo do número de Reynolds diminui a área da lamela por representar a transferência de energia inercial do líquido para energia inercial do gás.

Matematicamente, o balanço entre esses efeitos é expressado pela viscosidade dinâmica do gás,  $\mu_g$ , representando o efeito resistivo do líquido em movimento, bloqueador da transformação entre energias cinéticas, e pelo coeficiente de tensão superficial líquido-gás,  $\gamma$ , representando o efeito resistivo da deformação e aumento da área interfacial líquido-gás, bloqueador da transformação entre energia cinética do líquido e/ou do gás e energia de superfície.

Portanto, manter o número de Weber constante e aumentar o número de Reynolds em um escoamento interfacial de colisão gota-partícula implica não somente em uma maior velocidade de impacto, mas também na preferência da transformação da energia cinética do líquido em energia cinética do gás em detrimento da transformação em energia de superfície.

Uma vez que o número de Reynolds é usualmente definido em função da viscosidade dinâmica do líquido (e.g.,  $\mu_l \approx 1.000 \cdot \mu_g$ , no caso água-ar à temperatura e pressão ambiente), a mensuração da transferência de energia inercial líquido-gás pode ser dada por

$$Re_g = \frac{\rho_l D_d V_d}{\mu_g}, \quad (4.12)$$

ponderado pela vazão volumétrica na região de troca energética. Da mesma forma, a mensuração da transferência de energia inercial-superficial pode ser dada pelo número de Weber ponderado pela área interfacial de troca energética, resultando ambas as mensurações numa razão de energias em Joule.

As Figuras 4.22 e 4.23 apresentam as formas de energia mecânica do escoamento (i.e., potencial, cinéticas do líquido e do gás, e interfacial) e a transformação entre elas durante a colisão gota-partícula. É destacado o comportamento das transferências energéticas para as simulações com os níveis de refinamento de

malha  $l = 9, 10$  e  $11$ .

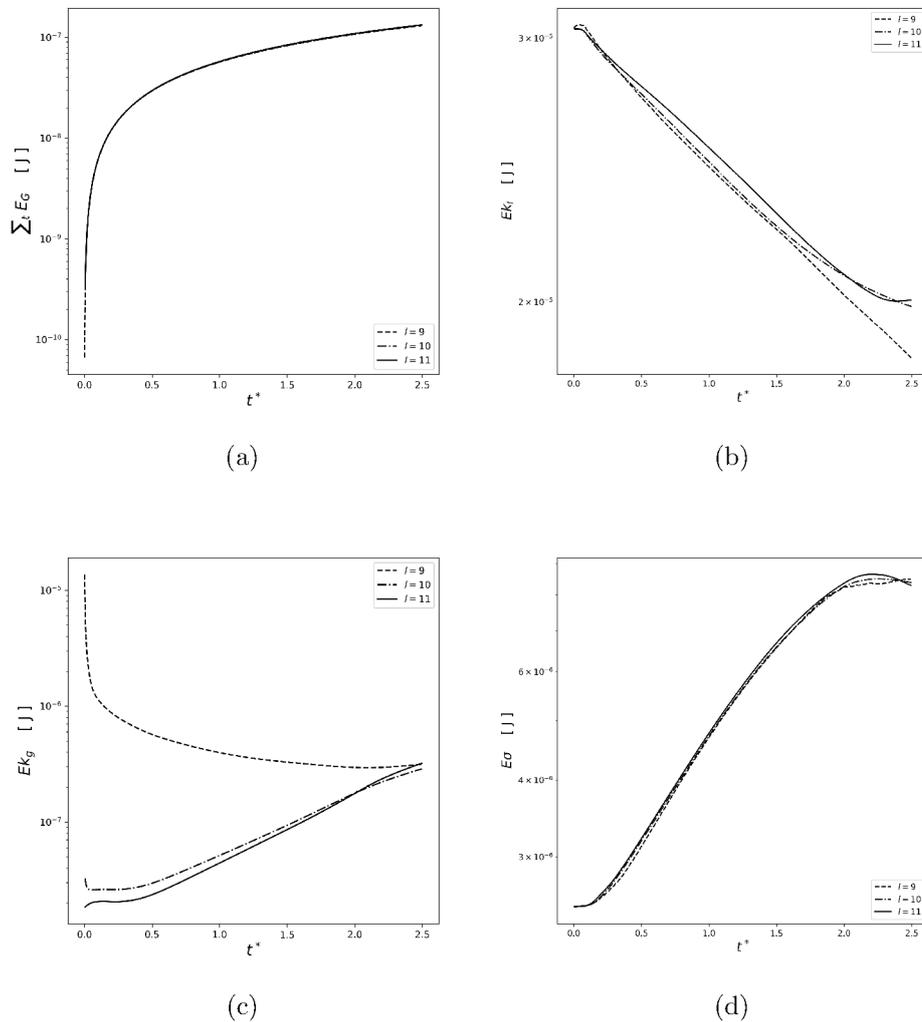


Figura 4.22: Energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de baixo número de Reynolds e baixo número de Weber ( $C1$ ).

Para os dois casos estudados  $C1$  e  $C2$ , Tab. 4.2, observa-se que a energia cinética do gás na simulação com malha  $l = 9$  foi a única a se comportar diametralmente das demais. Esse efeito pode ser explicado devido à adaptatividade da malha *octree*, que no caso do nível mais grosseiro, não forneceu o refinamento adequado nas regiões distantes da zona central. Isso permitiu que o gás acelerado pela gota saísse do domínio sem a resolução acurada da difusão física, sofrendo a perda de energia cinética do gás pelas fronteiras do domínio.

A primeira forma de energia mecânica apresentada nas figuras é a po-

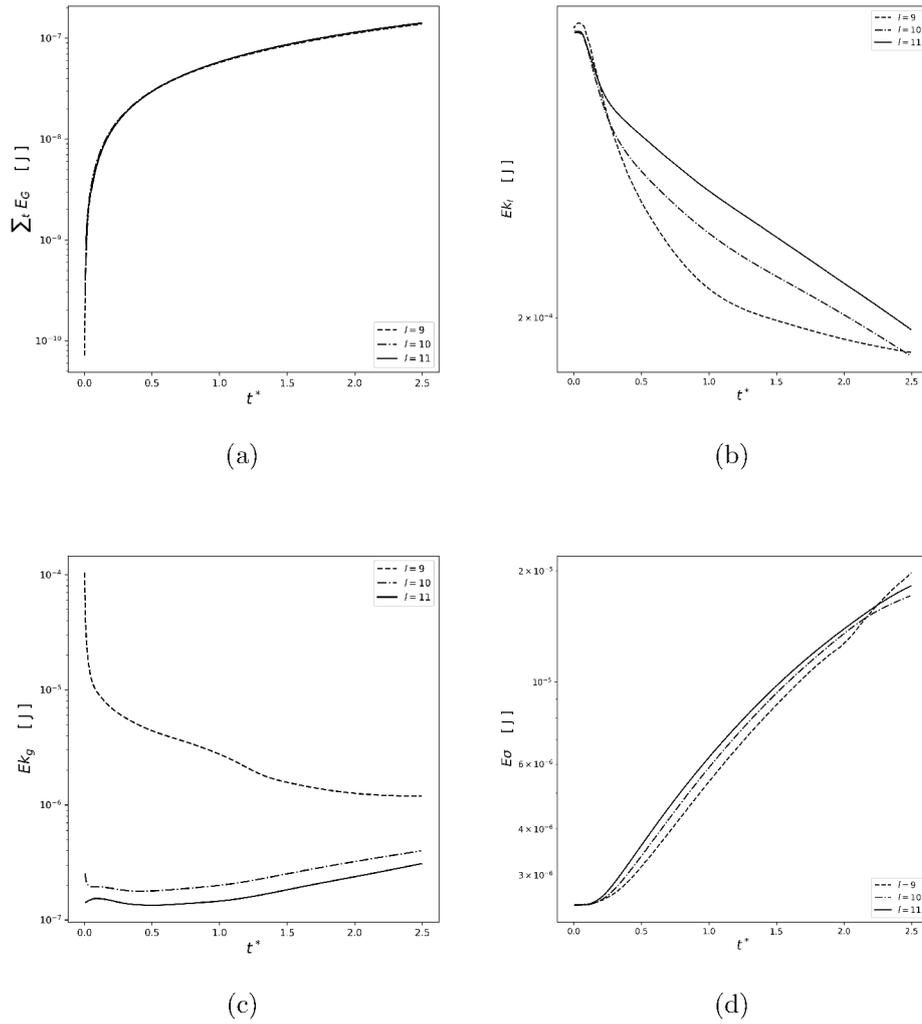


Figura 4.23: Energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de alto número de Reynolds e alto número de Weber ( $C2$ )

tencial gravitacional,

$$\sum_t E_G = \sum_t \sum_V \rho_l \cdot V_l \cdot g \cdot |u_l| \cdot \Delta t, \quad (4.13)$$

onde a massa de cada volume de controle líquido é dada por  $m_l = \rho_l \cdot V_l$ , a qual sofre um deslocamento estimado pela multiplicação da norma da velocidade do líquido pelo passo temporal da simulação,  $|u_l| \cdot \Delta t$ , e  $g$  é a aceleração da gravidade.

A energia potencial é constantemente adicionada ao escoamento,  $\sum_t$ , através de sua transformação em energia cinética do líquido. Portanto, à parte da energia cinética inicial devido à velocidade inicial e da energia de superfície da gota, ela é a única fonte de energia mecânica do escoamento.

Uma vez que a energia potencial, Fig. 4.22 (a), se transforma em energia inercial do líquido, Fig. 4.22 (b), essa é transferida para a energia inercial do gás, Fig. 4.22 (c), ou para a energia de superfície, Fig. 4.22 (d), de acordo com a magnitude de  $Re_g$  e  $We$ , respectivamente. O fluxo inverso pode existir, dependendo do fenômeno predominante em regiões específicas do escoamento.

A energia cinética do gás e a energia interfacial também transformam entre si, com potencial de transferência dado por pelo número de Ohnesorge. Quanto maior o valor desse adimensional, maior será a resistência à transferência no sentido da energia superficial para energia cinética do gás. Os dois casos estudados possuem  $Oh = 0,002$ , de forma que a razão unitária permite analisar isoladamente os efeitos dos números de Reynolds e de Weber.

O princípio da mínima energia, baseado na segunda lei da termodinâmica, declara para um sistema fechado que sua energia interna tenderá ao nível mínimo. Isso ocorre em virtude de esse ser o estado de maior estabilidade do sistema. Portanto, a tendência da área superficial de qualquer porção de líquido circundado por gás será de assumir a forma esférica. Assim, a diminuição da área da interface propiciará a transformação da energia de superfície em energia cinética do líquido e/ou do gás, enquanto o aumento da área da interface terá como causa o fluxo inverso de energia.

A energia cinética do líquido é atualizada a cada passo temporal de acordo com

$$Ek_l = \sum_V \frac{1}{2} \cdot \rho_l \cdot V_l \cdot |u_l|^2, \quad (4.14)$$

assim como a energia cinética do gás,

$$Ek_g = \sum_V \frac{1}{2} \cdot \rho_g \cdot V_g \cdot |u_g|^2. \quad (4.15)$$

Por fim, a energia de interface é dada por  $E_\gamma = \gamma \cdot A$ , onde a área da lamela,  $A$ , é obtida numericamente a partir da soma das faces advectadas pelo método PLIC.

Nas Figuras 4.22 e 4.23, observa-se que a energia potencial de ambos os casos tem valor  $\sum_t E_G = 1 \cdot 10^{-7} J$ , e taxas de crescimento iguais, independentemente dos números de Reynolds e Weber, uma vez que essa energia depende somente das dimensões e densidade da gota.

Baseado na simulação com malha mais refinada (i.e., linha contínua), tem-se em *C1*:  $Re = 5.940$ ,  $We = 146$ , e  $Re_g/We = 40.685$ . Analisando a Figura 4.22 no intervalo  $t^* = [0 - 2, 5]$ ,  $\Delta Ek_l = -1,04 \cdot 10^{-5} J$ ,  $\Delta Ek_g = 3,04 \cdot 10^{-7} J$  e  $\Delta E_\gamma = 5,79 \cdot 10^{-6} J$ . A razão da variação da energia cinemática do gás e da energia cinemática do líquido foi de 0,029 (i.e., 3% da energia do líquido foi absorvida pelo gás), e a razão da variação da energia interfacial e da energia cinemática do líquido foi de 0,558 (i.e., 56% da energia do líquido foi capturada pela interface).

Em *C2*, tem-se:  $Re = 16.500$ ,  $We = 1.133$ , e  $Re_g/We = 14.563$ . Analisando a Figura 4.22 no intervalo  $t^* = [0 - 2, 5]$ ,  $\Delta Ek_l = -4 \cdot 10^{-5} J$ ,  $\Delta Ek_g = 2 \cdot 10^{-7} J$  e  $\Delta E_\gamma = 2 \cdot 10^{-5} J$ . A razão da variação da energia cinética do gás e da energia cinética do líquido foi de 0,005 (i.e., 0,5% da energia do líquido foi absorvida pelo gás), e a razão da variação da energia interfacial e da energia cinética do líquido foi de 0,436 (i.e., 44% da energia do líquido foi capturada pela interface).

Portanto, em *C2* o líquido cedeu uma quantidade relativa de energia para o gás 16% do ocorrido em *C1*, e uma quantidade relativa de energia para a interface 78% do apresentado em *C1*, resultando na razão  $\Delta E_\gamma/\Delta Ek_g = 4,9 > 1$ , como esperado.

As Figuras 4.24 e 4.25 apresentam o balanço da energia mecânica do escoamento, considerando a parcela de alimentação (*feed energy*), formada pela energia cinética inicial da gota e pela energia potencial do líquido; a parcela de movimentação (*flow energy*), composta pelas energias cinéticas e de superfície. Três formas de energia irreversível (i.e., não transformável) são agrupadas no termo de perda (*sink energy*): a energia cinética do gás transportado pela fronteira do domínio — mínima devido à extensão do domínio; a energia de cisalhamento entre

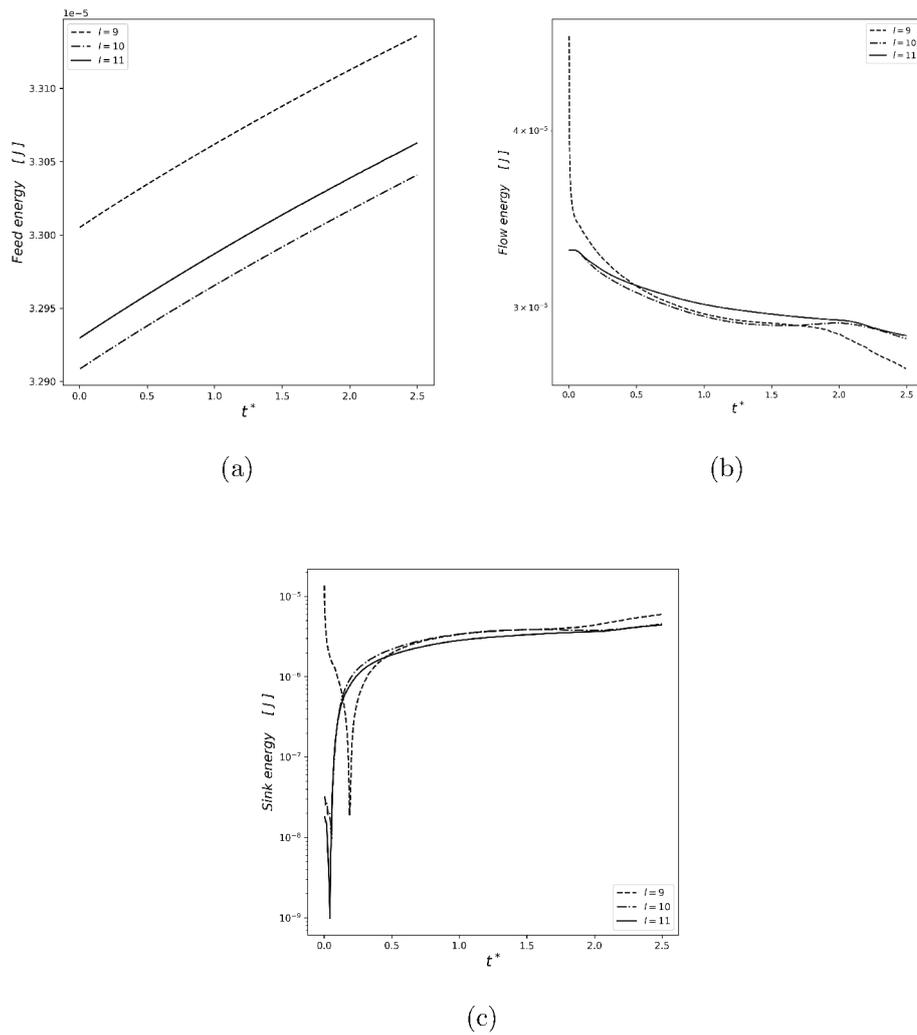


Figura 4.24: Balanço de energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de baixo número de Reynolds e baixo número de Weber ( $C1$ )

lamela e partícula e entre lamela e gás; energia dissipada por cisalhamento entre líquido-líquido, no interior da lamela, e entre gás-gás em todo o domínio.

As energias envolvidas em  $C2$  são uma ordem de grandeza maiores do que as envolvidas em  $C1$ , sendo que a energia irreversível, não computada diretamente, é uma ordem de grandeza menor do que as demais em ambos os casos. Em  $C1$ , as energias de alimentação e de escoamento são ambas aproximadamente  $3 \cdot 10^{-5} J$ , e a energia perdida é aproximadamente  $3 \cdot 10^{-6} J$ , enquanto em  $C2$ , as energias de alimentação e de escoamento são ambas aproximadamente  $2 \cdot 10^{-4} J$ , e a energia perdida é aproximadamente  $2 \cdot 10^{-5} J$ .

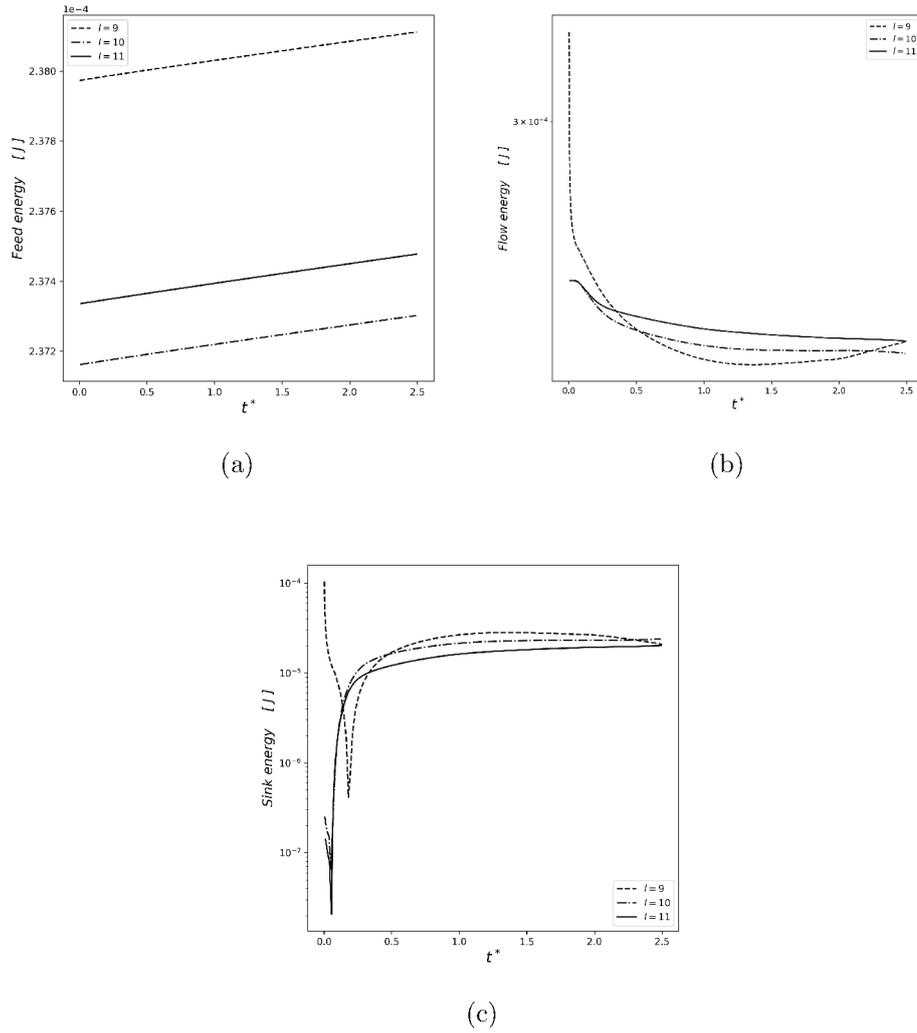


Figura 4.25: Balanço de energia mecânica do escoamento durante a colisão gota-partícula para o caso de alto número de Reynolds e alto número de Weber ( $C2$ )

#### 4.1.6 Machine learning

A área inicial da lamela é considerada igual à área da gota esférica pré-impacto,  $A(0) = A_d = 3,4 \cdot 10^{-5} m^2$ , instante no qual a área adimensional da lamela tem valor unitário,  $A^*(0) = 1$ . Durante o impacto, o volume do líquido se conserva igual ao volume inicial da gota,  $\forall_d = 1,9 \cdot 10^{-8} m^3$ ; desta forma, a espessura média da lamela é calculada como  $\delta_l(t) = \forall_d / (0,5 \cdot A(t))$ .

Uma correlação para a área adimensional da lamela é proposta na forma  $A^* = f(Re, We, t^*)$ , utilizando para construção do modelo preditivo os 60 dados oriundos das 12 simulações do planejamento fatorial. Foram realizadas três si-

mulações adicionais com valores intermediários das variáveis independentes, (1)  $Re = 5.100$ ,  $We = 160$  e  $t^* = 1,215$ , (2)  $Re = 5.100$ ,  $We = 440$  e  $t^* = 1,991$ , e (3)  $Re = 5.100$ ,  $We = 620$  e  $t^* = 4,474$ , para avaliação do modelo.

Os resultados da avaliação, Fig. 4.26, são apresentados na forma do coeficiente de determinação,

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (4.16)$$

que provê uma medida de qualidade das futuras predições; onde  $\hat{y}_i$  é o valor predito pela correlação,  $y_i$  o valor referência obtido da simulação,  $n = 3$  o número de predições realizadas na avaliação, e

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i; \quad (4.17)$$

do *Root Mean Squared Error (RMSE)*, Fig. 4.27,

$$RMSE = \sqrt{MSE}, \quad (4.18)$$

onde

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2; \quad (4.19)$$

e do erro relativo médio, Fig. 4.28,

$$MAPE = \frac{100}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{y_i}. \quad (4.20)$$

Esta abordagem sucinta considera o elevado custo de recursos humanos e computacionais, assim como o cronograma limitado dos projetos de engenharia ao utilizar o mínimo possível de simulações: 12 oriundas do planejamento fatorial, e 3 adicionais para avaliação. Seus resultados são refinados posteriormente com a aplicação de avaliação cruzada, procedimento que considera maior número de dados nas predições avaliativas.

Os valores de entrada dos modelos preditivos foram pré-tratados através de combinação polinomial das variáveis independentes (e.g.,  $x_1^2$ ,  $x_1 \cdot x_2$ ) e normalização,

$$z = \frac{y - \bar{y}}{\sigma}, \quad (4.21)$$

de forma que a média e o desvio-padrão do conjunto de dados de entrada sejam 0 e 1, respectivamente.

Os algoritmos avaliados nesta etapa foram *Decision Tree*, Regressão Linear e Regressão Polinomial de segundo e terceiro graus. Para todas as métricas foram apresentados os resultados do modelo *Dummy*, o qual serve como referência aos demais por se tratar de um algoritmo que sempre prediz a média dos dados utilizados na avaliação do modelo.

Conforme conclusão da seção anterior, os números de Reynolds e Weber têm efeitos contrários, e estatisticamente significantes, em sua correlação com a área adimensional da lamela, para  $t^* \approx 1$ . Portanto, os dois fatores, em adição ao tempo adimensional, foram mantidos para a construção do modelo. Adicionalmente, a Figura 4.21 mostra que os efeitos dos números de Reynolds e Weber se intensificam com o tempo decorrido do impacto.

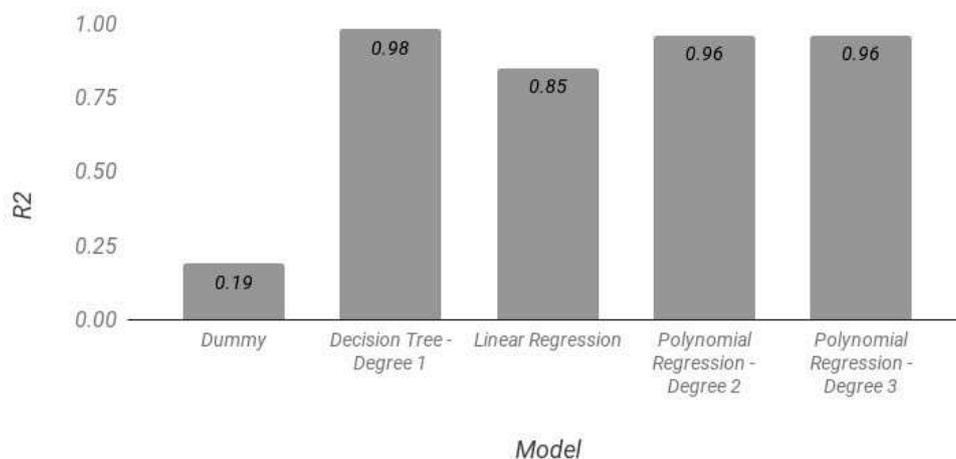


Figura 4.26: Coeficiente de determinação dos modelos preditivos da área adimensional da lamela.

A Figura 4.26 apresenta o coeficiente de determinação para os modelos

avaliados. O valor apresentado pelo algoritmo *Dummy* é próximo do teórico (*i.e.*,  $R^2 = 0$ ). O algoritmo *Decision Tree* foi construído baseado apenas nas variáveis de entrada de primeira ordem (*e.g.*,  $x_1$ ,  $x_2$ ), da mesma forma que a Regressão Linear, e obteve o melhor resultado,  $R^2 = 0,98$ . Como esperado em função do formato das curvas da Figura 4.21, a Regressão Linear apresentou um resultado muito inferior em relação às Regressões Polinomiais de segundo e terceiro graus.

Os três dados utilizados para avaliação dos algoritmos possuem média  $\bar{y}_{val} = 2,7$  e desvio-padrão  $\sigma_{val} = 1,70$ . Considerando que a distribuição da população se aproxima de uma Gaussiana, é possível estimar que 68% dos dados estarão no intervalo  $\mu \pm \sigma$ . Por esse motivo, valores de *RMSE* próximos de  $\sigma_{val}$  indicam um modelo fraco, como exemplo o *Dummy*.

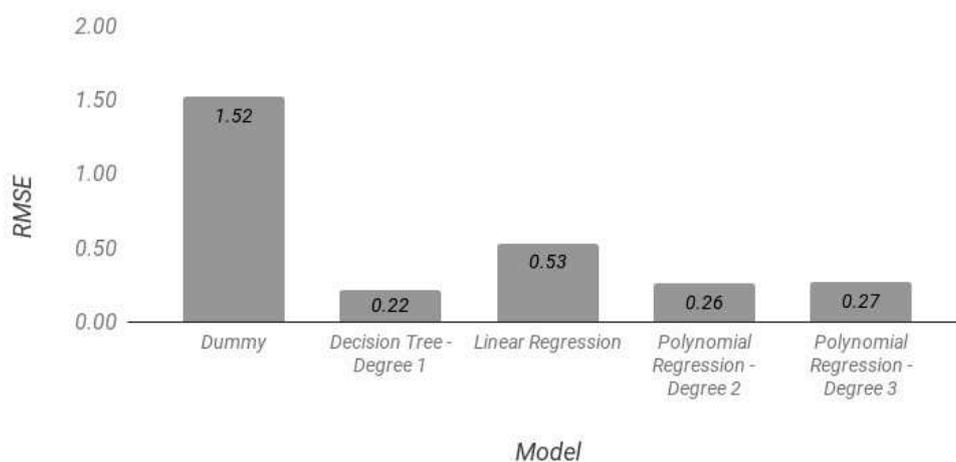


Figura 4.27: *Root Mean Squared Error* dos modelos preditivos da área adimensional da lamela.

A Figura 4.27 apresenta o *Root Mean Squared Error* para os modelos avaliados. O algoritmo *Dummy* confirmou  $RMSE = 1,52$  próximo de  $\sigma_{val}$ . O melhor algoritmo avaliado segundo esse critério foi o *Decision Tree*, seguido pelas Regressões Polinomiais.

A Figura 4.28 apresenta o erro relativo médio, que auxilia na compreensão de quão próximas foram as predições dos valores verdadeiros. Todos os algoritmos avaliados segundo esse critério apresentaram erro relativo médio menor do que 12%.

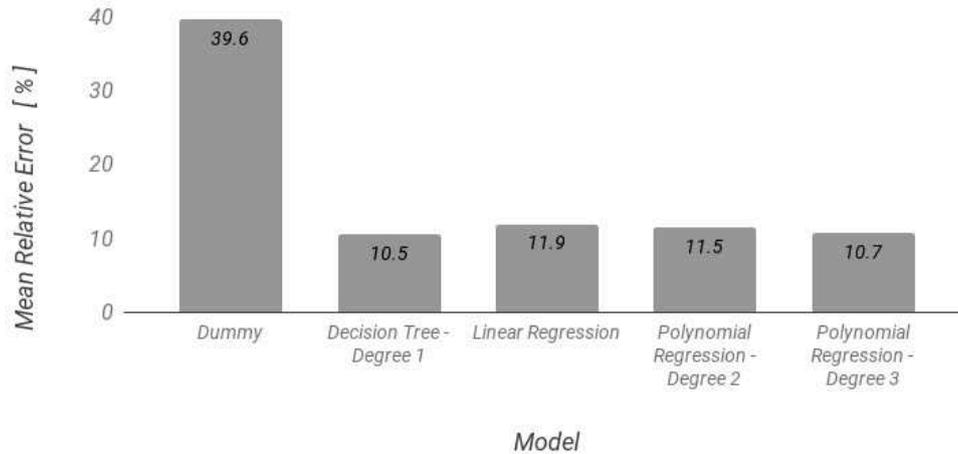


Figura 4.28: Erro relativo médio (MAPE) dos modelos preditivos da área adimensional da lamela.

Baseado nos valores encontrados nas Figuras 4.26 a 4.28, o modelo que melhor prediz a área da lamela é o *Decision Tree - Degree 1*, seguido pela Regressão Polinomial de segundo grau. A equação de estimativa da área via regressão polinomial é

$$\begin{aligned}
 A^* = & 1,954 + 0,002 \cdot Re - 0,104 \cdot We - 0,073 \cdot t^* + 0,002 \cdot Re^2 \\
 & - 0,104 \cdot We^2 + 0,805 \cdot t^{*2} + 0,093 \cdot Re \cdot We \\
 & - 0,275 \cdot Re \cdot t^* + 0,713 \cdot We \cdot t^*.
 \end{aligned}$$

Analisando a magnitude dos coeficientes dos termos de primeiro e segundo graus do número de Reynolds, comprova-se sua menor influência na área da lamela; o coeficiente do termo cruzado do número de Reynolds com o número de Weber revela a diminuta interação entre esses dois fatores, enquanto o termo cruzado com o tempo adimensional indica que a influência do número de Reynolds é crescente com o tempo decorrido do impacto.

Tanto o número de Weber quanto o tempo adimensional apresentaram forte influência sobre a área da lamela; no entanto, a relação linear e a quadrática têm igual influência no caso do número de Weber, enquanto a quadrática predomina no tempo adimensional, Fig. 4.21.

### *Avaliação cruzada*

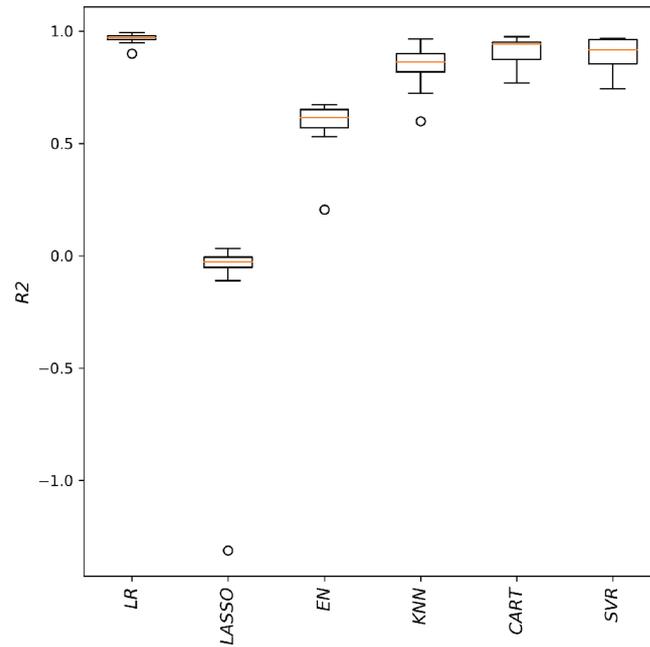
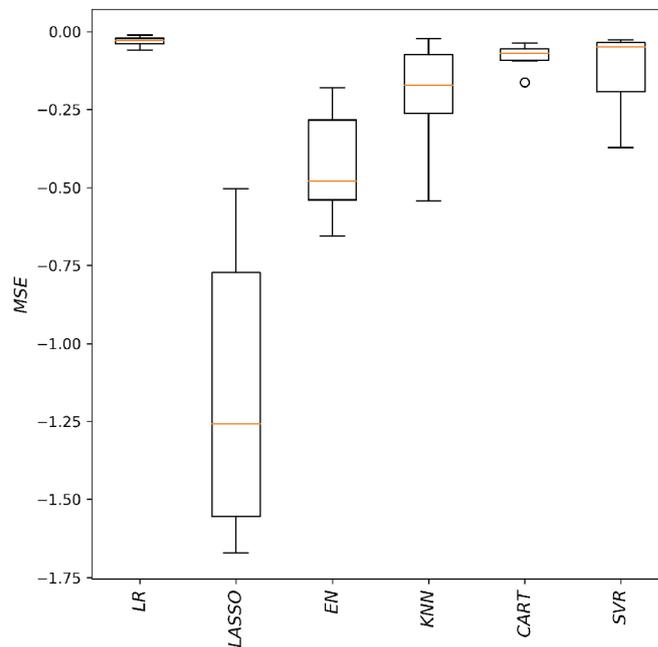
Após a abordagem concisa realizada na seção anterior visando a obtenção de uma correlação inicial, a avaliação cruzada foi empregada para refinar o modelo preditivo. Para tanto, somados aos 60 dados originados das 12 simulações do planejamento fatorial, foram considerados 78 dados obtidos de 12 simulações adicionais, formadas pela combinação dos fatores  $Re = 1,8 \cdot 10^3$ ,  $3,4 \cdot 10^3$ ,  $5,1 \cdot 10^3$  e  $7,9 \cdot 10^3$ , e  $We = 1,6 \cdot 10^2$ ,  $4,4 \cdot 10^2$  e  $6,2 \cdot 10^2$ .

A avaliação cruzada seleciona aleatoriamente 70% dos 138 dados para construção do modelo e 30% para avaliação. O processo é repetido 10 vezes, avaliando os modelos Regressão Linear/Polinomial, *Lasso*, *Elastic Net*, *KNeighbors*, *Decision Tree Regressor* (CART) e *Support Vector Regressor* (SVR), para variáveis de entrada de graus 1, 2 e 3.

O mesmo procedimento foi realizado considerando os modelos de grupo *AdaBoost*, *GradientBoosting*, *RandomForest* e *ExtraTrees*. Ambos modelos de grupo utilizam uma combinação de modelos elementares; nos dois primeiros, cada modelo elementar tem a função de corrigir o erro de predição do predecessor, enquanto nos dois últimos, cada modelo elementar prediz o resultado de uma subamostra distinta.

O total de 30 soluções foram prospectadas, cada uma avaliada em 10 reproduções aleatórias dos dados. Para esse conjunto de resultados, a mediana, o primeiro e o terceiro quartis, os limites inferior e superior, e os *outliers* são apresentados para o  $R^2$ , Fig. 4.29, e o  $MSE$ , Fig. 4.30, através de um diagrama de caixa. Os *outliers* são definidos como valores 1,5 vezes mais dispersos em relação à mediana. As figuras apresentam apenas os modelos avaliados para o conjunto de variáveis de entrada de primeiro e terceiro grau.

Os bons valores de métricas alcançados pelo modelos elementares indicam que a relação das variáveis independentes com a variável dependente possui baixa complexidade. Observa-se também que os modelos de grupo, usualmente empregados em problemas com maior número de variáveis e dados, não otimizaram

(a)  $R^2$  - Grau 3

(b) MSE - Grau 3

Figura 4.29: Coeficiente de determinação e *Mean Squared Error* dos modelos elementares preditivos da área adimensional da lamela.

as métricas frente aos valores obtidos pela Regressão Polinomial.

Considera-se que o modelo de menor variabilidade é a Regressão Poli-

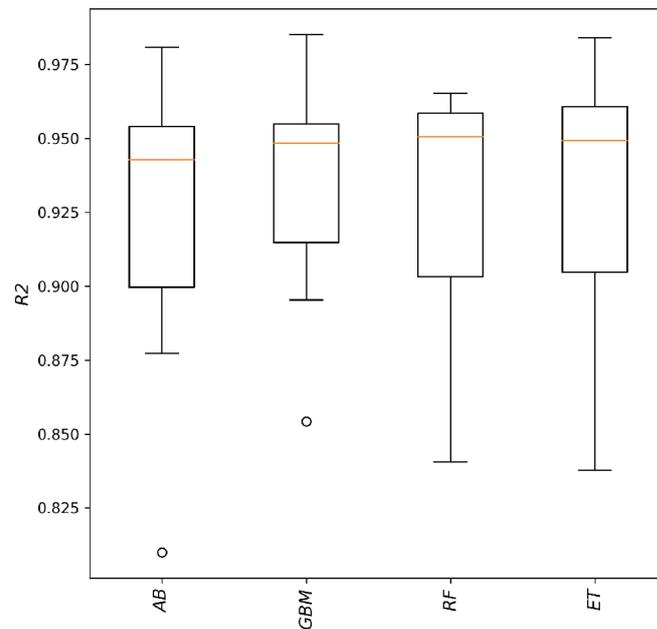
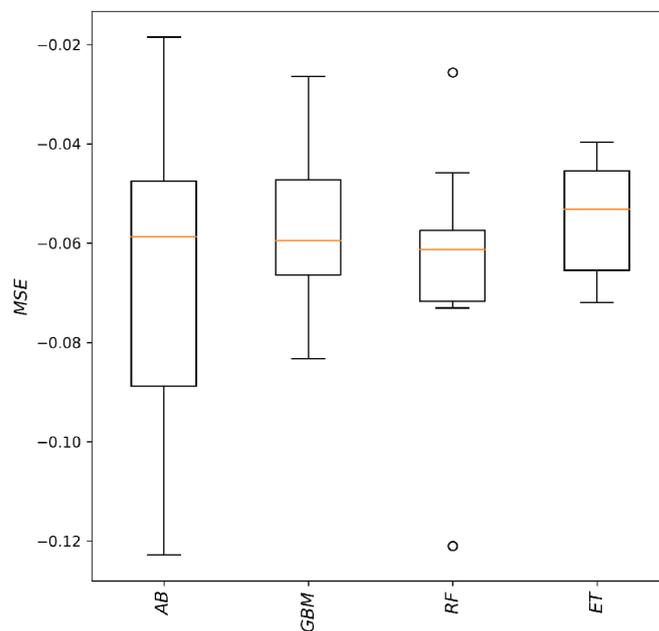
(a)  $R^2$  - Grau 3(b)  $MSE$  - Grau 3

Figura 4.30: Coeficiente de determinação e *Mean Squared Error* dos modelos de grupo preditivos da área adimensional da lamela.

nomial de terceiro grau, com valor médio, 0,96, e desvio-padrão, 0,02, do  $R^2$ , e valor médio, 0,18, e desvio-padrão, 0,12, do  $RMSE$ . O erro relativo médio foi de

5,1%, equivalente à metade do erro obtido pela abordagem anterior, Fig. 4.28.

A equação da área superficial da lamela via regressão polinomial é

$$\begin{aligned}
 A^* = & 2,003 + 0,385 \cdot Re + 0,309 \cdot We + 0,041 \cdot t^* \\
 & -0,216 \cdot Re \cdot We + 0,282 \cdot We \cdot t^* - 0,534 \cdot Re \cdot We^2 \\
 & +0,771 \cdot Re^2 \cdot We - 0,014 \cdot Re^2 \cdot t^* + 0,699 \cdot We \cdot t^{*2} \\
 & +0,397 \cdot Re^3 + 0,258 \cdot We^3.
 \end{aligned}$$

Essa equação tem como variáveis de entrada os valores normalizados com relação à média e ao desvio-padrão dos dados de treinamento.

## 4.2 Aglomerado de partículas

Em alguns cenários do impacto entre gota e partícula, a gota não colide apenas com uma entidade sólida isolada, mas com um aglomerado delas, como exemplo na quebra catalítica em leito fluidizado (MALGARINOS; NIKOLOPOULOS; GAVALISES, 2017b). Esta seção tem o objetivo de explorar esse fenômeno lançando mão de simulação numérica bidimensional e *deep learning*. A restrição de bidimensionalidade é decorrente do elevado número de dados necessários para a otimização dos parâmetros de uma rede neural, sendo essa uma condição menos onerosa computacionalmente.

Esse objetivo é alcançado seguindo as etapas:

1. Descrição geral das simulações e do banco de dados resultante;
2. Obtenção das métricas base de modelos de *machine learning*;
3. Criação de modelos preditivos complexos utilizando *deep learning*.

### 4.2.1 Configuração

A Figura 4.31 apresenta o domínio de simulação, para o qual a condição inicial é de ambiente quiescente e a condição de contorno é periódica em todas as direções.

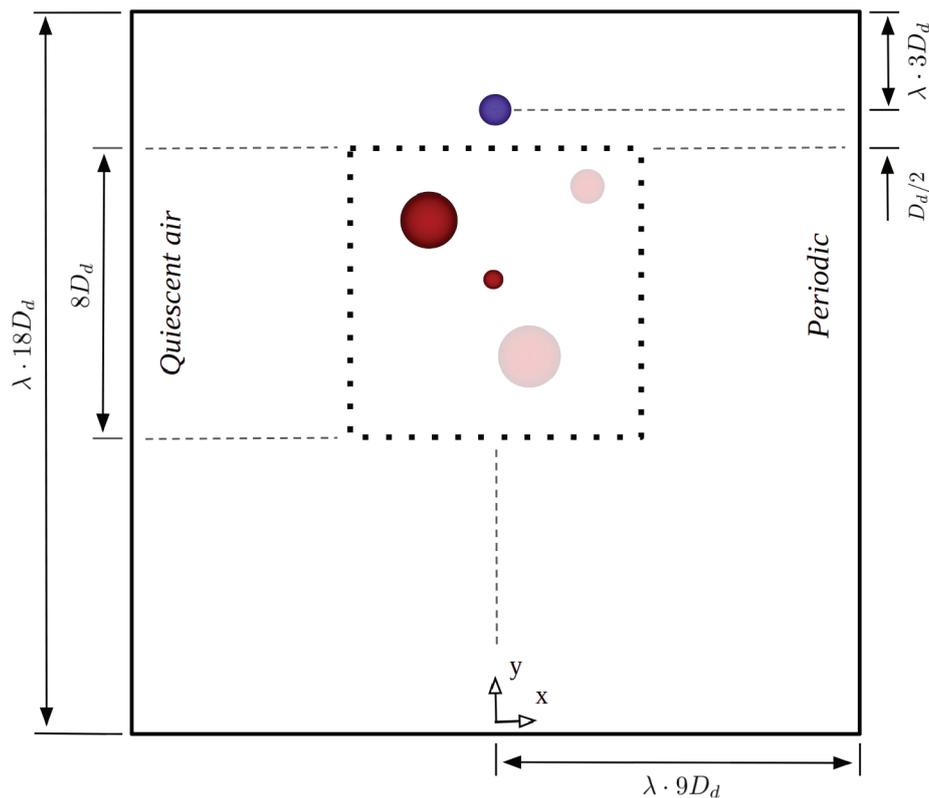


Figura 4.31: Domínio das simulações bidimensionais da colisão gota-partículas, com origem situada no ponto central e inferior do domínio. A linha pontilhada representa a zona de partículas.

O fator  $\lambda$  da Figura 4.31 é utilizado para extensão das dimensões do domínio no estudo da influência da condição de contorno na interação gota-partículas, Fig. 4.32. A zona de partículas é quadrada e suas dimensões são independentes de  $\lambda$ .

Nas malhas numéricas apresentadas na Figura 4.32, o menor volume de controle tem comprimento relativo  $D_d/\Delta = 28$ . O refinamento adaptativo subsequente garante que, nos passos temporais seguintes, a malha mais fina esteja somente nas regiões de interface líquido-gás, sólido-gás e em função do campo de velocidade. A influência do refinamento sobre a interação gota-partículas foi averiguada a partir do domínio estendido, com menor volume de controle possuindo comprimento relativo  $D_d/\Delta = 56$ .

Considerando que os fenômenos naturais e industriais possuem condições iniciais e de contorno muito mais complexas do que aquelas que o presente

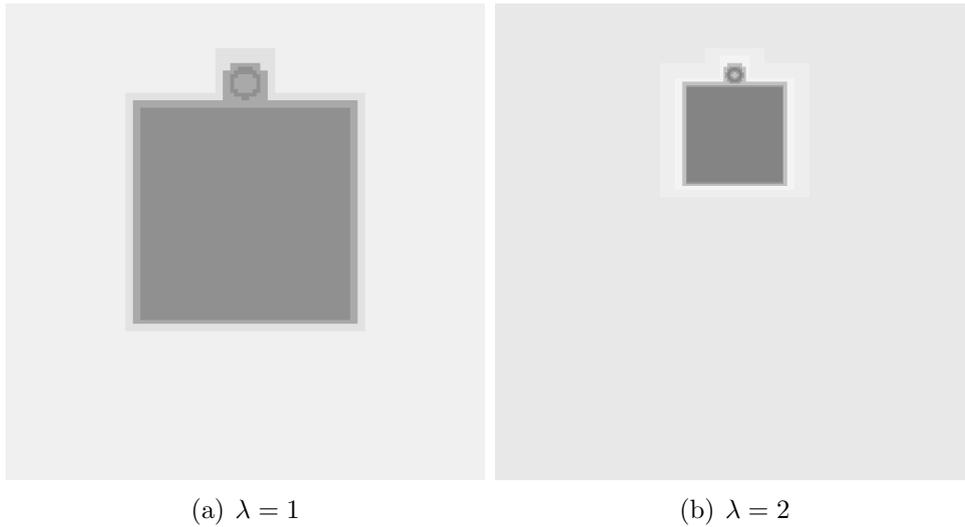


Figura 4.32: Refinamento inicial da gota e da zona de partículas para o domínio padrão (a), e o estendido (b). Os tons mais escuros indicam regiões de malha mais refinada.

trabalho se propõe modelar, a condição de contorno periódica é utilizada com o propósito de incorporar a influência de uma vizinhança desconhecida no núcleo do escoamento de interesse.

A interação entre gota e aglomerado de partículas é analisada através de 4.000 simulações Eulerianas bidimensionais, juntamente com a arquitetura de rede neural *multilayer perceptron*, e visa compreender e modelar a relação entre 18 variáveis independentes e 4 variáveis dependentes associadas a esse fenômeno.

Uma etapa de pré-processamento do banco de dados expandiu seu tamanho para 8.000, lançando mão da simetria das posições das partículas em cada caso simulado em relação ao eixo  $x$ . No estudo da influência do tamanho do domínio e do refinamento da malha sobre os resultados da colisão gota-partículas, os bancos de dados avaliados contêm 1.000 simulações, com os bancos de dados expandidos de tamanho 2.000.

As variáveis independentes são:

1.  $Re$  — número de Reynolds baseado no diâmetro da gota;
2.  $We$  — número de Weber baseado no diâmetro da gota;
3.  $C_{sg}$  — fração volumétrica de sólido presente na zona de partículas;

4.  $C_{ls}$  — fração volumétrica de líquido em relação à porção de sólido;
5.  $A_{ls}$  — razão de área inicial entre gota e partículas;
6.  $N_p$  — número de partículas;
7.  $D_{p1}$  — diâmetro da primeira partícula;
8.  $D_{p2} \dots D_{p4}$  — diâmetros da segunda à quarta partículas;
9.  $X_{p1}$  — posição da primeira partícula na direção  $x$ ;
10.  $Y_{p1}$  — posição da primeira partícula na direção  $y$ ;
11.  $X_{p2} \dots X_{p4}$  — posições da segunda à quarta partículas na direção  $x$ ;
12.  $Y_{p2} \dots Y_{p4}$  — posições da segunda à quarta partículas na direção  $y$ .

Para todas as simulações, o diâmetro inicial da gota foi mantido constante,  $D_d = 1 \text{ mm}$ , assim como a aceleração da gravidade,  $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ , na direção negativa do eixo  $y$ , e as propriedades dos fluidos dadas pela Tabela 4.1.

Os números de Reynolds,  $Re \in [10^3 - 10^4]$ , e Weber,  $We \in [10^2 - 10^3]$ , foram selecionados aleatoriamente e uniformemente de seus respectivos espaços amostrais, Fig. 4.33, a partir dos quais a velocidade inicial da gota,  $U_d$ , e a tensão superficial,  $\gamma$ , foram calculadas, respectivamente.

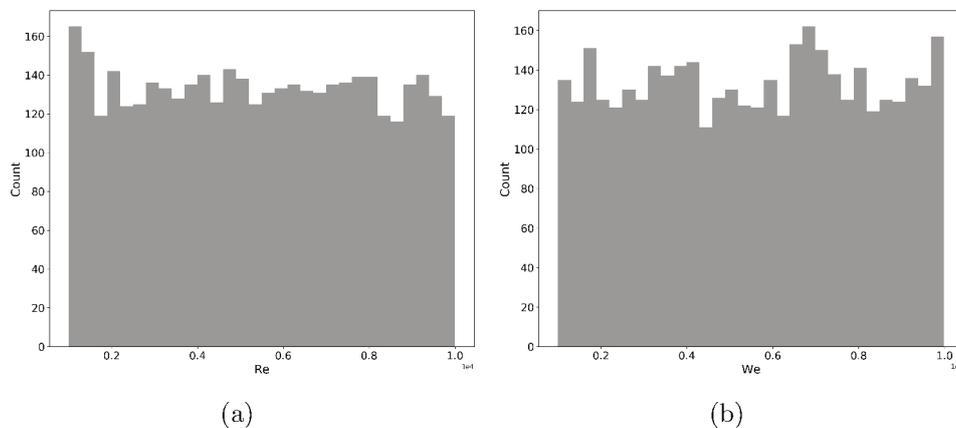


Figura 4.33: Histograma destacando a distribuição uniforme dos números de Reynolds (a) e Weber (b) selecionados aleatoriamente para a construção dos casos simulados.

O número total de partículas,  $N_p \in [1 - 4]$ , seus diâmetros,  $D_p \in [D_d/2 - 2D_d]$ , bem como suas respectivas posições  $X_p$  e  $Y_p$  dentro da zona de partículas, também foram escolhidas aleatória e uniformemente para cada um dos casos simulados, Fig. 4.34.

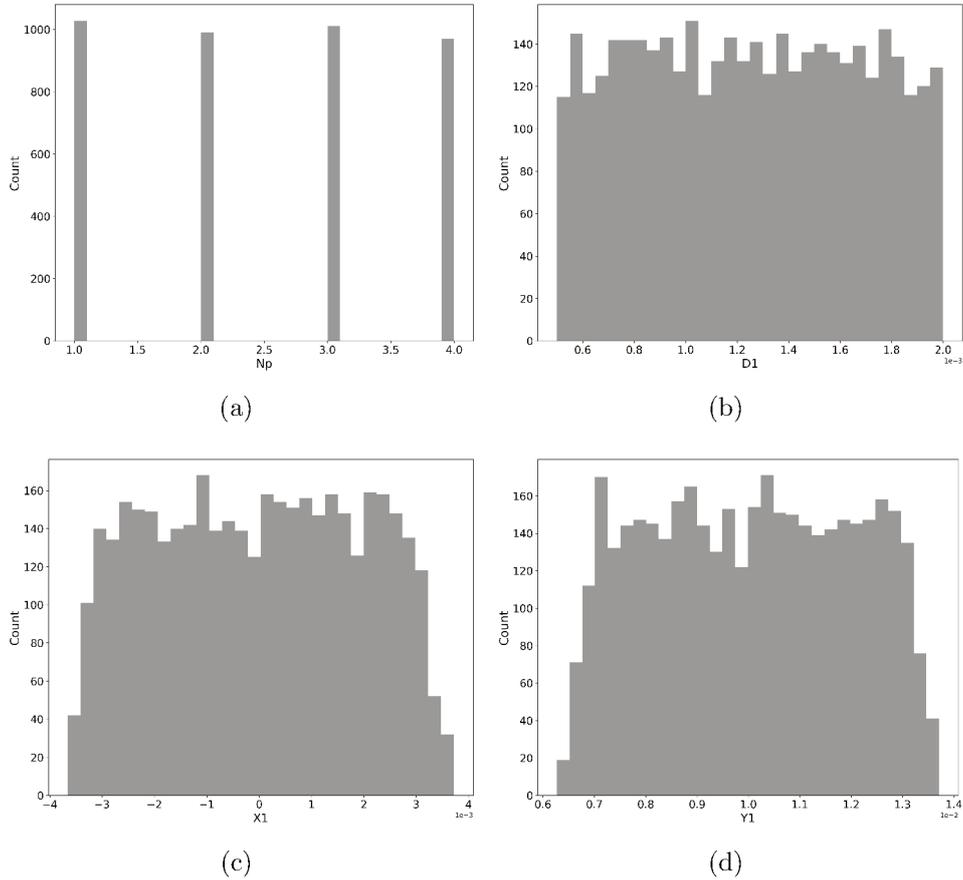


Figura 4.34: Histograma destacando a distribuição uniforme do número de partículas (a), diâmetro da primeira partícula (b), e suas respectivas posições (c) e (d), selecionados aleatoriamente nas simulações.

Para os cenários que não contemplam o número total de partículas, os diâmetros e posições das partículas ausentes são definidos com valor nulo. Como a origem do domínio computacional tem componente  $x$  contida na zona de partículas, o pré-processamento do banco de dados é realizado com um deslocamento na posição das partículas existentes em cada cenário igual à  $\lambda \cdot 9D_d$ , como exemplo  $X_{p2}$  representado na Figura 4.35.

A zona de partículas foi dimensionada para poder comportar, em qualquer uma das configurações geradas aleatoriamente, o máximo de partículas  $N_p = 4$ , com o diâmetro máximo  $D_p = 2D_d$ , alinhadas nas direções  $x$  ou  $y$ . Adicio-

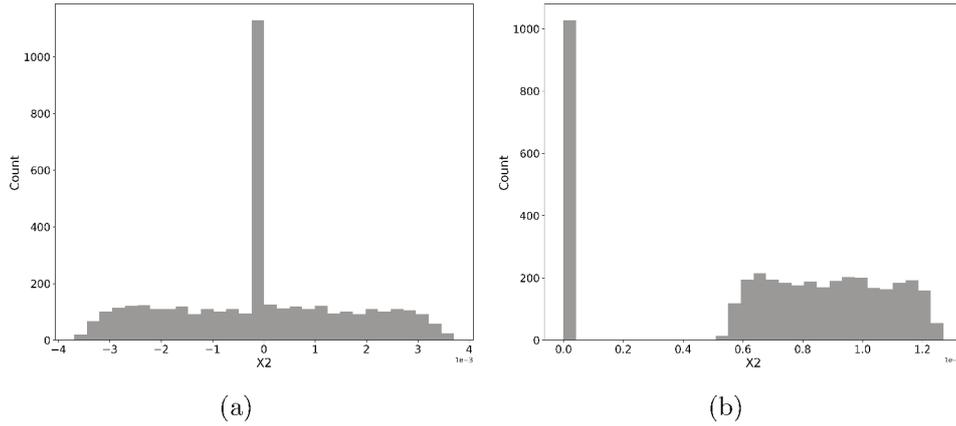


Figura 4.35: Histograma de  $X_{p2}$  antes (a) e depois (b) do deslocamento para processamento do banco de dados. Os cenários com apenas uma partícula são representados por  $X_{p2} = 0$ .

nalmente, durante a inicialização das partículas, não é permitido a sobreposição das mesmas; caso uma posição aleatória  $(x_p, y_p)$  resulte em sobreposição, outra posição é selecionada até que esse critério seja atendido. A Figura 4.36 apresenta quatro configurações distintas do arranjo de partículas em relação à posição da gota.

Considerando o domínio bidimensional, o volume de gás da área de partícula é dado pela área do quadrado  $V_g = (8D_d)^2$ , o volume da gota e das partículas são dados pelas áreas dos círculos  $V_d = \pi D_d^2$  e  $V_p = \sum_{i=1}^{N_p} \pi D_{p_i}^2$ , respectivamente, e a área superficial inicial da gota e das partículas são dadas pelas circunferências  $A_d^0 = \pi D_d$  e  $A_p = \sum_{i=1}^{N_p} \pi D_{p_i}$ , respectivamente. Os valores numéricos das áreas e volumes se aproximam dos valores teóricos das equações apresentadas à medida que a malha numérica é refinada.

A Figura 4.37 apresenta a função densidade de probabilidade (*PDF*) da fração volumétrica de sólido presente na zona de partículas,  $C_{sg} = V_p/V_g$ , da fração volumétrica de líquido em relação à porção de sólido,  $C_{ls} = V_d/V_p$ , e da razão de área inicial entre gota e partículas,  $A_{ls} = A_d^0/A_p$ . A *PDF* das variáveis aleatórias discretas é estimada utilizando uma abordagem não-paramétrica baseada em núcleos Gaussianos e na determinação automática da espessura de banda (MCKINNEY, 2010).

As variáveis dependentes são:

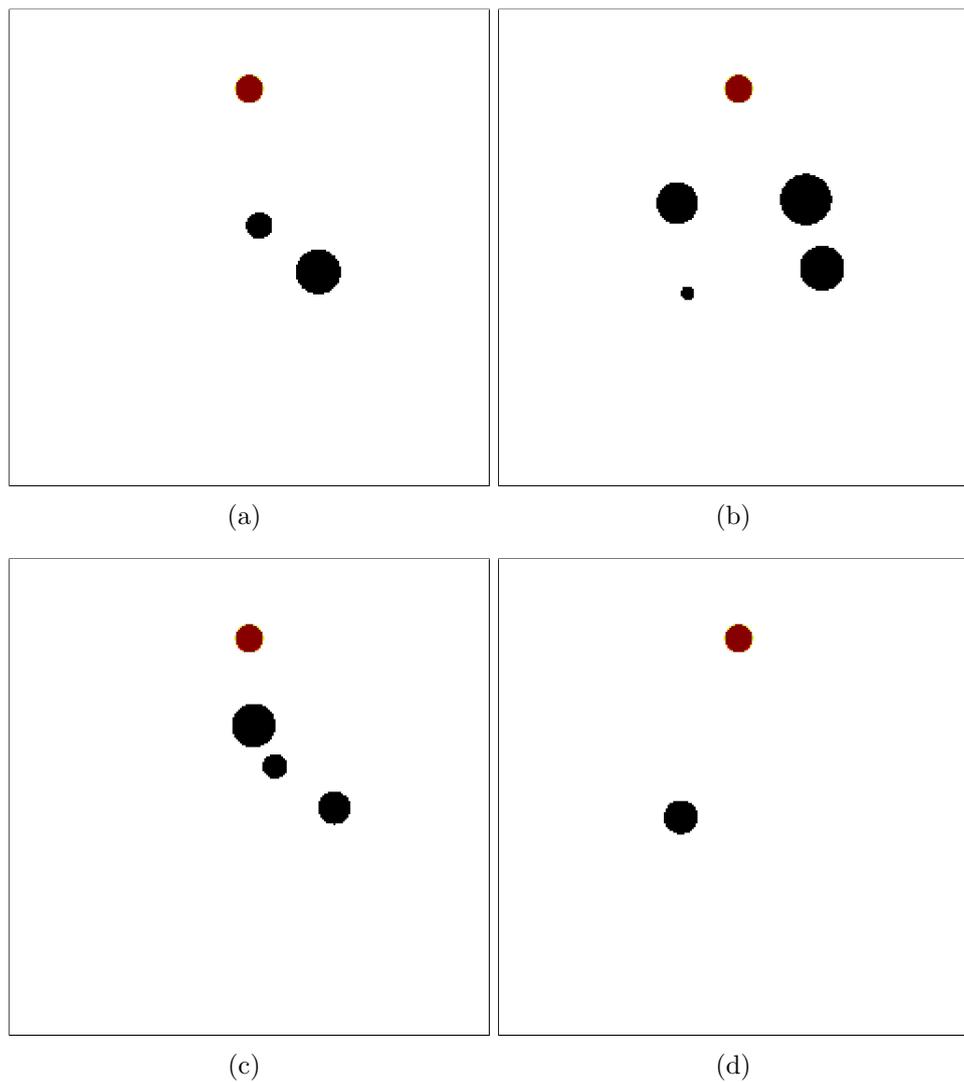


Figura 4.36: Posicionamento aleatório das partículas no domínio padrão de simulação para quatro casos distintos.

1.  $AVG(Wa)$  — média temporal da área de sólido molhada;
2.  $STD(Wa)$  — desvio-padrão da área de sólido molhada;
3.  $AVG(La)$  — média temporal da área interfacial do líquido;
4.  $STD(La)$  — desvio-padrão da área interfacial do líquido.

As variáveis de saída consideram o cálculo incremental da média e do desvio-padrão ponderados pelo passo de tempo,  $\Delta t$ , durante o tempo adimensional total da simulação,  $T^* = T \cdot U_d / D_d = 9,5$ . Essa grandeza é equivalente a um deslocamento da gota de 9,5 vezes seu diâmetro à velocidade inicial constante; nessas condições, a gota cruzaria toda a zona de partículas.

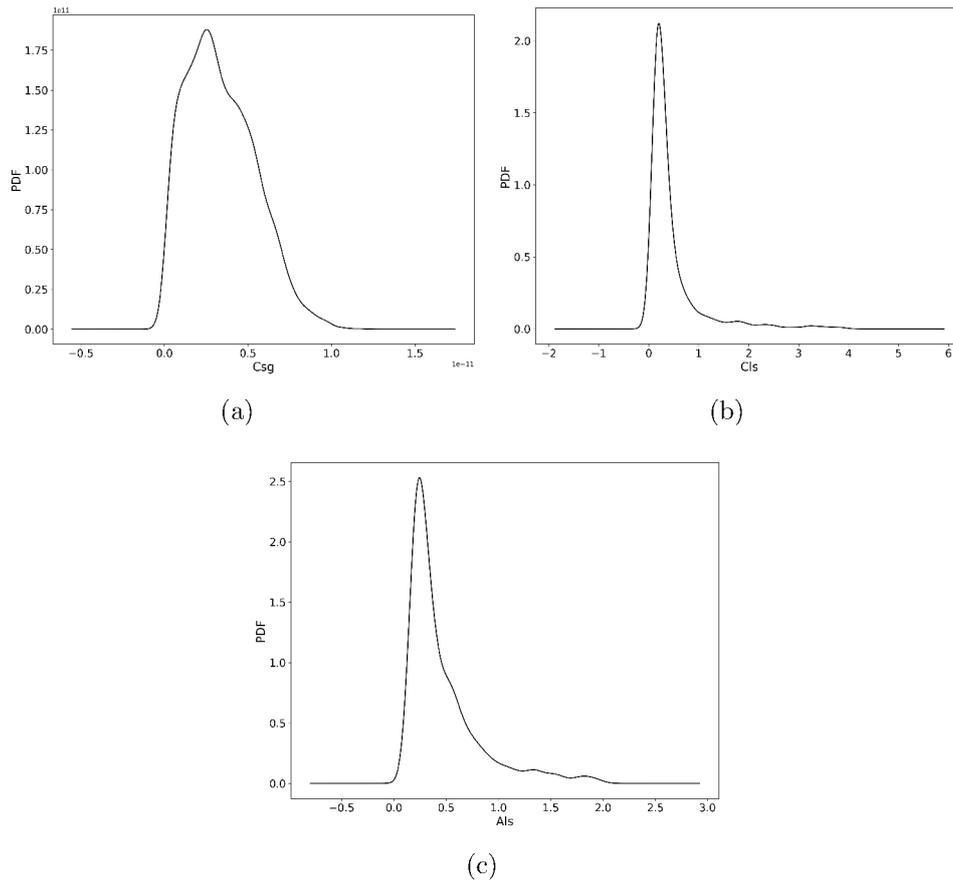


Figura 4.37:  $PDF$  das variáveis de entrada  $C_{sg}$ ,  $C_{ls}$  e  $A_{ls}$  estimada com base nas 4.000 configurações de simulação distintas geradas aleatoriamente.

O cálculo da média e do desvio-padrão segue a abordagem de Finch (2009), na qual a média temporal ponderada é calculada incrementalmente durante a simulação,

$$AVG(Wa)_n = AVG(Wa)_{n-1} + \frac{\Delta t_n}{t_n} (Wa_n - AVG(Wa)_{n-1}), \quad (4.22)$$

onde

$$t_n = \sum_{i=0}^n \Delta t_i \quad (4.23)$$

é o tempo decorrido de simulação na iteração  $n$ . O mesmo algoritmo se aplica à  $AVG(La)$ .

No cálculo do desvio-padrão,

$$STD(Wa)_n = \sqrt{\frac{VAR(Wa)_n}{t_n}}, \quad (4.24)$$

a variância é igualmente calculada incrementalmente durante a simulação,

$$VAR(Wa)_n = \frac{(t_n - \Delta t_n)}{t_{n-1}} VAR(Wa)_{n-1} + \Delta t_n (Wa_n - AVG(Wa)_{n-1}) (Wa_n - AVG(Wa)_n). \quad (4.25)$$

O mesmo algoritmo se aplica ao STD(La).

Valores elevados de STD(Wa) correspondem ao cenário físico de grande variação do contato e desprendimento da gota com as partículas, enquanto valores baixos significam um grau de molhabilidade constante durante a simulação. Semelhantemente, valores elevados de STD(La) indicam intensa taxa de deformação da gota, enquanto valores baixos representam que a deformação se manteve relativamente constante durante a simulação.

Como  $Wa$  é a área molhada do sólido (i.e., interface líquido-sólido) e  $La$  corresponde à área total do líquido (i.e., interfaces líquido-gás e líquido-sólido), essas variáveis são dependentes e possuem covariância não nula. Esse fato é comprovado pelo coeficiente de correlação de Pearson,

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (4.26)$$

que para essas duas variáveis possui valor igual a 0,928. Essa é uma propriedade importante caso se tenha interesse em obter a média e o desvio-padrão somente da interface líquido-gás.

O coeficiente de correlação de Pearson,  $r_{xy} \in [-1, +1]$ , fornece uma medida da relação linear entre duas variáveis. O valor nulo desse coeficiente indica que não existe uma função linear que correlacione as duas variáveis, porém essa função pode ser não linear ou aleatória. O coeficiente de correlação de Spearman,

Tabela 4.4: Síntese das variáveis de saída para a amostra de 4.000 simulações.

	$AVG(Wa)$	$STD(Wa)$	$AVG(La)$	$STD(La)$
MEAN	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$9,7 \cdot 10^{-6}$
STD	$1,3 \cdot 10^{-7}$	$2,6 \cdot 10^{-6}$	$7,4 \cdot 10^{-7}$	$1,5 \cdot 10^{-5}$
MIN	0	0	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$1,4 \cdot 10^{-8}$
Q1	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$3,2 \cdot 10^{-9}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-7}$
Q2	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$5,7 \cdot 10^{-6}$
Q3	$1,2 \cdot 10^{-6}$	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-5}$
MAX	$1,7 \cdot 10^{-6}$	$4,9 \cdot 10^{-5}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$2,4 \cdot 10^{-4}$

$r_s \in [-1, +1]$ , por sua vez, indica se duas variáveis são monotônicas, independentemente da relação linear, Fig. 4.38 e Tab. 4.5. Adicionalmente, o coeficiente de Spearman é menos sensível aos *outliers* de uma amostra do que o coeficiente de Pearson (MCKINNEY, 2010).

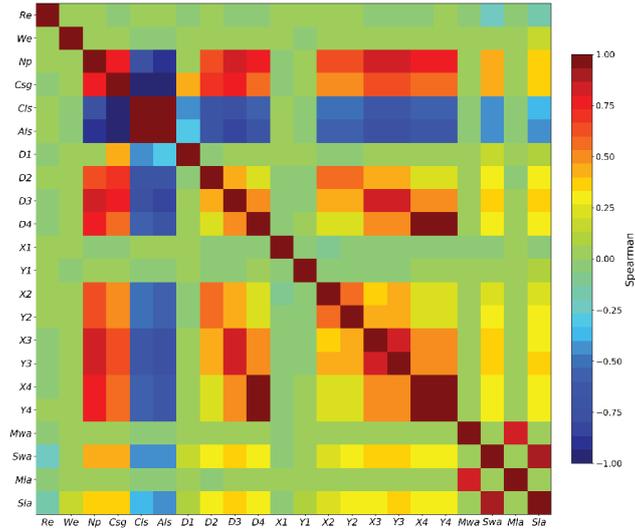
Uma correlação de Spearman relativamente fraca, correspondente a uma distribuição elíptica dos dados sem *outliers*, equivale ao valor próximo de 0,35. A Figura 4.38 indica valor máximo de correlação entre  $C_{sg}$  e  $STD(Wa)$  aproximadamente igual à 0,5. Todas as variáveis independentes apresentaram correlação aproximadamente nula com as variáveis dependentes  $AVG(Wa)$  e  $AVG(La)$ .

No entanto, a análise das correlações via coeficiente de Spearman é restrita a uma análise preliminar, uma vez que indica uma relação um-para-um, sem predizer como a interação das variáveis de entrada afetam as variáveis de saída.

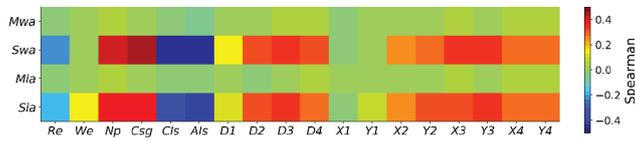
As Figuras 4.39 e 4.40 apresentam graficamente a distribuição de  $AVG(Wa)$ ,  $STD(Wa)$ ,  $AVG(La)$  e  $STD(La)$ , cujos valores de média, desvio-padrão, mínimo, primeiro quartil, mediana, terceiro quartil e máximo são apresentados na Tabela 4.4.

Através do *box plot* é possível observar uma grande quantidade de *outliers* em todas as variáveis dependentes. Como esses *outliers* são representativos do fenômeno estudado, ao invés de erros amostrais passíveis de serem excluídos na etapa de pré-processamento dos dados, isso prenuncia uma dificuldade elevada de criação dos modelos preditivos.

A Figura 4.41 apresenta quatro instantes da malha numérica, do campo



(a)



(b)

Figura 4.38: Matriz de correlação utilizando o coeficiente de Spearman (a), rescala de cores para a faixa de interesse (b).

Tabela 4.5: Coeficientes de correlação de Spearman.

	$AVG(Wa)$	$STD(Wa)$	$AVG(La)$	$STD(La)$
$Re$	$-2,56 \cdot 10^{-02}$	$-2,20 \cdot 10^{-01}$	$-2,17 \cdot 10^{-02}$	$-1,76 \cdot 10^{-01}$
$We$	$4,48 \cdot 10^{-03}$	$2,53 \cdot 10^{-02}$	$1,38 \cdot 10^{-02}$	$1,42 \cdot 10^{-01}$
$N_p$	$4,89 \cdot 10^{-02}$	$4,09 \cdot 10^{-01}$	$3,57 \cdot 10^{-02}$	$3,96 \cdot 10^{-01}$
$C_{sg}$	$3,22 \cdot 10^{-02}$	$4,41 \cdot 10^{-01}$	$2,11 \cdot 10^{-02}$	$3,97 \cdot 10^{-01}$
$C_{ls}$	$-3,22 \cdot 10^{-02}$	$-4,41 \cdot 10^{-01}$	$-2,11 \cdot 10^{-02}$	$-3,97 \cdot 10^{-01}$
$A_{ls}$	$-4,16 \cdot 10^{-02}$	$-4,56 \cdot 10^{-01}$	$-2,82 \cdot 10^{-02}$	$-4,22 \cdot 10^{-01}$
$D_1$	$5,24 \cdot 10^{-03}$	$1,47 \cdot 10^{-01}$	$7,27 \cdot 10^{-03}$	$1,08 \cdot 10^{-01}$
$D_2$	$6,84 \cdot 10^{-03}$	$3,28 \cdot 10^{-01}$	$-4,70 \cdot 10^{-03}$	$3,08 \cdot 10^{-01}$
$D_3$	$4,19 \cdot 10^{-02}$	$3,64 \cdot 10^{-01}$	$3,20 \cdot 10^{-02}$	$3,41 \cdot 10^{-01}$
$D_4$	$4,75 \cdot 10^{-02}$	$3,00 \cdot 10^{-01}$	$3,66 \cdot 10^{-02}$	$2,82 \cdot 10^{-01}$
$X_1$	$-7,52 \cdot 10^{-03}$	$-6,51 \cdot 10^{-03}$	$1,42 \cdot 10^{-03}$	$-5,56 \cdot 10^{-03}$
$Y_1$	$1,03 \cdot 10^{-02}$	$2,52 \cdot 10^{-02}$	$9,70 \cdot 10^{-03}$	$9,11 \cdot 10^{-02}$
$X_2$	$1,64 \cdot 10^{-02}$	$2,51 \cdot 10^{-01}$	$5,56 \cdot 10^{-03}$	$2,54 \cdot 10^{-01}$
$Y_2$	$2,47 \cdot 10^{-02}$	$2,82 \cdot 10^{-01}$	$1,12 \cdot 10^{-02}$	$3,11 \cdot 10^{-01}$
$X_3$	$4,67 \cdot 10^{-02}$	$3,45 \cdot 10^{-01}$	$3,43 \cdot 10^{-02}$	$3,32 \cdot 10^{-01}$
$Y_3$	$3,26 \cdot 10^{-02}$	$3,49 \cdot 10^{-01}$	$2,63 \cdot 10^{-02}$	$3,51 \cdot 10^{-01}$
$X_4$	$5,14 \cdot 10^{-02}$	$2,91 \cdot 10^{-01}$	$4,14 \cdot 10^{-02}$	$2,75 \cdot 10^{-01}$
$Y_4$	$4,81 \cdot 10^{-02}$	$2,93 \cdot 10^{-01}$	$3,82 \cdot 10^{-02}$	$2,82 \cdot 10^{-01}$

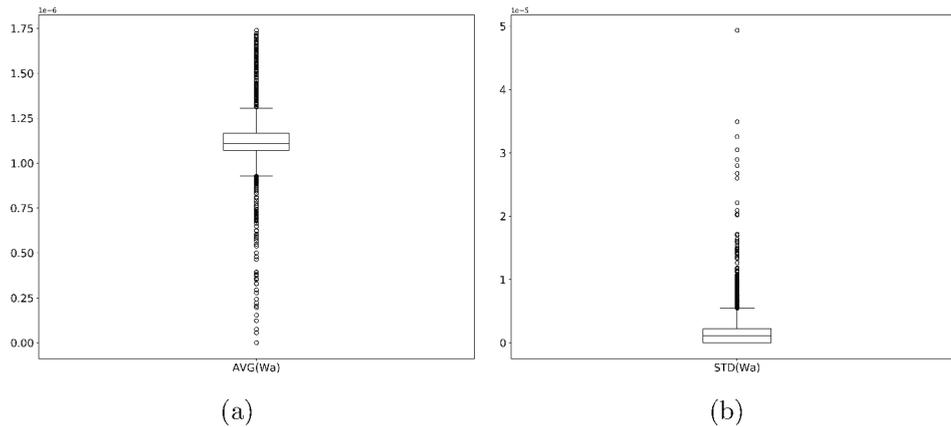


Figura 4.39: *Box plot* da média e do desvio-padrão temporal da área interfacial de sólido molhada.

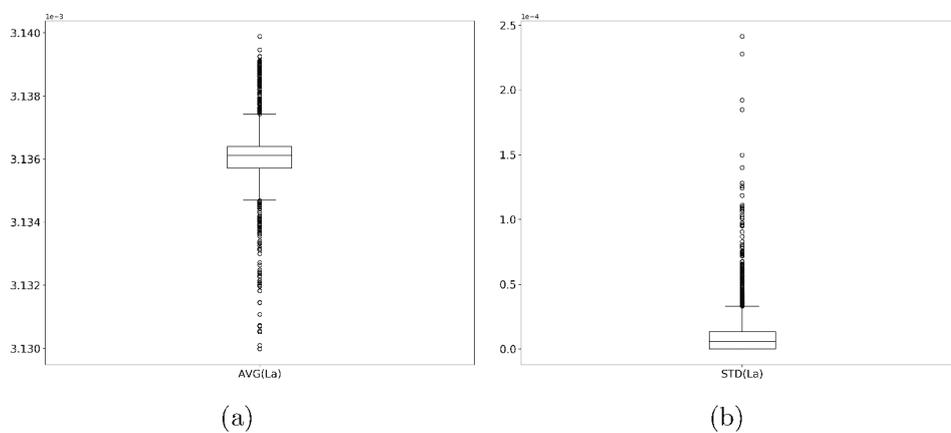


Figura 4.40: *Box plot* da média e do desvio-padrão temporal da área interfacial de líquido.

de fração volumétrica e do campo de vorticidade em um cenário aleatório envolvendo a colisão da gota com três partículas no domínio padrão.

Objetivando avaliar a influência das dimensões do domínio e do nível de refinamento sobre os bancos de dados gerados pelas simulações numéricas, as Tabelas 4.6 e 4.7 destacam os valores percentuais comparativos de cada abordagem.

A Tabela 4.6 apresenta os valores relativos percentuais de média e desvio-padrão para as variáveis  $AVG(Wa)$ ,  $STD(Wa)$ ,  $AVG(La)$  e  $STD(La)$  do banco de dados das simulações com domínio estendido em relação ao banco de dados padrão, cada um com 1.000 amostras.

A Tabela 4.7 apresenta os mesmos valores relativos percentuais do banco de dados das simulações com domínio estendido e com maior refinamento em

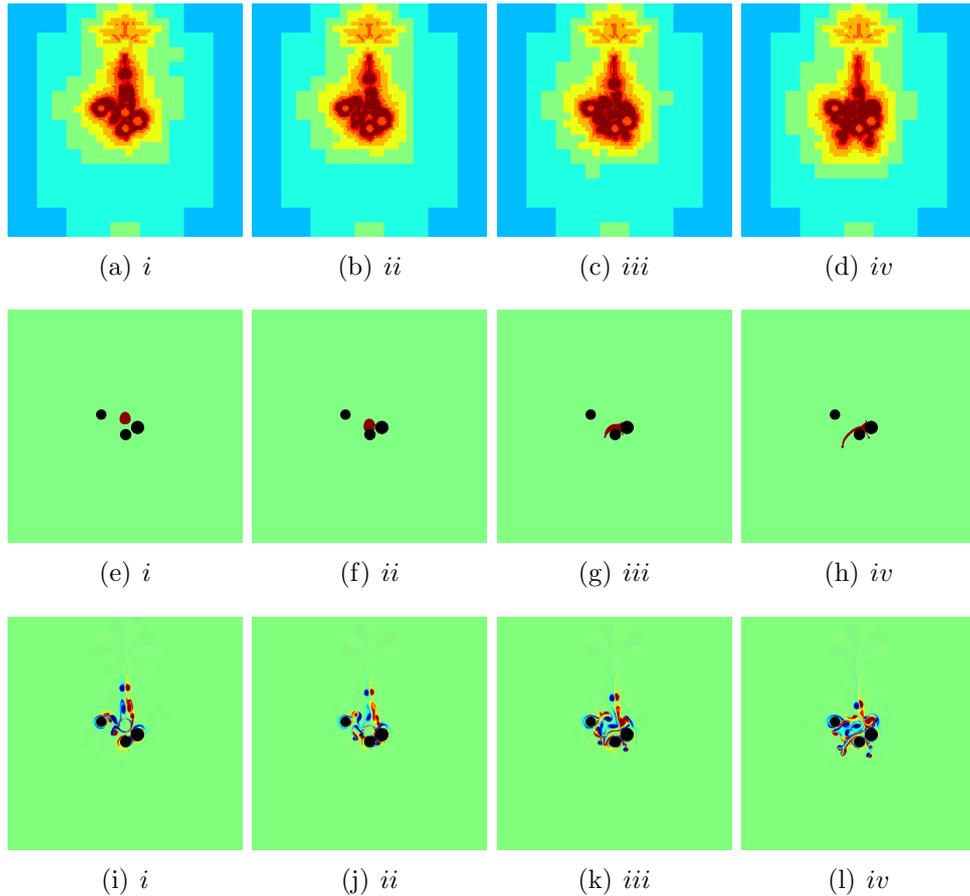


Figura 4.41: Interação entre gota e aglomerado de partículas em quatro instantes  $i$ ,  $ii$ ,  $iii$  e  $iv$  de um cenário aleatório do banco de dados padrão.

Tabela 4.6: Percentual relativo das variáveis de saída para a amostra de 1.000 simulações para o domínio estendido em relação ao banco de dados padrão.

	$AVG(Wa)$ [%]	$STD(Wa)$ [%]	$AVG(La)$ [%]	$STD(La)$ [%]
MEAN	5,7	6,4	0	8,8
STD	-11,0	8,1	-12,1	-0,7

relação ao banco de dados somente com o domínio estendido.

Tabela 4.7: Percentual relativo das variáveis de saída para a amostra de 1.000 simulações para o domínio estendido e refinado em relação ao banco de dados de domínio estendido.

	$AVG(Wa)$ [%]	$STD(Wa)$ [%]	$AVG(La)$ [%]	$STD(La)$ [%]
MEAN	-0,9	-0,6	0,3	12,6
STD	13,5	0,8	51,7	30,9

Os resultados das Tabelas 4.6 e 4.7 revelam que as dimensões do domínio influenciam pouco nas variáveis de saída em comparação com o nível máximo de refinamento das simulações. Nos dois casos comparativos, as alterações de

configuração afetam mais o desvio-padrão das amostras do que os valores médios. Em especial, a elevada diferença relativa da área superficial líquido-gás,  $La$ , da Tabela 4.7, indica que ocorreu intensa perda de informação da interface em função do nível insuficiente de refinamento nas configurações utilizadas para análise do presente trabalho.

Essas observações apontam para opções de trabalhos futuros, uma vez que a decisão pela configuração adotada nesta tese levou em consideração o custo computacional da construção do banco de dados com 4.000 simulações distintas.

A quantidade de dados amostrais do banco de dados também afeta as estatísticas analisadas, conforme mostra a Tabela 4.8.

Tabela 4.8: Percentual relativo das variáveis de saída para a amostra de 1.000 simulações em relação à amostra de 4.000 simulações em relação ao domínio padrão.

	$AVG(Wa)$ [%]	$STD(Wa)$ [%]	$AVG(La)$ [%]	$STD(La)$ [%]
MEAN	-3,6	-1,9	1,3	-2,4
STD	-19,2	-9,6	-16,2	0

À medida que o custo computacional das simulações tridimensionais reduzir, é importante realizar um estudo de correlação entre os cenários  $2D$  e  $3D$ . Um nível mais refinado da análise da interação gota-partículas, a ser realizado no futuro, consiste na construção completa do banco de dados a partir do estudo das 4.000 simulações tridimensionais.

#### 4.2.2 *Deep learning*

A seção anterior explorou o banco de dados gerado pelas simulações numéricas através da inspeção das variáveis de entrada e de saída, e da correlação entre duas variáveis quaisquer, especificamente entre cada variável de entrada e cada variável de saída.

Visando estabelecer um ponto de partida e uma referência em termos das métricas do modelo preditivo baseado em *deep learning*, esta seção inicia-se com a apresentação das métricas de predição via modelo *dummy* (i.e., estimativa pela média) e via modelos de *machine learning*.

As análises são divididas segundo a performance das métricas *mean squared error* (*MSE*) e *mean absolute percentage error* (*MAPE*): (I) *machine learning vs. deep learning*; (II) *deep learning* sem e com *data augmentation*; (III) *dataset* sem e com corte parcial de *outliers*; (IV) número de variáveis de saída: apenas *STD vs. AVG* e *STD*; (V) *dataset* conjunto e separado por número de partículas presentes no sistema; e (VI) número de variáveis de entrada: 6 básicas *vs.* 18 totais.

A Figura 4.42 apresenta o *box plot* da métrica *MSE* dos modelos *dummy*, *linear regression* (*LR*), *lasso regression*, *elastic net*, *decision tree* (*CART*), *random forest*, *extra trees*, *ada boost* e *gradient boosting* através de uma validação cruzada com 10 amostragens. Essa abordagem inicial considerou a relação entre as 18 variáveis de entrada com cada uma das 4 variáveis de saída separadamente, para o conjunto de teste de 20% dos 8.000 dados totais.

Tanto a variável  $AVG(Wa)$  quanto a  $AVG(La)$  apresentaram *MSE* muito baixos, da ordem de  $10^{-14}$  e  $10^{-13}$ , respectivamente. Sua métrica *MAPE* para o modelo *dummy* foi de 8% e 0%, respectivamente. Considerando esses valores, os dados apresentados na Tabela 4.4 e a distribuição das variáveis de saída, Figs. 4.39 e 4.40, é possível concluir que as variáveis de média temporal  $AVG(Wa)$  e  $AVG(La)$  são suficientemente preditas por suas médias,  $1, 11 \cdot 10^{-6}$  e  $3, 14 \cdot 10^{-3}$ , respectivamente, sem a necessidade de modelos de *statistical learning*. Essa conclusão, no entanto, é restrita aos modelos físico e numérico empregados no presente trabalho, e aos parâmetros das simulações realizadas, e.g., o tempo adimensional total da simulação  $T^* = 9, 5$ , as dimensões da zona de partículas e os intervalos admitidos de cada parâmetro envolvido no sistema.

No caso das variáveis  $STD(Wa)$  e  $STD(La)$ , os valores de *MSE* foram três ordens de grandeza superiores do que de suas correspondentes médias,  $10^{-11}$  e  $10^{-10}$ , respectivamente. Essa diferença se torna mais nítida comparando seus valores da métrica *MAPE* para o modelo *dummy*, 587% e 1.689%, respectivamente. A Figura 4.42 também evidencia que os modelos de *machine learning* utilizados não foram eficazes na minimização dessas métricas. Isso indica um grande potencial

para o emprego de *deep learning* para este sistema de otimização específico.

Após uma extensa exploração dos hiperparâmetros do modelo de *deep learning*, os valores ótimos utilizados para o sistema estudado foram:

- *Loss function*: *mean squared error* (*MSE*);
- Taxa de aprendizado:  $1 \cdot 10^{-2}$ ;
- Decaimento da taxa de aprendizado:  $1 \cdot 10^{-4}$  (*opcional*);
- Otimizador: Adam ( $\beta_1 = 0,9$ ,  $\beta_2 = 0,999$ );
- Função de ativação: SELU — variante da ReLU;
- *Batch size*: 1.600 (*mini-batch*) até 8.000 (*full-batch*);
- *Weight initialization*: distribuição normal;
- Arquitetura da rede: 1 camada de entrada com 6 ou 18 variáveis independentes (*VI*), 1 camada intermediária com  $2 \cdot VI$  *perceptrons*, 1 camada intermediária com  $10 \cdot VI$  *perceptrons* e 1 camada de saída com 1 ou 2 variáveis dependentes;
- *Batch normalization*: anterior à função de ativação em todas as camadas intermediárias;
- *Dropout*: 50% após a função de ativação em todas as camadas intermediárias.

Uma etapa de pré-processamento dos dados denominada *data augmentation* duplicou os dados disponíveis de 4.000 à 8.000 simulações através do espelhamento das partículas em relação ao eixo original  $x$ . O *dataset* para o estudo dos modelos de *deep learning* foram divididos em: teste (5%), treinamento (95%·80%) e validação (95%·20%). A normalização das variáveis independentes ocorreu com base no *dataset* de treinamento, sendo os outros *datasets* normalizados a partir das informações de média e desvio-padrão dos dados de treino.

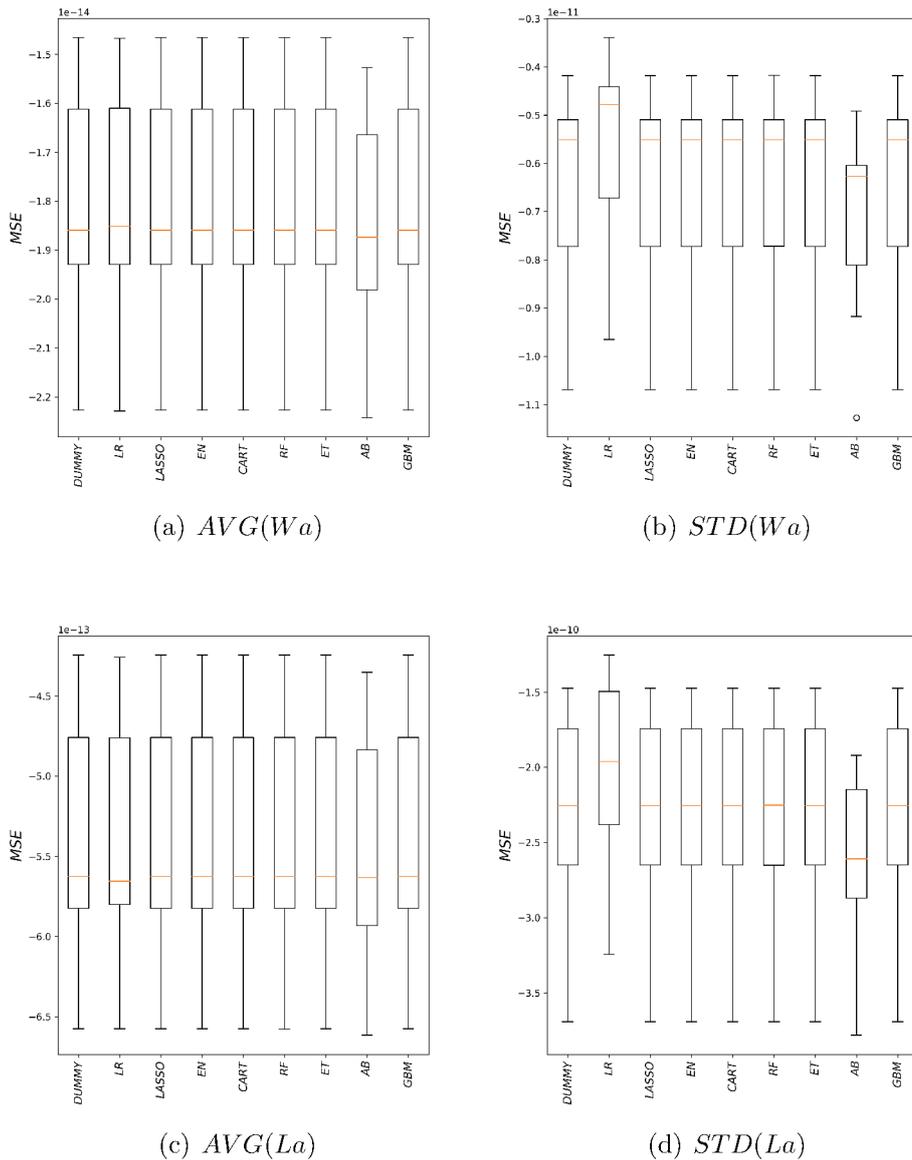


Figura 4.42: Mean squared error de teste dos modelos *dummy* e de *machine learning*.

Na análise do efeito da *data augmentation* sobre a métrica do modelo de *deep learning*, foi considerada a configuração de 18 variáveis de entrada e uma única variável de saída  $STD(Wa)$ , sem nenhum corte do *dataset* de 4.000 dados, Fig. 4.43.

Esses valores indicam uma melhora de 25% em relação aos modelos de *machine learning*, com  $MAPE$  do *dataset* de teste iguais à 478% sem *data augmentation* e 435% com *data augmentation*. A melhora percentual com a utilização de *data augmentation* foi de 9%.

A Figura 4.43 apresenta a convergência da *loss function* durante a otimização da matriz de coeficientes da rede neural com e sem *data augmentation*. Como os hiperparâmetros já estão otimizados, a diferença entre as curvas são pequenas. Variar um dos hiperparâmetros produz curvas mais oscilantes e com convergência mais lenta ou possível divergência.

Normalmente a *loss function* do *dataset* de treinamento é menor ou igual à *loss function* do *dataset* de validação durante o processo de convergência. No entanto, todos os resultados obtidos nesse trabalho apresentaram um efeito inverso, cuja causa pode estar associada à distribuição muito concentrada com vários *outliers* das variáveis de saída analisadas.

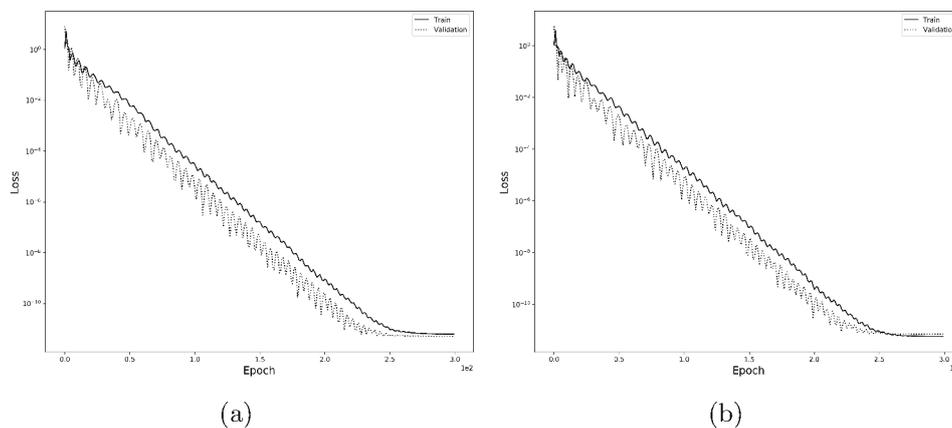
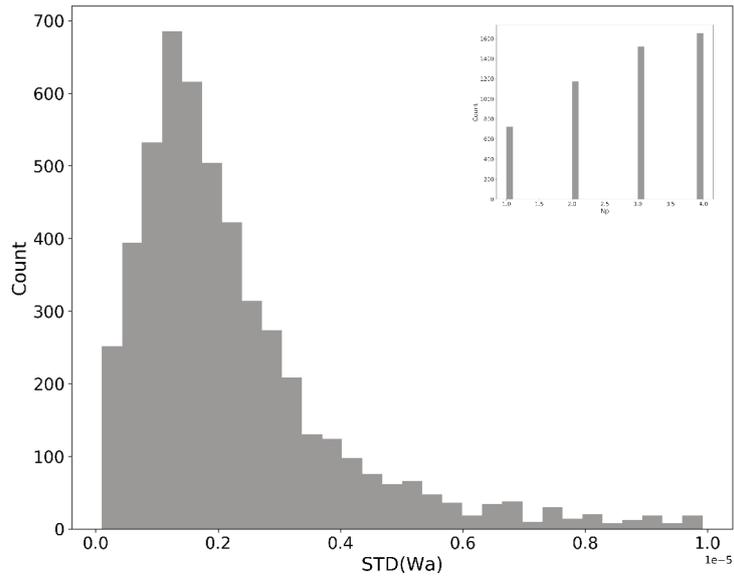


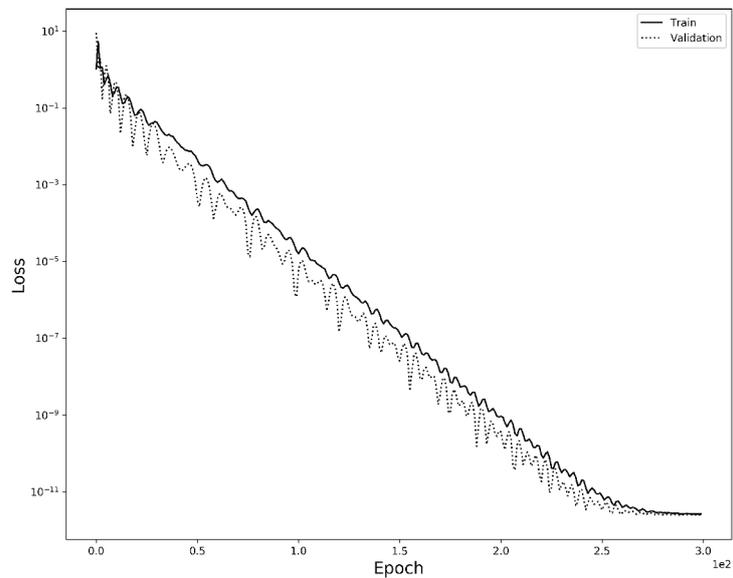
Figura 4.43: *Loss function* de treinamento e validação dos modelos de *deep learning* para  $STD(Wa)$ : (a) sem *data augmentation*, (b) com *data augmentation*.

Para analisar o efeito dos *outliers* e da amplitude da faixa das variáveis de saída sobre as métricas de avaliação dos modelos preditivos, foram realizados cortes dos dados com  $STD(Wa) > 1 \cdot 10^{-5}$  (54 dos 4.000 dados originais) e com  $STD(Wa) < 1 \cdot 10^{-7}$  (1.411 dos 4.000 dados originais), Fig. 4.44. O *MAPE* obtido para o *dataset* de teste foi expressivamente melhor, de 89%. No entanto, o modelo *dummy* e o *linear regression* também apresentam *MAPE* igualmente baixos.

Realizar cortes de *outliers* ou valores arbitrários úteis sem a compreensão total de sua representatividade no *dataset* não é uma opção para a exploração correta dos modelos de *deep learning*. Uma solução possível que produzirá o efeito



(a)



(b)

Figura 4.44: Histograma dos dados de saída e número de partículas do *dataset* após o corte de *outliers* e valores próximos de zero (a), *loss function* de treinamento e validação dos modelos de *deep learning* para STD(Wa) com corte (b).

da minimização de *outliers* e a redução da faixa das variáveis de saída é a redução das faixas dos parâmetros considerados nas simulações, por exemplo o estudo da interação da gota com até duas partículas ao invés de quatro, com a respectiva redução das dimensões da zona de partículas.

A Figura 4.45 apresenta duas soluções para aperfeiçoar a métrica *MAPE* dos modelos: número de variáveis de saída e número de variáveis de entrada do

sistema.

A utilização da variável média  $AVG(Wa)$  em conjunto com a variável de desvio-padrão  $STD(Wa)$  auxilia na distinção dos padrões aprendidos na rede neural, distinguindo a correlação das variáveis de entrada com a resposta  $AVG(Wa)$  da resposta  $STD(Wa)$ . A métrica  $MAPE$  do *dataset* de teste para o caso com 2 variáveis de saída foi de 211% melhorando a performance do modelo em 51%.

O número de variáveis de entrada utilizadas nos modelos anteriores já contemplava o total das 18 variáveis independentes, no entanto, uma primeira abordagem utilizada considerou apenas as 6 variáveis que descrevem o escoamento gota-partículas de uma forma global (i.e.,  $Re$ ,  $We$ ,  $N_p$ ,  $C_{sg}$ ,  $C_{ls}$  e  $A_{ls}$ ), sem a informação da disposição individual das partículas.

Utilizar as informações espaciais das partículas, i.e., 18 variáveis de entrada ( $MAPE = 211\%$ ), melhorou a métrica em 7% com relação ao modelo com apenas 6 variáveis de entrada ( $MAPE = 227\%$ ) para o caso com variáveis conjuntas  $AVG(Wa)$  e  $STD(Wa)$ . No caso das variáveis conjuntas  $AVG(La)$  e  $STD(Wa)$ , essa melhora foi de 8%, com  $MAPE$  de 932% à 853%. Adicionalmente, a curva da *loss function* para 6 variáveis de entrada é mais suave do que a curva para 18 variáveis de entrada, Fig. 4.45, por formar uma rede neural mais simples.

O número de partículas ( $N_p$ ) presentes no sistema tem grande impacto nas faixas e distribuições das variáveis de entrada e de saída, desta forma, a última abordagem considerada neste estudo avaliou separadamente os sistemas com  $N_p \in [1 - 4]$ .

A métrica  $MAPE$  do *dataset* de teste para os sistemas com 1, 2, 3 e 4 partículas, respectivamente, 266%, 241%, 233% e 182%. Esse resultado indica que sistemas com fração de sólido maiores produzem banco de dados de mais fácil modelagem via *deep learning*.

O melhor modelo produzido pelas análises do presente trabalho considerando o sistema completo obteve uma métrica  $MAPE$  igual à 211%, relativo ao banco de dados com *data augmentation*, 18 variáveis de entrada e variáveis de saída conjuntas  $AVG(Wa)$  e  $STD(Wa)$ .

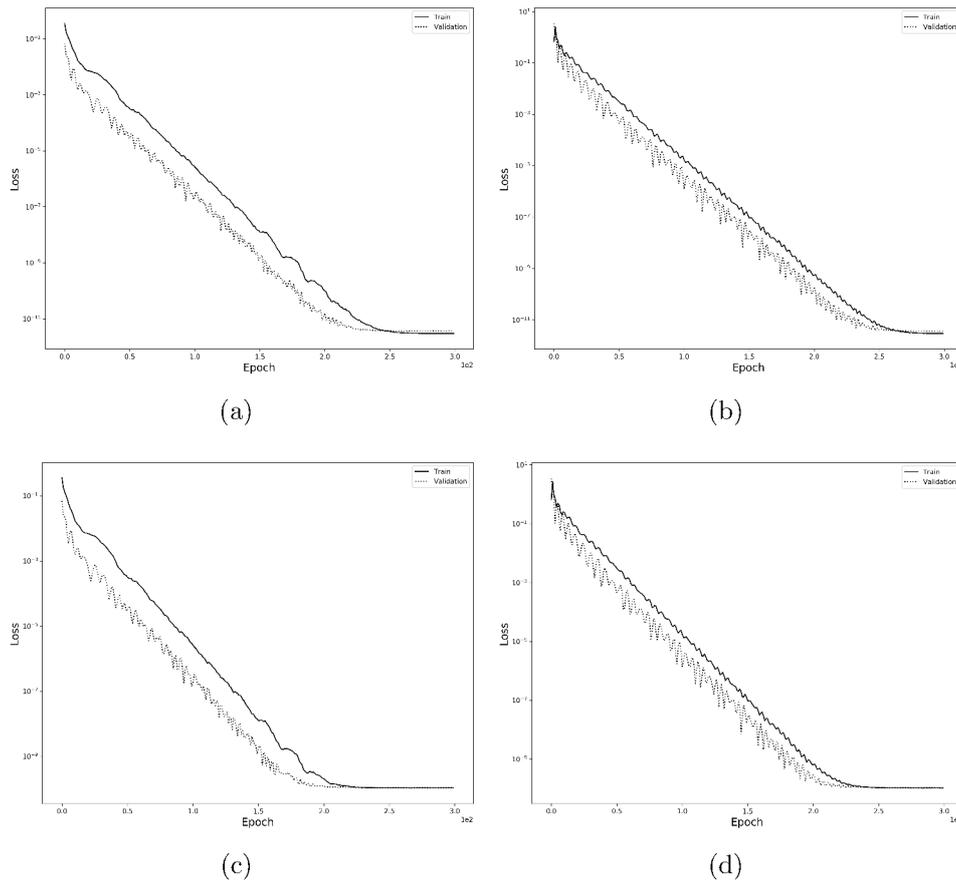


Figura 4.45: *Loss function* de treinamento e validação dos modelos de *deep learning* para AVG(Wa) e STD(Wa) conjunto: (a) 6 variáveis de entrada, (b) 18 variáveis de entrada. *Loss function* para AVG(La) e STD(La) conjunto: (c) 6 variáveis de entrada, (d) 18 variáveis de entrada.

Esse é um valor extremamente elevado, uma vez que indica que o modelo errou a predição em média 211% em relação ao valor de referência da simulação. No entanto, como os valores mínimos e máximos das variáveis preditas formam um espaço amplo. e.g.,  $[0 - 10^{-5}]$ , Tab. 4.4, o impacto prático do erro dependerá da faixa de interesse, i.e., prever  $6,0 \cdot 10^{-5}$  ao invés de  $2,0 \cdot 10^{-5}$  equivale à  $MAPE = 200\%$ , porém a diferença absoluta de  $4,0 \cdot 10^{-5}$  equivale aproximadamente à 0,01% em relação aos valores na ordem de  $10^{-1}$ .

Uma prática geral para a boa eficiência de uma rede neural reside nos esforços de pré-processamento dos dados. Uma abordagem que poderia melhorar a métrica do modelo seria adicionar uma nova variável de entrada para cada partícula que represente a distância da mesma até a gota. Uma interpretação física indica que essa distância afeta os resultados da colisão, desta forma, ao invés de esperar

que a rede neural forme internamente um padrão que represente a norma Euclidiana entre as variáveis de entrada  $X_p$  e  $Y_p$ , o pré-processamento dos dados forneceria de antemão essa informação, facilitando o aprendizado.

De uma forma geral, além das conclusões já elencadas no decorrer desta seção, a análise indica que o sistema escolhido é muito complexo, e que sistemas mais simplificados devem ser explorados em trabalhos futuros, como a interação de gotas com duas partículas, distribuídas num raio menor em relação à posição da gota.

# CAPÍTULO V

## Conclusão

Os efeitos do impacto alinhado e isotérmico entre gota e partícula esférica foram estudados através da plataforma numérica-computacional Basilisk. Este trabalho utilizou a formulação conservativa das equações de transporte, a advecção geométrica da fração volumétrica no método VOF e a malha adaptativa *octree* do código Basilisk. A análise completa envolveu as etapas de validação com experimento, investigação do fenômeno pela perspectiva energética, planejamento de experimento computacional e aplicação de métodos de *machine learning* para prospecção e criação de um modelo preditivo correlacionando os parâmetros do escoamento Reynolds e Weber com a área da lamela formada após o impacto. Os resultados deste trabalho podem ser utilizados em modelos de escala industrial onde a área da lamela no impacto gota-partícula se mostrar relevante, como exemplo em processos térmico- evaporativos.

A validação com o experimento teve como base dois regimes distintos, baixo e alto números de Reynolds e Weber — ambos com formação de lamela: (C1)  $Re = 5.940$  e  $We = 146$ , e (C2)  $Re = 16.500$  e  $We = 1.133$ . Os resultados numéricos mostraram concordância dentro da faixa de 10% de erro para o diâmetro de base e a altura adimensional da lamela, o que pode ser substancialmente melhorado com a modelagem o ângulo de contato entre gota e partícula; e elevada concordância para a espessura do filme líquido formado sobre a partícula, sendo

esse apenas limitado pelo nível de refinamento da malha.

O maior nível de refinamento utilizado,  $l = 12$ , demandou para  $C2$  aproximadamente 56 milhões de células ( $M_{C2}$ ) da malha *octree* adaptativa, e equivale ao espaçamento  $D_d/\Delta = 240$ , onde  $D_d$  é o diâmetro da gota e  $\Delta$  é o tamanho da menor célula numérica. Uma projeção do custo computacional em função do nível de refinamento apontou a tendência exponencial  $M_{C2} = 0,65 \cdot e^{1,49 \cdot l}$ . A utilização da condição de contorno periódica no lugar da condição de Neumann, no entanto, é capaz de reduzir o custo computacional em 1/3, sem alterar o modelo físico deste fenômeno.

Com base na definição de que a tensão superficial é a energia necessária para incrementar em uma unidade a área interfacial de um sistema multifásico, lançou-se mão do cálculo da área numérica da lamela formada após o impacto da gota com a partícula para estudar a correlação com os parâmetros adimensionais do escoamento. O exame da colisão pela perspectiva da energia mecânica do escoamento mostrou que o número de Reynolds baseado nas propriedades físicas do gás representa o potencial de transformação de energia cinética do líquido para energia cinética do gás, enquanto o número de Weber representa o potencial de transformação de energia cinética do líquido para energia interfacial.

O planejamento de experimento computacional, a partir do  $2^k$  *planejamento* fatorial para o intervalo  $Re = [10^3 - 10^4]$  e  $We = [10^2 - 10^3]$ , confirmou a análise energética, demonstrando que os efeitos do número de Reynolds e do número de Weber sobre a área adimensional da lamela no tempo adimensional pós-impacto igual à unidade é de  $-0,155$  e  $0,388$ , respectivamente. Adicionalmente, esses efeitos mostraram se intensificar com o decorrer do tempo após a colisão.

Uma vez que as simulações em mecânica dos fluidos computacional são determinísticas, o presente trabalho propôs a utilização de réplicas baseadas nas incertezas do *benchmark* experimental com relação ao formato da gota pré-impacto para construir um intervalo de confiança dos efeitos dos números de Reynolds e Weber sobre a área adimensional da lamela, no tempo adimensional pós-impacto igual

à unidade. Todos os vértices do planejamento experimental apresentaram variância semelhantes, bem como o resíduo tendeu a uma distribuição normal. Desta forma, os intervalos de confiança foram  $CI_{Re} = -0,155 \pm 0,069$  e  $CI_{We} = 0,388 \pm 0,106$ . Como esses intervalos não contêm a origem (i.e., o número 0), é possível concluir que esses efeitos são estatisticamente significantes no que concerne às variações da forma inicial da gota pré-impacto. Toda conclusão estatística está associada com o modelo físico estudado, o conjunto de métodos numéricos empregados, os esquemas de integração espacial e temporal, o nível de refinamento da malha e o passo temporal utilizados nas simulações.

Um modelo preditivo para a área adimensional da lamela em função dos números de Reynolds, Weber, e do tempo adimensional pós-impacto foi construído a partir de métodos de *machine learning* utilizando validação cruzada. Os banco de dados de treinamento e de teste foram divididos na proporção 70%/30%. O modelo de menor valor e variabilidade da métrica  $R^2$  (média 0,96 e desvio-padrão 0,02) e  $RMSE$  (média 0,18 e desvio-padrão 0,12) com base no banco de dados de teste foi a regressão polinomial de terceiro grau. Esse modelo apresentou erro relativo médio de 5,1%. Portanto, esse se mostrou ser um sistema simples, que obteve boa performance com um método linear no ajuste de uma função não-linear, não necessitando de métodos não-paramétricos e não-lineares, como o *decision tree*. Adicionalmente, a precisão do modelo preditivo com relação ao modelo físico está limitada à acurácia das validações dos resultados numéricos, o que também significa que o aperfeiçoamento da modelagem numérica implica na necessidade de se reconstruir o modelo estatístico.

Os efeitos do impacto entre gota e aglomerado de partículas foram estudados a partir de simulação numérica bidimensional utilizando o código Basilisk e *deep learning*. Um extenso banco de dados correlacionando 18 variáveis de entrada e 4 variáveis de saída foi construído com base em mais de 4.000 simulações. As variáveis de saída mais relevantes para esse estudo foram a média e a variância temporal da área molhada das partículas durante a colisão.

A otimização dos hiperparâmetros da *multilayer perceptron* apontou a

*mean squared error* como a melhor *loss function*, a taxa de aprendizado de  $1 \cdot 10^{-2}$ , o otimizador Adam e a função de ativação SELU. O grau de profundidade da rede neural não influenciou a convergência da *loss function*, considerando o tamanho máximo do banco de dados de treinamento, validação e teste de 8.000 amostras.

Os estudos realizados compararam a performance dos métodos de *machine learning* com o método de *deep learning*, a influência de *deep learning* sem e com *data augmentation*, *dataset* sem e com corte parcial de *outliers*, *dataset* conjunto e separado por número de partículas presentes no sistema, e avaliaram a influência do número de variáveis de entrada e do número de variáveis de saída.

A configuração dos cenários admitidos, i.e.,  $D_d/2 < D_p < 2 \cdot D_d$ , onde  $D_p$  é o diâmetro da partícula, se mostrou muito genérico, gerando uma faixa muito restrita (e.g., de  $1,1 \cdot 10^{-2}$  a  $1,3 \cdot 10^{-2}$ ) da média temporal e muito ampla (e.g.,  $[0 - 10^{-5}]$ ) da variância temporal das variáveis de saída. Portanto, apesar de apresentar melhor acurácia na predição do que os métodos *dummy* e de *machine learning* para o sistema estudado, o método *deep learning* apresentou uma métrica elevada: *Mean Absolute Percentage Error* igual à 211%, para o sistema completo, e 182%, quando considerado o sistema sempre com quatro partículas. Apesar de esses serem valores extremamente elevados, em função do amplo espaço das variáveis dependentes, o impacto prático do erro dependerá da faixa de interesse, i.e., prever  $6,0 \cdot 10^{-5}$  ao invés de  $2,0 \cdot 10^{-5}$  equivale à  $MAPE = 200\%$ , porém a diferença absoluta de  $4,0 \cdot 10^{-5}$  equivale aproximadamente à 0,01% em relação aos valores na ordem de  $10^{-1}$ .

Este trabalho analisou a influência do nível de refinamento da malha e da condição de contorno (i.e., dimensões do domínio) sobre o *dataset* utilizado para a geração dos modelos preditivos. A média e o desvio-padrão das variáveis de saída variaram até 52% e 31%, respectivamente, considerando as alterações realizadas na configuração das simulações. Portanto, toda conclusão estatística deste modelo físico de colisão gota-partícula não pode ser disassociada da simplificação de bidimensionalidade, do conjunto de métodos numéricos empregados, dos esquemas de integração espacial e temporal, do nível de refinamento da malha e

do passo temporal utilizados nas simulações.

# CAPÍTULO VI

## Trabalhos futuros

Os potenciais trabalhos futuros abrangem o aperfeiçoamento da modelagem numérica, a exploração mais ampla dos resultados de acordo com interesses de aplicação prática, a expansão do modelo físico, e a reconstrução das soluções através da plataforma de planejamento de experimento computacional e aprendizagem estatística para qualquer alteração dos modelos físico ou numérico.

Com relação à caracterização da lamela formada pela colisão gota-partícula, a modelagem numérica pode ser aperfeiçoada primariamente através da modelagem do ângulo de contato na interface gás-líquido-sólido. Em conjunto, o método de fronteira imersa simplificado pode ser substituído pelo método *embedded boundary*; esse método leva em consideração a fração de volume e de área ocupado pelo sólido na malha *octree*. Adicionalmente, a condição de contorno periódica pode ser aplicada no lugar da condição de contorno Neumann sem nenhum prejuízo ao modelo físico e com economia de recursos computacionais.

A exploração mais ampla dos resultados numéricos depende dos interesses práticos, e está relacionada com a descrição do *breakup* da lamela, com construção da função densidade de probabilidade para os diâmetros das gotas secundárias e correlação com os números de onda das franjas. Além disso, pode-se suprimir essas gotas da simulação com consequente redução do custo computacional; no entanto, é necessário adicionar um termo fonte na equação de transporte

da quantidade de movimento linear que expresse a substituição da fase líquida pela gasosa.

A expansão do modelo físico pode ocorrer em duas frentes. A primeira frente explora variações das configurações, como desalinhamento entre gota e partícula, mudança na geometria e porosidade da partícula; e subespaços distintos dos parâmetros influentes do escoamento, como razão de diâmetros gota-partícula e números de Reynolds e Weber. A segunda frente contempla os efeitos térmicos e evaporativos, com possível inclusão da reação química. Como o sistema bifásico estudado mescla um comportamento elástico da interface com o escoamento Newtoniano do fluido, é possível explorar os efeitos da transformação entre energias mecânicas e térmicas; por exemplo, a evaporação consome energia térmica do sistema ao mesmo tempo que reduz a energia mecânica interfacial, mas acelera o escoamento pela movimentação da interface.

O que concerne ao modelo físico da colisão entre gota e aglomerado de partículas, os trabalhos futuros podem restringir os intervalos dos parâmetros do escoamento e estudá-los separadamente, como os números de Reynolds e Weber, o número de partículas presentes no sistema e seus respectivos diâmetros, a dimensão da zona de partículas, e o tempo de simulação e captura da estatística temporal das variáveis de saída. Essa redução tem o objetivo de aumentar a faixa da média temporal e de diminuir a faixa da variância temporal das variáveis de saída, i.e., área superficial líquido-gás e área molhada das partículas, melhorando suas distribuições estatísticas com consequente aperfeiçoamento do poder preditivo dos modelos de *deep learning*.

Por fim, uma vez que a plataforma de análise e modelagem estatística baseada no planejamento de experimento computacional e aprendizagem estatística está estabelecida, qualquer alteração do modelo físico, numérico ou computacional exige que os modelos estatísticos preditivos sejam reconstruídos e as conclusões reanalisadas. Para o contexto numérico, sugere-se a utilização do método *Latin Hypercube* para a exploração dos espaços amostrais dos fatores de interesse, ao invés do método  $2^k$  planejamento fatorial utilizado neste trabalho para prospecção

dos efeitos de apenas dois fatores. Com relação aos métodos de *machine learning* e *deep learning*, o processo de otimização de seus hiper-parâmetros depende de cada sistema físico estudado. Quando a captura das informações das estruturas temporais ou espaciais forem importantes, sugere-se o emprego das redes neurais convolucionais.

## Referências bibliográficas

ABADI, M.; AGARWAL, A.; BARHAM, P.; BREVDO, E.; CHEN, Z.; CITRO, C.; CORRADO, G. S.; DAVIS, A.; DEAN, J.; DEVIN, M.; GHEMAWAT, S.; GOODFELLOW, I.; HARP, A.; IRVING, G.; ISARD, M.; JIA, Y.; JOZEFOWICZ, R.; KAISER, L.; KUDLUR, M.; LEVENBERG, J.; MANÉ, D.; MONGA, R.; MORE, S.; MURRAY, D.; OLAH, C.; SCHUSTER, M.; SHLENS, J.; STEINER, B.; SUTSKEVER, I.; TALWAR, K.; TUCKER, P.; VANHOUCKE, V.; VASUDEVAN, V.; VIÉGAS, F.; VINYALS, O.; WARDEN, P.; WATTENBERG, M.; WICKE, M.; YU, Y.; ZHENG, X. *TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems*. 2015. Software available from tensorflow.org. Disponível em: <<http://tensorflow.org/>>.

ABU-AL-SAUD, M. O.; POPINET, S.; TCHELEPI, H. A. A conservative and well-balanced surface tension model. *Journal of Computational Physics*, Elsevier Inc., v. 371, n. February, p. 896–913, 2018. ISSN 10902716. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.02.022>>.

AJITH, A. *Droplet dynamics on non-porous and porous media: impact, spreading and absorption*. Tese (Doutorado), 2019.

ANTONINI, C.; AMIRFAZLI, A.; MARENGO, M. Drop impact and wettability: From hydrophilic to superhydrophobic surfaces. *Physics of Fluids*, v. 24, n. 10, 2012. ISSN 10706631.

BAKSHI, S.; ROISMAN, I. V.; TROPEA, C. Investigations on the impact of a drop onto a small spherical target. *Physics of Fluids*, v. 19, n. 3, 2007. ISSN 10706631.

BANITABAEI, S. A.; AMIRFAZLI, A. Droplet impact onto a solid sphere: Effect of wettability and impact velocity. *Physics of Fluids*, v. 29, n. 6, 2017. ISSN 10897666.

CAO, L.; VERBEEK, F. J. Analytical evaluation of algorithms for point cloud surface reconstruction using shape features. *J. Electron. Imaging.*, v. 22, 2013.

CHARALAMPOUS, G.; HARDALUPAS, Y. Collisions of droplets on spherical particles. *Physics of Fluids*, v. 29, n. 10, 2017. ISSN 10897666.

CHOLLET, F. *et al. Keras*. [S.l.]: GitHub, 2015. <<https://github.com/fchollet/keras>>.

DUBROVSKY, V. V.; PODVYSOTSKY, A. M.; SHRAIBER, A. A. Particle interaction in three-phase polydisperse flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 18, n. 3, p. 337–352, 1992. ISSN 03019322.

EINSFELDT, M. *Dinâmica e estabilidade de um conversor de craqueamento catalítico de resíduo*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Agosto 2005.

FINCH, T. Incremental calculation of weighted mean and variance. *General Relativity and Gravitation*, v. 39, n. 4, p. 511–520, 2009. ISSN 0033-068X. Disponível em: <<http://ptp.oxfordjournals.org/content/126/6/993.abstract>>.

FONTES, D. H.; VILELA, V.; Souza Meira, L. de; José de Souza, F. Improved hybrid model applied to liquid jet in crossflow. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier Ltd, v. 114, p. 98–114, 2019. ISSN 03019322. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0301932218307237>>.

FUSTER, D.; POPINET, S. An all-Mach method for the simulation of bubble dynamics problems in the presence of surface tension. *Journal of Computational Physics*, Elsevier Inc., v. 374, p. 752–768, 2018. ISSN 10902716. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.07.055>>.

GERON, A. *Hands-on machine learning with Scikit-Learn and TensorFlow*. O'Reilly Media, 2017. ISBN 1491962240. Disponível em: <<https://books.google.com/books?id=bRpYDgAAQBAJ&dq=tf.multinom>>.

HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. The Elements of Statistical Learning. *The Elements of Statistical Learning*, Springer, 2009. ISSN 0172-7397.

HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, v. 39, n. 1, p. 201–225, 1981. ISSN 10902716.

JR., C. J. S. Response surface modeling of combined-cycle propulsion components using computational fluid dynamics. *40th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 2002.

LAW, A. M. *Simulation modeling and analysis*. [S.l.: s.n.], 2009. ISSN 00303941. ISBN 9781405193658.

LAW, M. A. A tutorial on design of experiments for simulation modeling averill. *Proceedings of the 2017 Winter Simulation Conference*, p. 550–564, 2017.

LINDEN, S. J. A. van der; HOOFT, J. A. van; ROODE, S. R. de; HEERWAARDEN, C. C. van; POPINET, S.; WIEL, B. J. H. van de. Towards Adaptive Grids for Atmospheric Boundary-Layer Simulations. *Boundary-Layer Meteorology*, Springer Netherlands, v. 167, n. 3, p. 421–443, 2018. ISSN 0006-8314. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10546-018-0335-9>>.

LING, Y.; LEGROS, G.; POPINET, S.; ZALESKI, S. Direct numerical simulation of an atomizing biodiesel jet : Impact of fuel properties on atomization characteristics. v. 5, n. September, p. 6–8, 2017.

LÓPEZ, J.; ZANZI, C.; GÓMEZ, P.; FAURA, F.; HERNÁNDEZ, J. A new volume of fluid method in three dimensions—part ii: Piecewise-planar interface reconstruction with cubic-bézier fit. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley Sons, Ltd., v. 58, n. 8, p. 923–944, 2008. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.1775>>.

MALGARINOS, I.; NIKOLOPOULOS, N.; GAVAISES, M. A numerical study on droplet-particle collision dynamics. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier Inc., v. 61, p. 499–509, 2016. ISSN 0142727X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2016.06.010>>.

MALGARINOS, I.; NIKOLOPOULOS, N.; GAVAISES, M. Numerical investigation of heavy fuel droplet-particle collisions in the injection zone of a Fluid Catalytic Cracking reactor, Part I: Numerical model and 2D simulations. *Fuel Processing Technology*, Elsevier B.V., v. 156, p. 317–330, 2017. ISSN 03783820. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2016.09.014>>.

MALGARINOS, I.; NIKOLOPOULOS, N.; GAVAISES, M. Numerical investigation of heavy fuel droplet-particle collisions in the injection zone of a Fluid Catalytic Cracking reactor, Part II: 3D simulations. *Fuel Processing Technology*, Elsevier B.V., v. 156, p. 317–330, 2017. ISSN 03783820. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2016.09.012>>.

MALGARINOS, I.; NIKOLOPOULOS, N.; GAVAISES, M. Numerical investigation of heavy fuel droplet-particle collisions in the injection zone of a Fluid Catalytic Cracking reactor, Part II: 3D simulations. *Fuel Processing Technology*, Elsevier B.V., v. 156, p. 317–330, 2017. ISSN 03783820. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2016.09.012>>.

MALGARINOS, I.; NIKOLOPOULOS, N.; MARENGO, M.; ANTONINI, C.; GAVAISES, M. VOF simulations of the contact angle dynamics during the drop spreading: Standard models and a new wetting force model. *Advances in Colloid and Interface Science*, Elsevier B.V., v. 212, p. 1–20, 2014. ISSN 00018686. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cis.2014.07.004>>.

MARCHAND, A.; WEIJS, J. H.; SNOEIJER, J. H.; ; ANDREOTTI, B. Why is surface tension a force parallel to the interface? *Am. J. Phys.*, v. 79, 2011.

MCKINNEY, W. Data structures for statistical computing in python. In: WALT, S. van der; MILLMAN, J. (Ed.). *Proceedings of the 9th Python in Science Conference*. [S.l.: s.n.], 2010. p. 51 – 56.

MITRA, S.; DOROODCHI, E.; PAREEK, V.; JOSHI, J. B.; EVANS, G. M. Collision behaviour of a smaller particle into a larger stationary droplet. *Advanced Powder Technology*, The Society of Powder Technology Japan, v. 26, n. 1, p. 280–295, 2015. ISSN 15685527. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.apt.2014.10.008>>.

MITRA, S.; EVANS, G. M.; DOROODCHI, E.; PAREEK, V.; JOSHI, J. B. Interactions in droplet and particle system of near unity size ratio. *Chemical Engineering Science*, v. 170, p. 154–175, 2017. ISSN 00092509. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2017.03.059>>.

MITRA, S.; EVANS, G. M.; JOSHI, J. B.; PAREEK, V.; NGUYEN, T. T. Evaporation of a sessile binary droplet on a heated spherical particle. *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 99, p. 558–571, 2018. ISSN 08941777. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2018.08.014>>.

MITRA, S.; SATHE, M.; DOROODCHI, E.; PAREEK, V.; JOSHI, J. B.; G.M., E. In-flight collision behaviour of droplets on a spherical particle falling under gravity. *8th World Conference on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics, and Thermodynamics, June 16-20, Lisbon, Portugal*, p. 1–8, 2013.

MITRA, S.; SATHE, M. J.; DOROODCHI, E.; UTIKAR, R.; SHAH, M. K.; PAREEK, V.; JOSHI, J. B.; EVANS, G. M. Droplet impact dynamics on a spherical particle. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 100, p. 105–119, 2013. ISSN 00092509. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2013.01.037>>.

MONTGOMERY, D. C. *Design and Analysis of Experiments*. 8th ed. ed. [S.l.]: John Wiley Sons, Inc., 2013.

MUZAFERIJA, S.; PERIC, M.; SAMES, P.; SCHELLIN, T. A two-fluid navier-stokes solver to simulate water entry. 08 1998.

PEDREGOSA, F.; VAROQUAUX, G.; GRAMFORT, A.; MICHEL, V.; THIRION, B.; GRISEL, O.; BLONDEL, M.; PRETTENHOFER, P.; WEISS, R.; DUBOURG, V.; VANDERPLAS, J.; PASSOS, A.; COURNAPEAU, D.; BRUCHER, M.; PERROT, M.; DUCHESNAY, E. Scikit-learn: Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, v. 12, p. 2825–2830, 2011.

POPINET, S. A quadtree-adaptive multigrid solver for the Serre – Green – Naghdi equations. 2015.

ROISMAN, I. V.; BERBEROVIĆ, E.; TROPEA, C. Inertia dominated drop collisions. I. On the universal flow in the lamella. *Physics of Fluids*, v. 21, n. 5, 2009. ISSN 10706631.

SANTNER, T. J.; WILLIAMS, B. J.; NOTZ, W. I. *The Design and Analysis of Computer Experiments*. [S.l.]: Springer, 2018. 1203–1204 p. ISSN 0162-1459. ISBN 978-1-4419-2992-1.

SHRAIBER, A. A.; DUBROVSKY, V. V.; PODVYSOTSKY, A. M. Experimental Study of the Laws of Interaction Between Small Particles and Large Drops. v. 24, n. 11, p. 937–947, 2014. ISSN 10445110.

UBBINK, O. Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces. *Splash*, n. January 1997, p. 69, 1997. ISSN 00219991.

WHITE, F. M. *Viscous fluid flow*. 3rd ed. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 2006. McGraw-Hill series in mechanical engineering.