

PAULO COSTA PORTO DE FIGUEIREDO BARBOSA

**MODELAGEM
MATEMÁTICO-NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DO
TRANSPORTE E DEPOSIÇÃO DE SÓLIDOS EM
PROCESSO DE PERFURAÇÃO EM ÁGUAS PROFUNDAS**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

2023

PAULO COSTA PORTO DE FIGUEIREDO BARBOSA

**MODELAGEM MATEMÁTICO-NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DO
TRANSPORTE E DEPOSIÇÃO DE SÓLIDOS EM PROCESSO DE
PERFURAÇÃO EM ÁGUAS PROFUNDAS**

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. João Marcelo Vedovotto

UBERLÂNDIA - MG

2023

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

B238 2023	<p>Barbosa, Paulo Costa Porto de Figueiredo, 1991- Modelagem matemático-numérico-computacional do transporte e deposição de sólidos em processo de perfuração em águas profundas [recurso eletrônico] / Paulo Costa Porto de Figueiredo Barbosa. - 2023.</p> <p>Orientador: João Marcelo Vedovotto. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Mecânica. Modo de acesso: Internet. Disponível em: http://doi.org/10.14393/ufu.te.2023.95 Inclui bibliografia.</p> <p>1. Engenharia mecânica. I. Vedovotto, João Marcelo, 1981-, (Orient.). II. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.</p> <p style="text-align: right;">CDU: 621</p>
--------------	---

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.posmecanicaufu.com.br - secposmec@mecanica.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Tese de Doutorado Acadêmico, nº 349, PPGEM				
Data:	23/02/2023	Hora de início:	13:30	Hora de encerramento:	16:50
Matrícula do Discente:	11813EMC017				
Nome do Discente:	Paulo Costa Porto de Figueiredo Barbosa				
Título do Trabalho:	Modelagem Matemático-Numérico-Computacional do Transporte e Deposição de Sólidos em Processo de Perfuração em Águas Profundas				
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:	Estudo de Dispersão de plumas de material descartado em operações offshore (5850.0107023.18.9) em parceria com a Petrobras				

Reuniu-se por meio de videoconferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU; Aldemir Aparecido Cavalini Júnior - FEMEC/UFU; Fernando Luiz Sacomano Filho - EP-USP; Tobias Bernward Bleninger - UFPR; e João Marcelo Vedovotto - FEMEC/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos, o presidente da mesa, Dr. João Marcelo Vedovotto, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, 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 **João Marcelo Vedovotto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 23/02/2023, às 16:49, 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 **Fernando Luiz Sacomano Filho, Usuário Externo**, em 23/02/2023, às 16:50, 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 **Tobias Bernward Bleninger, Usuário Externo**, em 23/02/2023, às 16:50, 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 **Aldemir Aparecido Cavalini Junior, Professor(a) do Magistério Superior**, em 23/02/2023, às 16:51, 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 **Aristeu da Silveira Neto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 23/02/2023, às 16:53, 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, informando o código verificador **4274030** e o código CRC **5B6F2124**.

*A minha esposa Izabela, pelo
companherismo e carinho!*

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por estar sempre presente em minha vida e por iluminar o meu caminho e me abençoar com realizações diárias. Agradeço a minha família, em especial a minhas esposa, aos meus pais e aos meus irmãos pelo amor incondicional e pelo apoio constante em todas as etapas da minha vida.

Agradeço também ao meu orientador, pela paciência, dedicação e confiança depositada em mim. Agradeço também à instituição de ensino, ao corpo docente por toda a base teórica e assistência fornecida e aos meus amigos do MFLab agradeço pela amizade, apoio, colaboração, ensinamentos, incentivo e pela cumplicidade. A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), sem a qual não seria possível a realização deste trabalho. E a Petrobras por me proporcionar a oportunidade do tema de pesquisa.

Agradeço, por fim, à todas as pessoas que fazem parte da minha vida e que, de alguma forma, contribuíram para a realização desta tese.

Barbosa, Paulo Costa Porto de Figueiredo. **Modelagem matemático-numérico-computacional do transporte e deposição de sólidos em processos de perfuração em águas profundas.** 2023. 61 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2023. <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2023.95>

RESUMO

A dinâmica de fluidos computacionais (CFD) é uma ferramenta importante para entender e analisar escoamentos multifásicos, que são comumente encontrados em processos industriais como na produção e transporte de óleo e gás, na indústria química e na análise de sistemas ambientais. Através de CFD, é possível criar modelos computacionais complexos que descrevem o escoamento de fluidos para prever o comportamento de processos físicos reais, e em alguns casos as simulações computacionais são mais viáveis que experimentos materiais. Numericamente, para escoamentos gás-sólido, é comum que as partículas sejam tratadas em um referencial lagrangiano, enquanto o fluido em um referencial euleriano. Assim, no contexto do projeto de P&D "Estudo de Dispersão de plumas de material descartado em operações *offshore*", financiado pela Petrobras, esta tese tem como objetivo o desenvolvimento computacional de uma modelagem para escoamentos multifásicos com partículas sólidas para simulação computacional das primeiras fases da perfuração de poços de petróleo. Nestas fases o fluido de perfuração e fragmentos de rocha são descartados no assoalho oceânico, causando danos a organismos bentônicos. Nessa tese propõe-se uma investigação a respeito da dinâmica dos detritos formados durante a primeira fase do processo de perfuração de poços de petróleo, levando em consideração as condições de escoamento, a interação entre as partículas e a dispersão do material descartado. A modelagem proposta será importante para entender e prever o comportamento dos escoamentos multifásicos, ajudando a desenvolver novos processos e produtos mais eficientes e sustentáveis.

Palavras-chave: DEM, CFD, MFSim, Petrobras

Barbosa, Paulo Costa Porto de Figueiredo. **Mathematical-numerical-computational modeling of the transport and deposition of solids in deep-water drilling processes**. 2023. 121 p. Thesis (PhD in Mechanical Engineering) - Federal University of Uberlândia, Uberlândia, 2023. <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2023.95>

ABSTRACT

Computational fluid dynamics (CFD) is an important tool for understanding and analyzing multi-phase flows, which are commonly found in industrial processes such as oil and gas production, the chemical industry, and environmental system analysis. Through CFD, it is possible to create complex computational models that describe fluid flow to predict the behavior of real physical processes, and in some cases, computational simulations are more feasible than material experiments. Numerically, for gas-solid flows, it is common the particles be treated in a Lagrangian frame of reference while the fluid in an Eulerian frame of reference. In the context of the project "Study of Dispersion of Discarded Material Plumes in Offshore Operations", funded by Petrobras, this thesis aims at the computational development of a multi-phase flow modeling with solid particles (DEM) for computational simulation of the first stages of oil well drilling. In these stages, the drilling fluid and rock fragments are discarded on the ocean floor, causing damage to benthic organisms. This thesis proposes an investigation into the dynamics of the debris formed during the first phase of the oil well drilling process, taking into account the flow conditions, the interaction between the particles, and the dispersion of the discarded material. The proposed modeling will be important for understanding and predicting the behavior of multi-phase flows, helping to develop more efficient and sustainable processes and products.

Keywords: DEM, CFD, MFSim, Petrobras

LISTA DE FIGURAS

3.1	Comportamento dinâmico das partículas com diferentes número de Stokes. Fonte: Adaptado de Crowe, Troutt e Chung (1995).	22
3.2	Tipos de escoamento em relação à fração volumétrica. Fonte: Adaptado de Sommerfeld (2017).	23
3.3	Tipos de Acoplamento entre as fases contínua e discreta.	24
4.1	Representação esquemática do momento em que acontece o contato entre duas partículas. Fonte: Santos (2019).	33
4.2	Contato partícula-partícula típico do modelo de esfera flexível DEM. Fonte: Adaptado de (GOLSHAN et al., 2022).	35
5.1	Exemplo de malha composta com três níveis de refinamento. Fonte: Santos (2019).	40
5.2	Representação esquemática do cálculo das propriedades de células fantasmas: (a) extrapolação cúbica utilizando as propriedades das células do próprio bloco da malha mais fina, (b) interpolação cúbica utilizando as propriedades da malha mais fina para as células do nível abaixo que estão no contorno do bloco da malha mais fina, (c) interpolação quadrática entre as propriedades das células da malha mais fina e da malha logo abaixo e (d) para o preenchimento das células fantasmas entre blocos do mesmo nível de malha, basta que as propriedades sejam transferidas da célula real para a célula fantasma. Fonte: Lima (2012). . .	41
5.3	Representação de uma pá de turbina eólica através do IBM: (a) vista lateral da fronteira imersa e (b) fronteira imersa aplicada em um domínio euleriano multinível. Fonte: Adaptado de Stival (2022).	43
5.4	Ilustração das sub-iterações do passo de tempo lagrangiano. Fonte: Santos (2019).	45
5.5	Algoritmo de inicialização do módulo DPM mostrando a sua integração com o domínio euleriano. Fonte: Santos (2019).	48

5.6	Algoritmo do processo iterativo lagrangiano. Fonte: Santos (2019).	49
5.7	Algoritmo para o cálculo das forças de contato.	50
5.8	Algoritmo do transporte de partículas para o DEM.	51
5.9	Algoritmo do transporte de partículas Adaptativo.	53
6.1	Comparação entre os modelos DPM com acoplamento 1-via, DPM com acoplamento 4-vias e DEM.	55
6.2	Comparação entre o modelo DEM com partículas de diâmetro fixo e variável.	56
6.3	Experimento numérico de deposição de partículas.	57
6.4	Resultado obtido pelo MFSim para a simulação do caso de validação.	58
6.5	Comparação do resultados obtidos pelo MFSim com resultados da literatura.	58
6.6	Descarte de partículas em um domínio quadrado utilizando modelo adaptativo. As partículas em vermelho estão sendo resolvidas com modelo DEM enquanto as partículas azuis são resolvidas com modelo DPM-1V	59
7.1	Divisão de classes através de um hiperplano - SVM.	62
7.2	Regressão linear através de um hiperplano - SVR.	64
7.3	Regressão linear através de um hiperplano com variáveis de folga - SVR.	65
7.4	Regressão polinomial - SVR. Fonte: Awad et al. (2015)	67
7.5	Redes Neurais Artificiais e seus cálculos lógicos. Fonte: Géron (2021).	67
7.6	Representação de um LTU. Fonte: Géron (2021)	68
7.7	Diagrama de um Perceptron Multicamadas. Fonte: Géron (2021).	69
7.8	Funções de ativação. Fonte: Feng et al. (2019).	70
7.9	Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção x obtidos pelo DEM e pelo SVR.	72
7.10	Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção y obtidos pelo DEM e pelo SVR.	72
7.11	Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção x obtidos pelo DEM e pelo MLP.	73
7.12	Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção y obtidos pelo DEM e pelo MLP.	73
7.13	Algoritmo do transporte de partículas para os modelos de ML.	75

8.1	Esquema das fase sem riser e fase com riser da perfuração de poços de petróleo. Fonte: Hinwood et al. (1994).	77
8.2	Domínio computacional usado nas simulações para o poço de Búzios.	78
8.3	Domínio computacional usado nas simulações para o poço de Marlim.	79
8.4	Representação gráfica da posição das condições de contorno.	80
8.5	Panorama da dispersão de cascalho. (a) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s e formulação 2-vias, (b) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s e formulação 4-vias.	82
8.6	Panorama da dispersão de cascalho. (a) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,06$ m/s e formulação 4-vias, (b) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s e formulação 4-vias.	83
8.7	Panorama da dispersão de cascalho. (a) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s e formulação 2-vias, (b) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s, formulação 2-vias e com uma fronteira imersa girando a uma velocidade de 100 rpm.	84
8.8	Evolução temporal da simulação de dispersão de cascalho com velocidade de corrente marítima $V_e = 0,06$ m/s.	86
8.9	Evolução temporal da simulação de dispersão de cascalho com velocidade de corrente marítima $V_e = 0,16$ m/s.	87
8.10	Panorama da dispersão de cascalho ao final da simulação usado formulação DEM e velocidade de corrente marítima $V_e = 0,06$ m/s.	88
8.11	Panorama da dispersão de cascalho ao final da simulação usado formulação DEM e velocidade de corrente marítima $V_e = 0,16$ m/s.	88
8.12	Ajuste da curva da altura de deposição de descartes para o poço de Búzios.	89
8.13	Ajuste da curva da altura de deposição de descartes para o poço de Marlim.	89
8.14	Extrapolação temporal da altura de deposição de descartes para o poço de Búzios.	90
8.15	Extrapolação temporal da altura de deposição de descartes para o poço de Marlim.	90
8.16	Panorama da dispersão de cascalho máximo para 36 h de perfuração para Búzios.	91
8.17	Panorama da dispersão de cascalho mínimo para 36 h de perfuração para Búzios.	91
8.18	Panorama da dispersão de cascalho máximo para 36 h de perfuração para Marlim.	92
8.19	Panorama da dispersão de cascalho mínimo para 36 h de perfuração para Marlim.	92

LISTA DE TABELAS

3.1	Processos industriais que envolvem escoamentos multifásicos.	17
4.1	Equação para advecção de partículas em função das diferentes modelagens. . .	30
4.2	Parâmetros Efetivos.	37
6.1	Parâmetros da simulação de validação do modelo de colisão entre partículas. . .	57
7.1	Métricas de erro para o modelo MLP	74
8.1	Propriedades do fluido de perfuração e do cascalho	80

LISTA DE SÍMBOLOS

- α_c - Fração volumétrica da fase contínua
 α_d - Fração mássica
 δ_{ij} - Delta de Kronecker
 δ^n - *overlap* entre partículas
 ϵ - Potência específica de transformação viscosa
 η - Coeficiente de amortecimento
 μ - Viscosidade do fluido
 μ_d - coeficiente de fricção dinâmico
 μ_t - Viscosidade dinâmica turbulenta
 ϕ - Função de ativação
 ρ - Massa específica do fluido
 ρ_p - Massa específica da partícula
 τ_c - Tempo médio entre colisões de partículas
 τ_f - Tempo de resposta do fluido
 τ_p - Tempo de resposta da partícula
 τ_t - Escala de tempo integral da turbulência

 Δt_{adv} - Passo de tempo advectivo
 Δt_E - Passo de tempo euleriano
 Δx - Tamanho do elemento da malha na direção x
 Δy - Tamanho do elemento da malha na direção y
 Δz - Tamanho do elemento da malha na direção z
 Ω - Velocidade angular da partícula

 b - Bias
 dp - Diâmetro da partícula
 dt passo de tempo
 e - coeficiente de restituição
 f_{BW} - Combinação da força peso e empuxo
 f_D - Força de arrasto

f_i - Campo de forças externas

$f_{C_i}^n$ - Força de contato normal entre partículas

$f_{C_i}^t$ - Força de contato tangencial entre partículas

f_M - Força de sustentação devido a rotação (Magnus)

f_S - Força de sustentação devido ao escoamento não uniforme (Saffman)

$\vec{f}_{u,p}$ Termo de acoplamento entre fases

g - aceleração gravitacional

k - Energia cinética turbulenta

K - Rigidez

l - Comprimento característico do escoamento

M - Vetor dos momentos atuante na partícula.

m_p - Massa da partícula

n - Vetor normal de contato

p - Campo de pressão

$t_{V,C}$ - Tempo requerido para uma partícula atravessar um volume de controle

u - Velocidade do fluido

$|u|_{máx}$ - componentes de velocidade máximo absoluto na direção x

u_p - Velocidade da partícula

$|v|_{máx}$ - componentes de velocidade máximo absoluto na direção y

v_r - velocidade relativa entre partículas

$|w|_{máx}$ - componentes de velocidade máximo absoluto na direção z

x - direção coordenada x

x_p - Posição da partícula no espaço

y - direção coordenada y

z - direção coordenada z

C_d - Coeficiente de arrasto

C_{CFL} - Condição CFL

F_a - Vetor de forças aplicadas na partícula

G - Módulo de cisalhamento

I - Inércia

N_p - Número de partículas

R - Raio da partícula

Re_p - Reynolds da partícula

Re_r - Reynolds de rotação

St - Número de Stokes

T_i - Torque atuante na partícula

T_L - Escala de tempo integral da turbulência Lagrangiana

$T_{C_i}^r$ momento de rolamento devido ao contato entre partículas

$T_{C_i}^t$ - momentos de atrito tangencial

U_∞ - Velocidade da corrente livre

V_c - Volume da fase contínua

V_d - Massa da fase dispersa

V_m - volume total do sistema

$V_{V,C}$ - Volume do volume de controle

V_{p_n} - Volume de uma partícula

Y - Módulo de Elasticidade

\mathbf{b}_{MLP} Vetor de viés

\mathbf{w} - Vetor de peso

\mathbf{W} - Matriz de pesos de conexão

\mathbf{X} - Matriz de entradas

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	xi
LISTA DE TABELAS	xii
LISTA DE SÍMBOLOS	xiii
CÁPITULO I - Introdução	1
1.1 Motivação pelo Tema	3
1.2 Metodologia	4
1.3 Estrutura da Tese	4
CÁPITULO II - Revisão Bibliográfica	6
2.1 Escoamentos Multifásicos com Partículas Sólidas	6
2.2 Modelo Numérico para Advecção de Partículas em Escoamentos Multifásicos .	8
2.3 Transporte e Deposição de sólidos em processo de perfuração	9
2.4 Uso de <i>Machine Learning</i> em simulações CFD	11
2.5 Plataforma Computacional MFSim	15
CÁPITULO III - Conceitos Básicos	17
3.1 Abordagens numéricas para escoamentos multifásicos	18
3.1.1 Abordagens numéricas aplicadas a fase contínua	18
3.1.2 Abordagens numéricas aplicadas a fase dispersa	19
3.2 Parâmetros-chave da fase dispersa	20
3.2.1 Número de Stokes	21
3.2.2 Fração Volumétrica	22
3.3 Acoplamento entre fases	23
CÁPITULO IV - Modelo Matemático para transporte de Partículas	25

4.1	Modelo matemático para a fase contínua	26
4.1.1	Formulação para a fluidodinâmica	26
4.1.2	Metodologia para modelagem da turbulência LES	28
4.2	Modelo matemático para a fase dispersa	29
4.2.1	Modelo de esfera rígida	32
4.2.2	Modelo de esfera flexível	33
4.3	Termo de acoplamento entre as fases	38
CÁPITULO V - Modelo Computacional		39
5.1	Discretização espacial e temporal	39
5.2	Acoplamento pressão-velocidade	39
5.3	Malha bloco-estruturada	40
5.4	Passo de tempo euleriano	41
5.5	Método da fronteira imersa	42
5.5.1	Modulo DPM	43
5.5.2	Integração temporal das equações de balanço	44
5.5.3	Passo de tempo lagrangiano	45
5.5.4	Condições de contorno do domínio lagrangiano	46
5.5.5	Algoritmo de colisão	46
5.5.6	Estrutura de dados	47
5.6	Implementação do modelo DEM ao MFSim	48
CÁPITULO VI - Validação do modelo de colisão		54
CÁPITULO VII - Modelos de Machine Learning		60
7.1	Modelo SVM aplicado a simulações multifásicas	61
7.2	Modelo MLP aplicado a simulações multifásicas	66
7.2.1	Resultado dos modelos ML em comparação com o modelo DEM	71
CÁPITULO VIII - Estudo da dispersão de cascalhos descartados em fase de perfuração sem retorno		76
8.1	Modelo computacional	78
8.2	Simulações com a formulação DPM e acoplamento 2-vias e 4-vias	80

8.3	Simulações com a formulação DEM	85
8.3.1	Extrapolação temporal do descarte de cascalho	85
CÁPITULO IX - Conclusões		93
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		95

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Escoamentos multifásicos dispersos são comuns em muitos processos industriais e naturais, envolvendo o transporte de diferentes fases fluidas, como líquidos, gases e sólidos, em um meio contínuo. Esses escoamentos são complexos e desafiadores devido à interação entre as diferentes fases e suas características dinâmicas. Sendo a fase preponderante chamada de fase contínua e as demais chamadas de fase dispersa (SCHWARZKOPF et al., 2011). Esse tipo de escoamento é comumente visto em uma variedade de aplicações como em tubulações, trocadores térmicos, reatores químicos, leitos fluidizados e descarte de rejeitos.

Em um escoamento multifásico disperso, as fases podem interagir entre si e com as paredes às quais estão confinadas. A complexidade deste tipo de escoamento pode variar dependendo dos fenômenos físicos associados aos mesmos, como turbulência, evaporação, colisão, erosão e combustão (BRENNEN; BRENNEN, 2005).

Poder analisar e compreender escoamentos multifásicos dispersos em aplicações práticas, como em projetos para produção e transporte de óleo e gás, indústria química e na análise de sistemas ambientais é de grande importância para o desenvolvimento de novos produtos e processos mais eficientes e sustentáveis. Uma poderosa ferramenta para entendimento do comportamento de escoamentos multifásicos é a dinâmica dos fluidos computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamic*).

A dinâmica de fluidos computacional é um ramo da engenharia que possibilita a criação de modelos matemáticos, compostos por equações matemáticas complexas e descreve o escoamento dos fluidos para prever o comportamento de processos físicos reais. As simulações computacionais são em alguns casos mais viáveis que experimentos materiais uma vez que per-

mitem testar diferentes condições de operação, diversos valores para as variáveis de interesse e também avaliar diferentes modificações dos sistemas industriais visando a redução de custos e o aumento de eficiência desses sistemas com maior praticidade, de maneira mais rápida e menos onerosa.

Neste contexto, a presente tese tem como objetivo principal, o estudo e desenvolvimento de modelagem numérico-computacional de escoamentos multifásicos com partículas sólidas. Esse tipo de escoamento é comumente encontrado em processos industriais de manuseio e processamento de materiais granulares em indústrias de mineração, construção, agricultura, farmacêutica e química, bem como a movimentação de particulados em caldeiras e fornos industriais. Outra aplicação industrial comum deste tipo de escoamento são os leitos fluidizados pois, segundo Michaelides, Crowe e Schwarzkopf (2016), possuem vantagens sobre os demais tipos de reatores como, boa transferência de energia térmica e massa, alta eficiência de mistura e capacidade de lidar com uma ampla gama de tamanhos e formas de partículas.

Em escoamentos multifásicos com grande fração volumétrica de partículas (*particle laden flows*) a fase discreta pode ter grande influência no comportamento do fluido. A presença de partículas pode alterar significativamente os padrões de escoamento devido a transferência de quantidade de movimento linear entre fases. Além disso as partículas podem colidir e interagir entre si.

Numericamente, para escoamentos gás-sólido, é comum as partículas serem tratadas em um referencial lagrangiano, enquanto o fluido em um referencial euleriano. Existem duas abordagens para modelar a estrutura lagrangiana: o método de fronteira imersa (*Immersed Boundary Method* - IBM) e a aproximação ponto-partícula. Essas abordagens variam em termos de complexidade, precisão e potencial de resolução. Com o método IBM resolve-se o campo do escoamento ao redor de cada partícula, mas tem limitações devido ao tamanho da malha e é computacionalmente caro. Com a abordagem ponto-partícula modelam-se as partículas como pontos materiais que são rastreados pelo campo de escoamento previamente resolvido. Essa abordagem é mais barata computacionalmente e não tem limitações físicas. A abordagem ponto-partícula pode ser classificada em três categorias: LPC (parcela lagrangiana), DPM (método da partícula discreta) e DEM (método de elementos discretos). LPC considera as partículas como parcelas que representam um número de partículas reais. DPM rastreia todas as partículas reais do sistema. Já o DEM permite modelar colisões não-instantâneas e o contato prolongado entre partículas.

Nesse sentido, o Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFlab) da Universidade Federal de Uberlândia vem desenvolvendo ao longo da última década a plataforma computacional MFSim em parceria com a PETROBRAS. O MFSim surgiu com o trabalho de Villar et al. (2007) sobre escoamentos multifásicos, e vem sendo aprimorado desde então. Com esta ferramenta, atualmente é possível simular problemas complexos de escoamentos turbulentos multifásicos tridimensionais através das metodologias LES (*Large Eddy Simulation*) ou URANS (*Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes*) com processamento paralelo, utilizando como discretização o Método dos Volumes Finitos com malha bloco estruturada e refinamento adaptativo dinâmico baseado em gradientes de propriedades. A plataforma permite ainda que o acoplamento entre fases seja feito de maneira euleriana-euleriana ou euleriana-lagrangiana, além de usar o *Multi-Direct Forcing* como método de fronteira imersa.

Um modelo numérico-computacional para o transporte lagrangiano de partículas presentes em escoamentos turbulentos multifásicos dispersos foi implementado e validado ao MFSim por Santos (2019). Para isso foi incorporado à esta plataforma computacional: forças atuantes no transporte das partículas; condições de contorno para partículas; acoplamento entre as fases do escoamento, levando em consideração a interação entre fluido e partículas; modelos de colisão partícula-partícula (DPM); interação entre partícula e fronteira imersa, utilizando um algoritmo de detecção e um modelo de colisão partícula-parede; além de um modelo de dispersão turbulenta para as partículas.

1.1 Motivação pelo Tema

Este trabalho foi desenvolvido no contexto do projeto de P&D Estudo de Dispersão de plumas de material descartado em operações *offshore* (5850.0107023.18.9), realizado pela ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis) em parceria com a Universidade Federal de Uberlândia e com o financiamento da Petrobras.

O intuito desta parceria é a simulação computacional de algumas fases da perfuração de poços de petróleo. Entre elas está o processo inicial de perfuração de poços de petróleo, dito primeira e segunda fase, onde é descartado fluido de perfuração e fragmentos de rocha, que se depositam no assoalho oceânico, implicando na exposição de organismos bentônicos a agentes estressores de ordem química e física. Um dos fatores preponderantes no cerne da tese proposta é a análise da área degradada pelo descarte de partículas de cascalho no leito oceânico através

de estudos de experimentos computacionais.

1.2 Metodologia

Apesar de todas as funcionalidades implementadas por Santos (2019) o método DPM não é capaz de reproduzir o empilhamento de partículas, uma dinâmica essencial para tais simulações. Com o intuito de contribuir com as pesquisas na área, este trabalho se justifica no sentido de ampliar a compreensão sobre escoamentos bifásicos com particulado e busca avaliar a dinâmica de escoamentos densos ao abordar a construção de um modelo matemático-computacional usando a formulação DEM de acordo com modelos disponíveis na literatura.

De forma geral, o trabalho agrega grande importância prática por oferecer uma perspectiva ampla sobre as primeiras fases da perfuração de poços de petróleo em águas profundas. As simulações computacionais, nesse caso em específico, são de grande importância para compreensão do que ocorrem em águas profundas, uma vez que é uma área de difícil exploração.

Nesta tese de doutorado, destaca-se ainda a implementação de uma rotina adaptativa entre os modelos de esfera rígida e esfera flexível, também conhecidos como DPM e DEM, respectivamente, utilizados de acordo com a fração volumétrica de sólidos nas células computacionais. Tal rotina tem o intuito de redução do custo computacional sem a perda de informações. Todas as implementações feitas ao MFsim foram testadas e validadas em comparação à resultados computacionais e experimentais estabelecidos na literatura.

Outra abordagem discutida nesta tese para redução do custo computacional foi o uso de ML (*Machine Learning*) com modelos de Máquina de vetores de suporte (*Support Vector Machine*) e Rede Neural (*Neural Network*) em substituição ao DEM. O ML e a ciência de dados são áreas muito populares nos dias de hoje e estão em constante ascensão, suas técnicas são aplicadas em diversos seguimentos industriais juntamente com os avanços dos dispositivos inteligentes de sensoriamento e da internet das coisas (IoT - *Internet of Things*).

1.3 Estrutura da Tese

Esta tese é composta por nove capítulos, além da introdução, será apresentado o estado da arte em relação ao tema no capítulo de revisão bibliográfica e os conceitos necessários para o entendimento da tese são apresentados em conceitos básicos. Todo o equacionamento e métodos utilizados na formulação matemática, já a estrutura numérico-computacional serão descritos na

seção de modelagem numérica. O capítulo de validação do modelo de colisão compara os resultados do DEM em relação a resultados da literatura e o capítulo de *machine learning* utiliza os dados da simulação de validação para criar um modelo usando inteligência artificial (IA). Na seção de resultados são mostrados resultados obtidos com a formulação DPM e acoplamento 2-vias, essenciais para uma melhor compreensão do problema analisado, comparação de resultados entre a formulação DPM com acoplamento 2-vias e 4-vias, e ainda, simulações com a formulação DEM e extrapolação dos resultados obtidos avaliando uma perfuração de poços com duração de 36 horas. Por fim serão realizadas algumas considerações finais no capítulo de conclusões.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 escoamentos Multifásicos com Partículas Sólidas

São encontrados na literatura diversos artigos científicos a respeito de escoamentos multifásicos particulados, baseadas tanto em experimentação material como em simulações computacionais. Isso deve ao fato de este tipo de problema apresentar uma diversa gama de proposta de soluções e simplificações devido sua complexidade.

No caso dos estudos envolvendo experimentos materiais, geralmente, o foco principal é o estudo do comportamento do escoamento e como ele é afetado pela presença das partículas nele contidas. Isso pode ser observado nos trabalhos de Lee e Durst (1982), Tsuji e Morikawa (1982), Tsuji, Morikawa e Shiomi (1984), Varaksin, Polezhaev e Polyakov (1998, 2000), Kussin e Sommerfeld (2002).

Os estudos computacionais estão comumente relacionados com a modelagem do problema, análises computacionais dos resultados obtidos e validação das rotinas implementadas com relação a resultados experimentais. Ottjes (1978) simulou computacionalmente, a partir de um modelo bidimensional, 200 partículas sendo transportadas em uma duto ao longo de 5 m. Uma avaliação da queda de pressão devido à diferentes curvas de dutos em escoamentos gás-sólido foi realizada por Morikawa et al. (1978). Tsuji et al. (1987) determinou, a partir de uma simulação computacional, o movimento das partículas e do fluido em um canal retangular horizontal bidimensional, no qual considerou-se um acoplamento de 2 vias entre as fases e a colisão das partículas com a parede.

Um modelo para considerar a interação partícula-parede assumindo partículas não esféricas

foi introduzido por Tsuji, Shen e Morikawa (1989). Os efeitos das colisões entre partículas em um escoamento gás-sólido, no interior de um duto vertical, utilizando uma modelagem determinística, foram estudados por Tanaka (1991).

Sommerfeld (1992) mostrou que a rugosidade da parede de um canal afeta intensamente no movimento das partículas sólidas presentes no escoamento. Uma abordagem estocástica para modelar a colisão de partículas foi aplicada na simulação computacional de um escoamento gás-sólido de um canal retangular por Sommerfeld e Zivkovic (1992), e de um canal circular por Oesterle e Petitjean (1993), sendo essa uma abordagem bastante eficiente computacionalmente. Em ambos os trabalhos é deixado evidente que mesmo com baixa concentração de partículas é imprescindível considerar os efeitos de colisão entre as mesmas.

Laín e Sommerfeld (2012) avaliaram as diferenças nas propriedades de um canal retangular e de um canal circular, observando a influência da rugosidade da parede e o grau de acoplamento entre as fases em escoamentos de 2 vias e 4 vias. Os mesmo autores Laín e Sommerfeld (2013) buscaram mostrar a capacidade da abordagem euleriana-lagrangiana em prever sistemas de transporte pneumático mais complexos. Tal trabalho lida com o transporte de partículas em uma duto horizontal de 8 m, seguida de uma curva de 90 graus, e um duto vertical de 5 m, variando parâmetros como carregamento mássico, rugosidade da parede, e grau de acoplamento das fases.

Em geral, a combinação de modelos computacionais e experimentos materiais é uma abordagem poderosa para a compreensão de sistemas complexos e a resolução de problemas relacionados à engenharia e ciência. Trabalho com experimentos materiais, fornecem informações importantes sobre o comportamento real do sistema e podem ser usados para aprimorar e ajustar modelos computacionais. Já a simulação computacionais oferece muitos benefícios, como economia de tempo e custo, pois as simulações computacionais permitem testar diferentes cenários e soluções sem a necessidade de realizar experimentos materiais que pode ser caros e demorados. Modelos computacionais nos possibilitam, também, realizar simulações praticamente impossíveis em uma situação real.

Nesse sentido nesta tese usaram-se dados da literatura para validação de um modelo computacional que possa simular o comportamento da pluma de cascalho gerada em uma perfuração de poço em águas profundas. Um cenário onde a obtenção de dados experimentais é dificultada pela própria característica do sistema.

2.2 Modelo Numérico para Adveção de Partículas em Escoamentos Multifásicos

Para simulações multifásicas euler-lagrange foi inicialmente implementado ao MFSim o Modelo de Partículas Discretas (DPM), que é um modelo mais simples de se implementar e de menor custo computacional, porém está limitado à aplicações onde há apenas colisões binárias e a fase particulada é dispersa (SCHWARZKOPF et al., 2011). Devido às características da simulação proposta no termo de cooperação juntamente com a Petrobras, como por exemplo a alta frequência de colisão entre partículas, foi incorporada ao MFSim uma rotina com o modelos de esfera flexível, também conhecidos como DEM (Modelo dos Elementos Discretos).

O método dos elementos discretos (DEM) foi proposto por Cundall e Strack (1979) ele é capaz de simular o comportamento dinâmico de discos e esferas, permitindo uma melhor compreensão das interações entre as mesmas. O método baseia-se no uso de uma rotina numérica explícita no qual a interação das partículas é feita por contato do tipo Hertziano para forças normais e as forças tangenciais são consideradas de acordo com as teorias de Mindlin. No artigo os resultados experimentais obtidos por análise fotoelástica disponíveis na literatura foram utilizados para validação da metodologia proposta. Cundall e Strack (1979) ainda afirmam que o intervalo de tempo deva ser o menor possível, para que as forças atuantes na partícula sejam determinadas exclusivamente por sua interação com os seus vizinhos imediatos com os quais está em contato.

Devido aos bons resultados obtidos com esta abordagem, muitos pesquisadores optam pela utilização da mesma. O principal uso se destina a casos de simulações de leite fluidizado Zhong et al. (2006), Tsuji, Yabumoto e Tanaka (2008), Oevermann, Gerber e Behrendt (2009), Fries et al. (2011), Stroh et al. (2019), Okhovat-Alavian et al. (2019), Oliveira, Wuc e Nandakumar (2020). A precisão das simulações utilizando o DEM é sensível aos parâmetros relacionados às partículas como rigidez de contato, coesão, coeficientes de atrito e coeficientes de restituição. Em seu trabalho, (SYED; TEKESTE; WHITE, 2017) desenvolveram e validaram uma metodologia de calibração robusta para os atrito de deslizamento e rolamento combinados. O trabalho de (COETZEE, 2017) traz uma revisão detalhada de artigos publicados nos últimos 25 anos que tratam da calibração de parâmetro ligados ao DEM. Ai et al. (2011) citam que vários estudos computacionais e experimentais da literatura utilizam um torque para representar a resistência ao rolamento e atrito, além disso propõem também um modelo generalizado com base em uma revisão de modelos mais utilizados em simulações computacionais.

Mezhericher, Brosh e Levy (2011) mostraram resultados da modelagem computacional de transporte pneumático de partículas em dutos horizontais, comparando os modelos DPM e DEM, em regimes diluídos e densos. Mezhericher, Brosh e Levy (2011) ainda concluíram que as vantagens do DPM são cálculos rápidos e de menor uso dos recursos computacionais devido à possibilidade de um maior intervalo de tempo. Entretanto, é mostrado também que o uso do DPM é mais apropriado para modelagem de regimes diluídos, enquanto a abordagem DEM pode ser utilizada na simulação de ambos os regimes.

Vistas as vantagens de cada método e com intuito de diminuição do custo computacional, diferentemente de (KLOSS et al., 2009) quem usam o DPM e o DEM em uma mesma simulação através da posição espacial no domínio computacional, nesta tese foi desenvolvida uma rotina adaptativa entre os modelos de esfera rígida e esfera flexível utilizados de acordo com a fração volumétrica de sólidos nas células computacionais. Neste modelo adaptativo, uma região com grande concentração de partículas (escoamento com contato) é resolvida usando o modelo DEM, enquanto que em regiões com menor número de partículas o modelo DPM é aplicado. Dessa forma a simulação agrega as características positivas de ambos os métodos com menor custo computacional. O critério usado para adaptatividade é a fração volumétrica de partículas, segundo (NOROUZI et al., 2016) o escoamento pode ser classificado em denso ou diluído. Em um escoamento diluído o movimento das partículas é afetado basicamente pelo movimento do fluido, já para um escoamento muito denso a interação partícula-partícula se torna preponderante.

2.3 Transporte e Deposição de sólidos em processo de perfuração

Para avaliar os resultados obtidos em simulações computacionais da perfuração de poços de petróleo considerando-se a utilização do modelo adaptativo DEM, a tese se baseará em uma gama de estudos já difundidos na literatura, dentre estes estudos cita-se o proposto por Smit et al. (2008), que estima os limites mínimos de espessura de detritos para os quais são identificados efeitos nocivos em diversos grupos e espécies de organismos bentônicos. Neste trabalho são considerados quatro efeitos críticos para análise: mortalidade, redução do crescimento da espécie, redução do assentamento larval e mudanças na composição faunística.

Durgut et al. (2015) também afirma que os descartes gerados pelas perfurações de poços de petróleo causam riscos às comunidades bentônicas. Os autores destacam que os impac-

tos ambientais causados se devem principalmente à depleção de oxigênio (como resultado da biodegradação), toxicidade dos produtos químicos utilizados nos fluidos de perfuração e o potencial de soterramento de organismos durante a deposição, além de alteração das características originais dos sedimentos.

Santos (2012) traz uma reflexão acerca da perfuração de petróleo e seus impactos ambientais na sociedade atual através de uma análise teórica, baseando-se na revisão das obras, artigos e periódicos que tratam do tema, com ênfase em bancos de dados digitais.

A APPEA (*Australian Petroleum Production and Exploration Association*) afirma que os impactos ambientais associados à atividade de perfuração em poços marítimos são mínimos, mas em algumas circunstâncias podem ocorrer impactos localizados e de curto prazo. O tempo de recuperação destas zonas varia de acordo com o volume descarregado, as condições oceanográficas locais, a biodegradabilidade do fluido base usado e o tratamento antes do descarte. A APPEA desenvolveu então um manual de boas práticas para o gerenciamento ambiental de fluidos de perfuração e do cascalho gerados como meio de garantir que o descarte dos mesmos esteja dentro de limites ambientais aceitáveis.

Segundo Filho (2012) os principais impactos que ocorrem num raio de 500 metros da plataforma são: o recobrimento do assoalho oceânico, a alteração da granulometria dos sedimentos adjacentes ao poço e efeitos diretos sobre organismos bentônicos, pelágicos, como alterações comportamentais, perda de habitat ou mesmo soterramento. Em seu trabalho afirma ainda que para preservação do meio ambiente marinho e diminuição dos impactos é indispensável o monitoramento ambiental da fase de perfuração *offshore*. Devido à sua natureza, as diferentes fases de exploração e perfuração *offshore* possuem singularidades em relação aos riscos que apresentam ao meio ambiente marinho, e não é por acaso que para cada uma delas em geral as companhias petrolíferas elaboram um projeto de monitoramento específico.

Sanzone, Vinhaeiro e Neff (2018) mostram uma visão geral dos efeitos ambientais e biológicos causados para diferentes condições de descarte de fluido de perfuração e partículas de cascalho. A maioria das partículas que são lançadas no oceano se depositam e se acumulam no fundo do mar. A área e a espessura da deposição no fundo do mar dependem do tipo de rocha perfurada, da quantidade de fluido absorvido nas partículas, da distribuição de tamanho das partículas, da profundidade e da velocidade e direção da corrente marítima no local de descarte. Partículas de cascalho maiores sedimentam mais rapidamente e podem se acumular mais perto do ponto de descarte. Sanzone, Vinhaeiro e Neff (2018) ainda concluem que, como regra geral, os efeitos

causados pelo descarte de fluidos de perfuração com base de água e cascalho estão relacionados à massa total de sólidos de perfuração descarregados e à energia cinética relativa do jato de fluido de perfuração, ocasionando danos à vida marinha apenas no local de descarte.

Com relação à distância em que a vida marinha é afetada pelo processo de perfuração de poços de petróleo, Mariano (2007) afirma que os efeitos das lamas de perfuração de base água e de seus respectivos cascalhos são temporários na natureza.

Por fim, Veiga (2010) propõe um modelo de avaliação de risco ecológico para os descartes da atividade de perfuração usando dados medidos em campo. Este artigo afirma, com base em estudos de revisão da literatura, que as comunidades bentônicas são sensíveis ao efeito de soterramento, estimando o valor limite de espessura de deposição para que efeitos danosos significativos não sejam observados em organismos da microfauna e da macrofauna.

Como visto nas referências citadas acima, o principal fator de impacto ambiental causado pelas primeiras fases de perfuração é o soterramento das comunidades bentônicas próximas a estas áreas e será usado nesta tese como principal parâmetro para avaliação do dano ambiental causado pela pluma de descartes.

2.4 Uso de *Machine Learning* em simulações CFD

O aprendizado de máquina tem um grande potencial e tem sido cada vez mais aplicado no campo da dinâmica de fluidos computacional (CFD) nos últimos anos. As técnicas de ML têm sido usadas em diversas aplicações como, por exemplo, para desenvolver modelos de fechamento, realizar simulações de partículas em escoamentos multifásicos, prever padrões de escoamentos bifásico e realizar modelagem de turbulência desenvolvendo modelos cada vez mais robustos e generalizáveis. Os artigos apresentados a seguir serviram como base para desenvolvimentos realizados no capítulo de modelos de machine learning.

O artigo de Zhao et al. (2020) apresenta uma nova estrutura de aprendizado de máquina orientada através de simulações CFD para desenvolver modelos RANS. Para demonstrar o potencial deste novo método, esta nova abordagem é aplicada ao desenvolvimento de modelos de mistura para esteiras em turbomáquinas. Embora o modelo treinado no presente estudo seja limitado à mistura de esteiras, o aprendizado de máquina orientado por CFD mostra-se uma estrutura promissora para o desenvolvimento geral de modelos de turbulência. O autor ainda cita que na fase de treinamento do modelos as simulações tem um aumento considerável no custo

computacional, o que pode limitar a aplicabilidade a casos complexos. No entanto, isso pode ser compensado por esforços na redução do custo computacional em estudos futuros.

Na literatura ainda podemos encontrar trabalhos como o de Mosavi et al. (2019) que usaram o método de aprendizado de máquina em combinação com dados de simulação CFD para prever os parâmetros como a velocidade do gás em um reator multifásico. Neste estudo foram examinados diferentes números de entradas, número de saídas e diferentes funções de ativação e chegou a conclusão que o número de entradas tem um impacto significativo na precisão do método para capturar todo o comportamento do escoamento de fluido na coluna. Além disso, a utilização de IA permite reduzir o tempo computacional e o número de simulações necessárias para otimização deste tipo de processo. No entanto, esse tipo de modelagem é limitada à quantidade de dados e só pode mostrar o comportamento do processo com base nos dados de entrada.

Já Liu et al. (2021) apresentam uma abordagem Bayesiana para quantificar e reduzir as incertezas de simulações de Dinâmica dos Fluidos Computacional Multifásica. Com o apoio de medições experimentais de alta resolução adquiridas em uma seção de teste com seção transversal de 10 mm × 30 mm, um estudo de caso abrangente foi realizado para avaliar a incerteza de três grandezas de interesse: fração de vazio, velocidade do líquido, e velocidade do gás. Os resultados demonstram que a abordagem proposta pode efetivamente quantificar e reduzir a incerteza das previsões de simulações CFD. O trabalho também cita a importância de uma base de dados adequada para o bom resultado dos métodos de Inteligência Artificial.

Um dos principais problemas relacionados ao uso de CFD é o custo computacional gerado por uma malha suficientemente fina, então, Hanna et al. (2020) usaram dados de simulações com malha suficientemente fina para criar um modelo substituto que prevê a distribuição do erro local e mitiga-los em um escoamento com malha grosseira. Este modelo foi construído usando algoritmos de regressão de ML, sendo eles Rede Neural Artificial (ANN) e Floresta Aleatória (RF). Os autores também demonstram o potencial do modelo ML para melhorar a precisão das simulações CFD, usando-o para orientar o refinamento adaptativo de malha.

Na área térmica Mohammadpour et al. (2022) conduziu uma análise para avaliar o efeito dos parâmetros geométricos e operacionais na transferência de calor de nano fluidos em um dissipador de calor de microcanal com jatos sintéticos duplos através de um modelo de dinâmica de fluidos computacional. Em seguida, eles usaram modelos de regressão de aprendizado de máquina para prever o coeficiente de transferência de calor com base nos resultados do CFD, a fim de obter uma previsão mais eficiente e precisa do desempenho da transferência de calor.

Ding e Lam (2019) desenvolveram um modelo de dinâmica de fluidos computacional (CFD) para avaliar o potencial de ventilação natural urbana eficaz. Neste artigo seis variáveis de projeto são usadas para gerar 3.840 variações de projeto para avaliação da ventilação natural e esses dados foram utilizados na criação de um modelo de ML (*Gradient Boosting*) para verificar rapidamente os potenciais de ventilação natural do edifício de diferentes opções de projeto em um ambiente urbano. Esse modelo baseado em dados é de 3 a 4 ordens de magnitude mais rápido do que executar uma simulação de CFD e é muito útil para apoiar a tomada de decisões de design.

O trabalho de Hammond et al. (2022) ilustra desenvolvimentos recentes em CFD para turbomáquinas que utilizam técnicas de aprendizado de máquina para aumentar a precisão da previsão, acelerar os tempos de previsão, analisar e gerenciar incertezas e reconciliar simulações com dados disponíveis.

O CFD é frequentemente utilizado para realizar análises de fluxo e transferência de calor para ajudar os projetistas a extrair o máximo desempenho de cada componente destes equipamentos, mas tem um alto custo computacional atrelado a ele. As técnicas de ML facilitam uma busca mais rápida e robusta do espaço de projeto, com ou sem a ajuda de métodos de otimização (espaço de projeto é uma representação matemática de todas as possíveis soluções para um problema), e permitem projetos inovadores que acompanham a demanda por maior eficiência e sustentabilidade, bem como redução de custos de operação de peças e ativos. Este artigo faz uma ressalva para o uso de técnicas de ML para otimização de equipamentos em indústrias onde não se pode haver erros como ocorre na aeronáutica e na marinha, pois o uso destas técnicas resulta em uma incerteza que precisa ser quantificada e gerenciada para apoiar decisões de projeto e permitir a certificação de produtos por órgãos reguladores.

Na área de escoamentos multifásicos particulados Lai, Chen e Huang (2022) apresentaram um modelo que emprega redes neurais para detectar e resolver contatos de partículas. Dois tipos de redes neurais foram utilizadas, uma rede de classificação para detecção de contato e uma rede de regressão para resolução de contato. As redes neurais tem como entrada parâmetros geométricos das partículas e como saída o resultado do contato entre as partículas. O modelo desenvolvido neste artigo consegue reproduzir com precisão a trajetória das partículas individuais mesmo em um empacotamento denso e sob grandes cargas com um custo computacional muito menor que métodos convencionais como DEM. Apesar de todas as vantagens, o autor afirma que os erros mesmo que sejam pequenos em magnitude podem ter um efeito significa-

tivo no comportamento dinâmico das partículas.

Em Jayasundara e Zhu (2022) o desgaste do revestimento de moinhos de bolas foi investigado com base no método de elementos discretos e em uma abordagem baseada em dados. Uma nova abordagem foi proposta para prever o revestimento desgastado treinando redes neurais para o parâmetro de desgaste com base na energia de desgaste simulada e no perfil de desgaste medido de um pequeno moinho. Os resultados obtidos neste estudo indicam que a combinação de redes neurais com o DEM fornece uma técnica promissora no desenvolvimento de modelos de desgaste para aplicações industriais uma vez que os perfis de desgaste do revestimento previstos em diferentes momentos para o moinho foram semelhantes aos obtidos pelo experimento.

Já no estudo de Anh et al. (2023), um modelo híbrido de aprendizado profundo (*long short-term memory* - LSTM) combinado com um Método de Elementos Discretos (DEM) foi usado para prever a porosidade. Em uma construção de leito de cascalho 3D, o DEM foi construído para reproduzir amostras de porosidade e infiltração de sedimentos finos. No estudo citado, a porosidade e a GSD foram calculadas usando as saídas da simulação do DEM para treinar o modelo de aprendizado profundo. Conjuntos de valores de porosidade foram gerados com base nas saídas do DEM e integrados com o modelo LSTM de aprendizado profundo para determinar a relação entre porosidade e GSD. O LSTM melhorou o comportamento de aprendizado das características do tamanho de grão para prever a porosidade e o LSTM pode facilmente superar uma das desvantagens inerentes do DEM, que é o seu custo computacional na simulação.

Por fim, em Liu et al. (2020), um modelo de previsão de porosidade foi estabelecido para misturas granulares através da Modelagem de Elementos Discretos (DEM) e do algoritmo de Rede Neural de Propagação de Erro de Retorno (BPNN). Elementos esféricos foram usados para simular partículas em materiais granulares. Um total de 400 misturas foram simuladas com o método de elementos discretos para alimentar o banco de dados para o treinamento e teste do BPNN. Os resultados de simulação foram validados por resultados experimentais.

O ML tem sido usado para realizar simulações de partículas, prever a distribuição do tamanho das partículas e padrões de escoamentos particulados. No entanto, ainda há muito espaço para melhorias, especialmente no desenvolvimento de modelos que possam prever com precisão o comportamento complexo de escoamentos granulares. Nesta tese foram utilizadas técnicas de ML para prever o comportamento dinâmico de partículas esféricas em um escoamento multifásico em substituição a métodos tradicionais na literatura. Para treinamento de tais modelos

foram utilizados dados obtidos através das simulações realizadas usando abordagem tradicional DEM.

2.5 Plataforma Computacional MFSim

Destaca-se ainda que todo desenvolvimento computacional desta tese foi incorporado a plataforma MFSim como funcionalidades adicionais. O MFSim teve início com o trabalho de Villar et al. (2007) sobre escoamentos multifásicos e vem sendo desenvolvido em parceria com a Petrobras no Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia (UFU). O código está sendo escrito, principalmente, na linguagem Fortran90, com alguns módulos escritos em C. Atualmente, o código permite aos usuários simular, utilizando processamento paralelo, uma variedade de problemas pseudo bidimensionais e tridimensionais envolvendo escoamentos turbulentos, como escoamentos reativos, escoamentos com corpos imersos, bifásicos, particulados, não isotérmicos e fluido estrutura.

A discretização espacial das equações de balanceamento para o domínio euleriano utiliza o método dos volumes finitos (MVF) com uma disposição deslocada para as componentes da velocidade. Para isso, é utilizada uma malha adaptativa bloco-estruturada que permite o uso de refinamento fixo local ou a utilização de critérios baseados nas propriedades do escoamento para definir dinamicamente os níveis de refinamento.

Para a discretização temporal das equações de balanço, estão disponíveis métodos explícitos de primeira ordem e métodos semi-implícitos de segunda ordem. O passo de tempo varia ao longo das simulações para atender à restrição temporal desses métodos. Além disso, as equações de balanço de quantidade de movimento linear podem ser discretizadas tanto na forma divergente quanto na forma não divergente, deixando a escolha para o usuário do código.

O acoplamento pressão-velocidade é realizado por meio de um método de projeção baseado na técnica de passos fracionados proposta por Chorin (1968). Adicionalmente, os sistemas lineares resultantes das equações de balanceamento podem ser solucionados pelo método multigrid multinível (VILLAR et al., 2007) ou pela biblioteca PETSc (ABHYANKAR et al., 2018). Para modelagem da turbulência, atualmente, o MFSim trabalha com as abordagens Large Eddy Simulation (LES) e URANS (MELO et al., 2017; ELIAS et al., 2018; MAGALHÃES et al., 2018). O código também incluiu implementações para escoamentos reativos (DAMASCENO; SANTOS; VEDOVOTO, 2018).

Para simular corpos imersos, a metodologia utilizada é baseada no trabalho de Wang, Fan e Luo (2008) e é conhecida como o método de fronteira imersa de interface difusa. Este método já foi implementado no software MFSim, incluindo as equações de balanço de quantidade de movimento linear (NETO et al., 2016) e de energia (MELO et al., 2017).

Para a modelagem de escoamentos multifásicos, foi implementado o método *Volume of Fluid* (VOF) (RIBERA et al., 2015; BARBI et al., 2016; PIVELLO et al., 2014), tal metodologia foi baseada no trabalho de Popinet (2009). Outra abordagem contida no MFSim para escoamentos multifásicos é o DPM, usado para simulação de escoamentos gás-líquido (PINHEIRO et al., 2021) e gás-sólido (SANTOS, 2019).

Esta tese tem como foco a implementação ao MFSim de um modelo numérico-computacional para escoamentos multifásicos particulados regidos pelo contato (DEM) baseado nos trabalhos de Schwarzkopf et al. (2011), Norouzi et al. (2016) e Golshan et al. (2022)

CAPÍTULO III

CONCEITOS BÁSICOS

Em escoamentos de dispersões com partículas sólidas o comportamento dinâmico do conjunto pode ser influenciado por fatores como a viscosidade do líquido e a velocidade do escoamento, mas também por características da fase dispersa, entre eles, a concentração e o tamanho das partículas.

Uma fase dispersa pode ser composta por pequenas partículas, gotículas ou bolhas dentro de uma outra fase chamada de fase contínua. Por exemplo, em um escoamento de líquido-sólido, as partículas sólidas são a fase dispersa enquanto o líquido é a fase contínua. A tabela 3.1 ilustra processos onde são utilizadas cada uma destas categorias.

Tabela 3.1: Processos industriais que envolvem escoamentos multifásicos.

Tipo de escoamento	Aplicações
Gás-sólido	Transporte pneumático, separação de partículas em ciclones e filtros, leitos fluidizados
Líquido-sólido	Transporte hidráulico, separação líquido-sólido
Gás-gotícula	Secagem por atomização, resfriamento por aspersão
Líquido-gotícula	Mistura de líquidos imiscíveis, extração líquido-líquido
Líquido-bolha	Colunas de bolhas, aeração de efluentes, flotação

3.1 Abordagens numéricas para escoamentos multifásicos

A modelagem matemática e a simulação computacional são ferramentas importantes para entender e prever o comportamento dos escoamentos multifásicos com partículas sólidas. Para modelar esse tipo de escoamento, é necessário levar em consideração a interação entre as fases fluidas e sólidas, a transferência de massa, térmica e quantidade de movimento linear entre as fases.

A escolha da abordagem numérica adequada depende da aplicação específica e dos requisitos do problema, cada abordagem tem suas próprias vantagens e desvantagens, e por vezes a combinação dos métodos é necessária para obtenção de resultados mais precisos e confiáveis.

Como visto nos capítulos anteriores existem, basicamente, duas maneiras de se modelar um escoamento multifásico, mas nesta tese representaremos as partículas como um referencial lagrangiano e o fluido como um referencial euleriano. Isto é feito para facilitar a descrição numérica do escoamento.

No referencial lagrangiano, as partículas são rastreadas ao longo de suas trajetórias individuais através do Método de Partículas Discretas e do Modelo dos Elementos Discretos. Nestas abordagens o movimento de cada partícula obedece a segunda lei de Newton.

Enquanto no referencial euleriano, as propriedades do fluido são função das coordenadas espaciais, descritas pelas equações de continuidade e Navier-Stokes. As equações de balanço de massa e de balanço de quantidade de movimento linear tanto para o fluido quanto para as partículas sólidas serão resolvidas com técnicas de integração numérica.

3.1.1 Abordagens numéricas aplicadas a fase contínua

A dinâmica de escoamentos turbulentos é difícil de se prever devido à complexidade das interações entre vários tempos e comprimentos característicos. Alguns métodos numéricos são utilizados para simular esse tipo de escoamento

O modelo DNS (Direct Numerical Simulation) resolve as equações de balanço completamente, ou seja, sem nenhum tipo de modelagem ou simplificação, para todas as estruturas turbilhonares presente no escoamento. Isto requer uma malha computacional extremamente refinada, para que as estruturas mais pequenas do escoamento sejam corretamente representadas.

O modelo LES (Large Eddy Simulation) também é utilizado para simular escoamentos turbulentos. A diferença é que, ao invés de resolver as equações completas, ele utiliza um filtro

para se concentrar apenas nas grandes estruturas da turbulência, deixando de fora as pequenas estruturas. As equações filtradas são então resolvidas, enquanto as pequenas estruturas são modeladas com o uso de modelos submalha. Desta forma, a malha computacional não precisa ser tão refinada quanto na DNS.

Os modelos RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) são baseados na média Reynolds das equações de balanço. Eles envolvem a aproximação das flutuações rápidas da turbulência como uma média estacionária, de modo a simplificar as equações do escoamento. Existem vários tipos de modelos RANS, que se diferenciam pelo tipo de dependência com a viscosidade turbulenta.

Já os modelos URANS (Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes) são modelos RANS que consideram o termo temporal nas equações médias de Navier-Stokes, o que permite a representação de escoamentos instáveis e não-estacionários.

3.1.2 Abordagens numéricas aplicadas a fase dispersa

Existem duas formas de modelar a estrutura lagrangiana, e a primeira delas é utilizando um método de fronteira imersa (IBM - do inglês *Immersed Boundary Method*) para resolver o campo do escoamento ao redor de cada partícula (ver exemplo em Kajishima e Takiguchi (2002), Uhlmann (2005), Kempe e Fröhlich (2012)). Mas esta abordagem tem algumas limitações relacionadas a ao tamanho do espaçamento da malha euleriana que é imposta pelo tamanho da malha lagrangiana, tornando o método impraticável para partículas muito pequenas. E além disso, o custo computacional da simulação de escoamentos gás-sólido pelo método IBM, aumenta à medida em que se aumenta a quantidade de partículas.

A outra forma de modelar a estrutura lagrangiana é através da aproximação ponto-partícula, na qual as partículas do escoamento bifásico disperso são modeladas como pontos materiais. Para essa aproximação ser válida, a partícula deve ser menor do que a célula computacional. O tamanho da partícula precisa ser pequeno o suficiente para que as perturbações causadas na fase contínua fiquem contidas dentro da faixa de espaçamento da malha computacional (ALLETTO, 2014).

Diferentemente do que acontece nos métodos IBM, na abordagem ponto-partícula, o escoamento não é resolvido ao redor das partículas. Ao invés disso, essas partículas são rastreadas, no campo de escoamento previamente resolvido, mediante suas equações de movimento que são descritas pela segunda lei de Newton. Assim, comparando o custo computacional referente ao

número de partículas presentes no escoamento, a abordagem ponto-partícula é mais barata. Fisicamente, essa abordagem não tem limitação no que diz respeito à máxima fração volumétrica da fase dispersa, pois os mecanismos mais relevantes que interferem no movimento das partículas podem ser modelados. Dentre esses mecanismos estão: as forças de corpo e fluidodinâmicas atuantes nas partículas, o acoplamento fluido partícula (2 vias), colisões entre partículas (4 vias), colisões entre partículas e paredes.

Sommerfeld (2017) sugere três classificações para a abordagem ponto-partícula, uma vez que existem métodos de rastreamento de partículas lagrangianas com algumas distinções. No conceito de parcela lagrangiana (LPC - *Lagrangian Parcel Concept*), as partículas consideradas nas simulações representam um certo número de partículas reais, sendo assim chamadas de parcelas. Essa representação é vantajosa para os casos em que as partículas são ínfimas e o rastreamento de todas elas tornar-se inviável computacionalmente. Já, no método da partícula discreta (DPM - *Discrete Particle Method*), todas as partículas reais do sistema são rastreadas. Tanto no LPC quanto no DPM, o modelo de esfera rígida é adotado, no qual apenas colisões instantâneas entre pares de partículas acontecem. Esse modelo é efetivamente aplicado em situações com baixa frequência de colisão, e onde o contato entre partículas se mantém por pouco tempo.

No método de elementos discretos (DEM - *Discrete Element Method*), assim como no DPM, todas as partículas reais são rastreadas no domínio computacional. No entanto, o modelo de esferas flexíveis é adotado, considerando a possibilidade de haver mais de um contato para uma mesma partícula e as partículas são tratadas como corpos deformáveis, que retornam suas formas originais depois que o contato é liberado (NOROUZI et al., 2016). Diante disso, é possível simular escoamentos muito mais densos com o DEM. Além do movimento das partículas ser decorrente de forças fluidodinâmicas e forças externas, no DEM, tem-se também a atuação das forças de contato, como a força originada pela colisão entre duas partículas. Essa força de colisão pode ser obtida conforme demonstrado por (CUNDALL; STRACK, 1979; TSUJI; TANAKA; ISHIDA, 1992).

3.2 Parâmetros-chave da fase dispersa

A escolha do método apropriado para simular um escoamento com fase dispersa depende de vários fatores, incluindo a concentração, o tamanho e a densidade das partículas. Além disso,

outros fenômenos, como colisões entre partículas, coalescência de gotículas e bolhas, e o comportamento da fase contínua, também influenciam o comportamento da fase dispersa. Portanto, alguns parâmetros-chave são essenciais para compreender adequadamente um escoamento com fase dispersa.

3.2.1 Número de Stokes

O número de Stokes é uma medida que compara o tempo de resposta da partícula às forças hidrodinâmicas aplicadas a ela, com o tempo característico do escoamento do fluido. É usado como uma forma de classificar a dinâmica de partículas em suspensão em um fluido, quanto maior o número de Stokes, menor a influência das forças hidrodinâmicas sobre a partícula. Por isso é um parâmetro muito importante para caracterização do acoplamento fluido e partícula.

Ele é mostrado na Eq. 3.1, e é definido pela razão entre o tempo de resposta da partícula (τ_p) e o tempo característico associado ao escoamento do fluido (τ_f) (SCHWARZKOPF et al., 2011)

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f}. \quad (3.1)$$

O cálculo do tempo de resposta (Eq. 3.2) da partícula está diretamente relacionado com o tipo de escoamento e características físicas da fase dispersa.

$$\tau_p = \frac{2R^2 \rho_p}{9\mu}. \quad (3.2)$$

onde R é o raio da partícula, ρ_p é a densidade da fase dispersa e μ é a viscosidade dinâmica do fluido em que a partícula está imersa.

O tempo característico do escoamento (Eq. 3.3) pode ser obtido através da relação entre o comprimento característico do escoamento (l) e a velocidade da corrente livre (U_∞).

$$\tau_f = \frac{l}{U_\infty}. \quad (3.3)$$

Se o escoamento for turbulento, a formulação para o tempo característico de movimento inercial, τ_f , torna-se mais complexa, pois o movimento do fluido é altamente não linear e imprevisível. Assim, o tempo de resposta da partícula é determinado pelo tempo característico integral da turbulência (Eq. 3.4), baseada na energia cinética turbulenta (k) e na potência es-

pecífica de transformação viscosa (ϵ) (SOMMERFELD, 2017).

$$\tau_t = \frac{k}{\epsilon}. \quad (3.4)$$

Quando o número de Stokes é pequeno ($St \ll 1$), o tempo de resposta da partícula é menor do que o tempo característico do escoamento, o que significa que as partículas seguem as estruturas turbilhonares do escoamento. Entretanto, se o número de Stokes é muito grande ($St \gg 1$), as partículas não conseguem acompanhar as mudanças de velocidade do escoamento e tendem a se mover em linha reta. Quando o número de Stokes é aproximadamente igual a 1 ($St \approx 1$), as partículas ainda são afetadas pelo campo de velocidade do fluido, mas a sua inércia impede que sigam completamente as estruturas turbilhonares (SCHWARZKOPF et al., 2011; SOMMERFELD, 2017). A diferença do número de Stokes na prática é mostrado na fig. 3.1 .

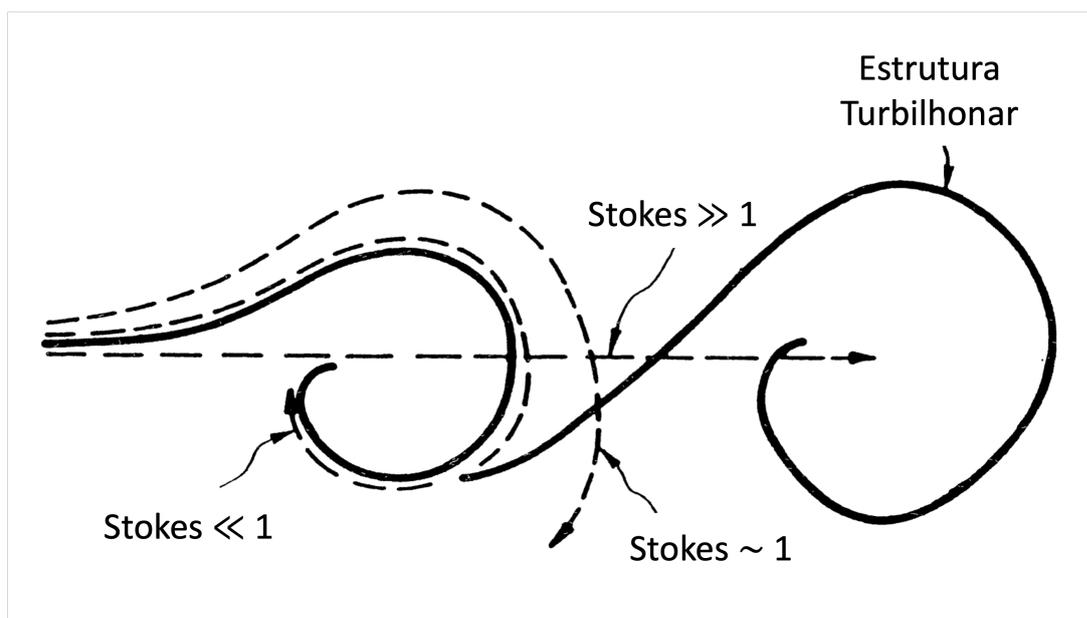


Figura 3.1: Comportamento dinâmico das partículas com diferentes número de Stokes. Fonte: Adaptado de Crowe, Troutt e Chung (1995).

3.2.2 Fração Volumétrica

Outro parâmetro muito importante em escoamentos com partículas é a fração volumétrica da fase dispersa, que é uma medida do volume da fase dispersa presente em um sistema multifásico. Ela é dada como a razão do volume da fase dispersa (V_d) presente no sistema sobre a volume

total do sistema (V_m), como pode ser visto na Eq. (3.5).

$$\alpha_d = \frac{V_d}{V_m} = \frac{1}{V_m} \sum_{n=1}^{N_p} V_{p_n}, \quad (3.5)$$

sendo N_p o número de partículas no interior de V_m e V_p o volume de uma partícula. Da mesma forma pode ser calculado a fração volumétrica da fase contínua:

$$\alpha_c = \frac{V_c}{V_m}, \quad (3.6)$$

onde V_c é o volume da fase contínua. Por definição, a soma das frações volumétricas das duas fases é igual a um.

Norouzi et al. (2016) citam que o escoamento pode ser classificado em termos da fração volumétrica das partículas, podendo ser denso ou diluído. Em um escoamento diluído o movimento das partículas é afetado basicamente pelo movimento do fluido, já para um escoamento muito denso a interação partícula-partícula se torna preponderante, como pode ser visto na fig. 3.2.

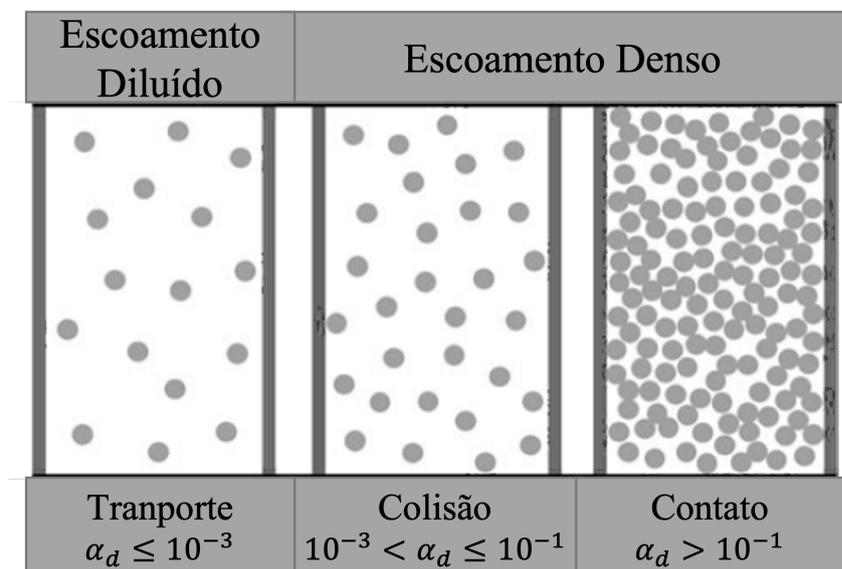


Figura 3.2: Tipos de escoamento em relação à fração volumétrica. Fonte: Adaptado de Sommerfeld (2017).

3.3 Acoplamento entre fases

Segundo Norouzi et al. (2016) o acoplamento entre as fases pode ocorrer em termos da troca de quantidade de movimento, energia e massa. O modo como o acoplamento é feito depende

da contribuição de cada fase nos fenômenos preponderantes do escoamento. A complexidade e o custo computacional do modelo adotado aumentam proporcionalmente aos efeitos associados às escalas de tempo e comprimento, ressalta-se que o grau de interação entre as fases pode ser caracterizado de três maneiras (veja a fig. 3.3):

- Acoplamento de 1-via: a fase contínua afeta no transporte das partículas devido ao arrasto, porém, as partículas não influenciam no escoamento da fase contínua;
- Acoplamento de 2-vias: ambas as fases são influenciadas uma pela a outra, porém na fase dispersa, as partículas não interagem entre si;
- Acoplamento de 4-vias: a fase contínua afeta no transporte das partículas, as partículas também influenciam no escoamento do fluido, e ainda considera-se interações entre partículas.

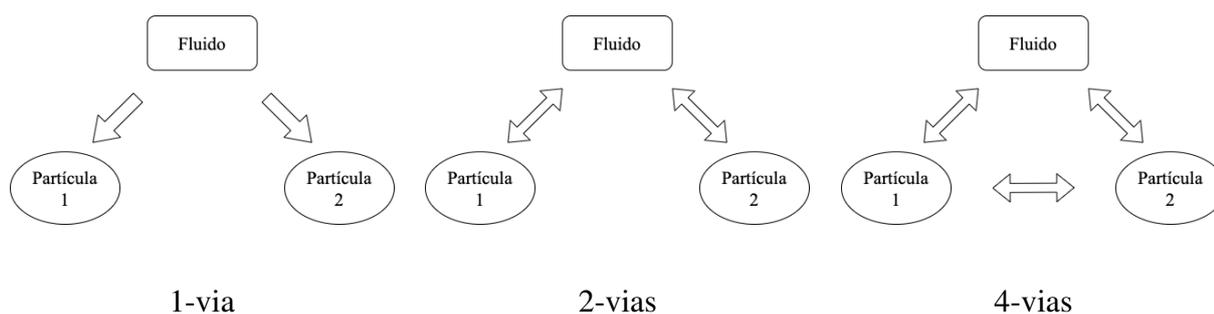


Figura 3.3: Tipos de Acoplamento entre as fases contínua e discreta.

Dessa forma, é possível compreender que o acoplamento entre fases é um aspecto crucial no estudo de escoamentos multifásicos e que sua caracterização adequada é fundamental para uma representação fiel da dinâmica de escoamentos multifásicos.

CAPÍTULO IV

MODELO MATEMÁTICO PARA TRANSPORTE DE PARTÍCULAS

Esta tese tem como objetivo implementar no MFSim um modelo computacional baseado em contato (DEM) para simular o descarte de cascalho proveniente das primeiras fases da perfuração de poços de petróleo em águas profundas.

A alta fração volumétrica de partículas pode alterar substancialmente na dinâmica do fluido devido à transferência de quantidade de movimento linear entre as fases. Além disso, as colisões e interações entre as partículas e com as paredes do sistema podem ser importantes para compreensão do comportamento da pluma de descartes. Entretanto, este tipo de implementação é complexa e as simulações correspondente são de um alto custo computacional.

Neste sentido, foi elaborado um modelo adaptativo ao qual, em uma região com grande concentração de partículas (escoamento com contato) seja utilizado o modelo DEM, já em regiões com menor número de partículas, mas regidas pela colisão, seja utilizado o modelo DPM e acoplamento 4-vias, e por fim, em regiões do escoamento sem colisões seja utilizado o modelo DPM e acoplamento 2-vias ou 1-via (veja a tab. 4.1). Dessa forma a simulação torna-se mais precisa e com menor custo computacional.

Neste capítulo será apresentada toda a formulação matemáticas necessárias para a modelagem e advecção de partículas sólidas em meio líquido, onde as partículas são tratadas de maneira discreta utilizando um referencial lagrangiano, enquanto o fluido é modelado usando um referencial euleriano.

4.1 Modelo matemático para a fase contínua

A modelagem utilizada para tratar a fase contínua do escoamento é apresentada começando pelas equações da continuidade e de Navier-Stokes, sendo um modelo submalha dinâmico de Germano usado para o fechamento da turbulência. Ressalta-se que toda a modelagem matemática usada para tratar a fluidodinâmica, incluindo o modelo de fechamento da turbulência foi baseada em Silveira-Neto (2020).

4.1.1 Formulação para a fluidodinâmica

A simulação de escoamentos isotérmicos de fluidos em regimes laminar e turbulento pode ser realizada através das equações de Navier-Stokes juntamente com a equação da continuidade. As equações da continuidade e de Navier-Stokes em notação indicial são representadas nas eqs. 4.1 e 4.2, respectivamente.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + f_i, \quad (4.2)$$

onde i e $j = 1, 2, 3$ representam as componentes nas direções coordenadas (x, y, z) , u é a velocidade do fluido, p é o campo de pressão, ρ é a massa específica do fluido, μ é viscosidade do fluido e f_i é o campo de forças externas.

No entanto, a Simulação Numérica Direta (DNS) de escoamentos turbulentos apresenta altos custos computacionais devido à necessidade de malhas muito finas para resolver todo o espectro de estruturas turbilhonares. Neste sentido, existem algumas metodologias mais baratas computacionalmente para simulação de escoamentos turbulentos, entre elas está a decomposição do espectro de estruturas através da filtragem proposta por Reynolds e Boussinesq. Segundo Magalhães et al. (2018) a aplicação do operador média temporal nas equações de Navier-Stokes e da continuidade leva a Eq. 4.3.

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{f}_i. \quad (4.4)$$

As eqs. 4.3 e 4.4 não podem ser resolvidas diretamente devido ao termo não linear, $\overline{u_i u_j}$, na equação de Navier-Stokes. Por isso, a técnica de decomposição proposta por Reynolds e Boussinesq é aplicada ($u_i = \bar{u}_i + u'_i$), onde o campo total de velocidade é substituída pela parte filtrada (\bar{u}_i) e a flutuação (u'_i), dando assim origem às equações de Reynolds médias transientes ou equações filtradas (Eq. 4.5).

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{u'_i u'_j} \right] + \bar{f}_i, \quad (4.5)$$

onde o termo $\overline{u'_i u'_j}$ é conhecido por tensor de Boussinesq-Reynolds.

Estas equações, juntamente com a equação da continuidade, formam o modelo para o comportamento médio de um escoamento turbulento isotérmico. No entanto, há seis incógnitas no tensor de Boussinesq-Reynolds, resultando no problema de fechamento da turbulência. Para solucioná-lo, modelos adicionais de fechamento precisam ser empregados. Uma proposta de fechamento foi apresentada por Boussinesq (Eq.4.6), baseado em uma analogia com o modelo de Stokes para tensões viscosas moleculares.

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (4.6)$$

sendo μ_t a viscosidade dinâmica turbulenta, δ_{ij} o delta de Kronecker. A energia cinética turbulenta, que é definida como:

$$k \equiv -\frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u' u'} + \overline{v' v'} + \overline{w' w'}). \quad (4.7)$$

A viscosidade dinâmica turbulenta é uma propriedade que depende do escoamento e não do fluido. Substituindo a Eq. 4.6 nas equações de Navier-Stokes médias transientes (Eq. 4.5), obtém-se as equações de Navier-Stokes filtradas Eq. 4.8.

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right] + \bar{f}_i. \quad (4.8)$$

Como a energia cinética turbulenta depende apenas do traço do tensor de Reynolds, o divergente do termo que a envolve resulta no gradiente da mesma e é mostrado na 4.9.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right) = \frac{2}{3} \frac{\partial \rho k}{\partial x_i}. \quad (4.9)$$

Isso leva a uma pressão modificada \bar{p}^* (Eq. 4.10).

$$\bar{p}^* = \bar{p} + \frac{2}{3}\rho k. \quad (4.10)$$

Essa pressão modificada é então incorporada no termo de gradiente de pressão na equação de Navier-Stokes filtrada (eq. 4.8) que passa a ser descrita pela Eq. 4.11.

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{f}_i. \quad (4.11)$$

As equações resultantes, no entanto, ainda não estão completas, pois a viscosidade turbulenta ainda precisa ser modelada. Diversos modelos de fechamento estão disponíveis na literatura, nesta tese será usado o modelo de Simulação de Grandes Estruturas (LES).

4.1.2 Metodologia para modelagem da turbulência LES

Large Eddy Simulation (LES) é uma modelo numérico para representar o comportamento turbulento de escoamentos. A ideia por trás do LES é aplicar um filtro espacial nas equações de balanço, separando as estruturas menores das maiores. As grandes estruturas do escoamento são resolvidas explicitamente, enquanto as estruturas menores são modeladas com o uso de modelos de fechamento.

Estes modelos de fechamento da turbulência podem ser classificados como explícitos e implícitos. No tipo explícito, o processo de filtragem é independente da discretização numérica espacial e, em geral, sua frequência de passagem é menor que a da malha local. No tipo implícito, o processo de filtragem é implícito, pois a discretização numérica é, por si só, um processo de filtragem espacial e temporal.

O modelo de turbulência Smagorinsky dinâmico é um tipo de modelo de turbulência de Simulação de Grandes Eddies (LES) baseado no fechamento de turbulência de Smagorinsky, que sugere que a taxa de produção de turbulência pode estar relacionada ao tensor de gradiente de velocidade médio. O modelo usa um procedimento dinâmico para estimar o coeficiente de viscosidade turbulenta (Eq. 4.12).

$$\mu_t = (c(\vec{x}, t) \tilde{\Delta})^2 |\widetilde{S_{ij}}|, \quad (4.12)$$

onde a viscosidade turbulenta, depende do comprimento do filtro explícito, $\tilde{\Delta}$, e da função

coeficiente $c(\vec{x}, t)$, cujo cálculo ocorre dinamicamente de acordo com o escoamento e varia no tempo e no espaço.

O modelo de turbulência dinâmico de Germano tem sido usado em uma grande variedade de aplicações e é mostrado em mais detalhes em Silveira-Neto (2020), Vedovoto (2011), Melo et al. (2017).

4.2 Modelo matemático para a fase dispersa

O movimento de cada partícula obedece a segunda lei de Newton, e as equações que descrevem seu movimento são expressas matematicamente pelas Eq. (4.13), Eq. (4.14) e Eq. (4.15):

$$m_p \frac{du_{p_i}}{dt} = Fa_i, \quad (4.13)$$

$$\frac{dx_{p_i}}{dt} = u_{p_i}, \quad (4.14)$$

$$I \frac{\partial \omega_i}{\partial t} = M_i, \quad (4.15)$$

onde m_p é a massa da partícula, u_p é o vetor velocidade da partícula, Fa é o vetor de forças aplicadas na partícula. x_p é a posição da partícula no espaço. I é a inércia e M é o vetor dos momentos atuante na partícula.

A tab. 4.1 mostra a diferença da equação de transporte para as partículas que melhor descreve o movimento das partículas de acordo com as diferentes modelagens estabelecidas na literatura. Nela é possível notar que para o vetor de forças aplicadas na partícula foram consideradas força de arrasto f_D , combinação da força peso e empuxo f_{BW} , força de sustentação devido ao escoamento não uniforme (Saffman) f_S e força de sustentação devido a rotação (Magnus) f_M , comuns para as três diferente modelagens. Assim como o torque atuante na partícula T_i , que também é comum entre os modelos.

O cálculo da força de arrasto é mostrado na Eq 4.16.

$$f_{D_i} = \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_p d_p} m_p C_d (u_i - u_{p_i}) |u - u_p|, \quad (4.16)$$

onde m_p é a massa da partícula, d_p é o diâmetro da partícula ρ_p é a massa específica da partícula.

Tabela 4.1: Equação para advecção de partículas em função das diferentes modelagens.

Modelo numérico	Equação que descreve o movimento das partículas
Transporte (DPM 1 via)	$Fa_i = f_{D_i} - f_{BW_i} + f_{S_i} + f_{M_i}$ $M_i = T_i$
Colisão (DPM 4 vias)	$Fa_i = f_{D_i} - f_{BW_i} + f_{S_i} + f_{M_i} + \text{Modelo de esfera rígida}$ $M_i = T_i$
Contato (DEM)	$Fa_i = f_{D_i} - f_{BW_i} + f_{S_i} + f_{M_i} + \sum_q^{n_p} (f_{C_i}^n + f_{C_i}^t)_q$ $M_i = T_i + \sum_q^{n_p} (T_{C_i}^r + T_{C_i}^t)_q$

O coeficiente de arrasto C_d , é citado em Schiller (1933) e é descrito por:

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} & Re_p \geq 1000 \\ 0.44 & Re_p < 1000 \end{cases}, \quad (4.17)$$

sendo:

$$Re_p = \frac{\rho d_p |u_i - u_{p_i}|}{\mu}. \quad (4.18)$$

O empuxo e a força peso combinados são descritos pela Eq. 4.19.

$$f_{BW_i} = m_p g_i \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right). \quad (4.19)$$

onde g é o campo gravitacional.

A equação 4.20 descreve a força de sustentação devido ao escoamento não uniforme (Saffman).

$$f_{S_i} = 1.61 d_p \sqrt{\mu \rho |\omega|} \varepsilon_{ijk} (u_j - u_{p_j}) \omega_k, \quad (4.20)$$

sendo:

$$\omega_k = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (4.21)$$

Já a força de sustentação devido a rotação (Magnus) pode ser expressa como mostrado na Eq. 4.22.

$$f_{M_i} = \frac{\pi}{8} d_p^3 \rho \left[\varepsilon_{ijk} \left(\frac{\varepsilon_{j pq} u_p u_q}{2} - \Omega_j \right) (u_k - u_{pk}) \right], \quad (4.22)$$

onde Ω é a velocidade angular da partícula.

Em casos que apresentam grandes mudanças na vorticidade do fluido, o movimento de rotação da partícula não pode ser desprezado. Grandes mudanças na vorticidade do fluido geram um torque sobre a partícula induzindo um deslizamento angular (SOMMERFELD, 2017).

Rubinow e Keller (1961) apresentaram uma solução analítica para o torque agindo sobre uma partícula (Eq. 4.23) para baixos números de Reynolds da partícula, onde não contabiliza a vorticidade do fluido.

$$T_i = -\pi \mu d_p^3 \omega_{p_i}. \quad (4.23)$$

Para elevados números de Reynolds da partícula, necessita-se de correlações, e para considerar a influência do fluido, a velocidade de rotação relativa deve ser incorporada à equação do torque como é mostrado na Eq. 4.24 (SOMMERFELD, 2000).

$$T_i = \frac{\rho}{2} \left(\frac{d_p}{2} \right)^5 C_r \left\| \vec{\Omega} \right\| \vec{\Omega}_i, \quad (4.24)$$

onde o coeficiente de rotação C_r , para $32 < Re_r < 1000$, pode ser calculado através de uma correlação obtida numericamente por (DENNIS; SINGH; INGHAM, 1980):

$$C_r = \frac{12,9}{\sqrt{Re_r}} + \frac{128,4}{Re_r}, \quad (4.25)$$

sendo o número de Reynolds de rotação dado pela expressão:

$$Re_r = \frac{\rho d_p^2 \left\| \vec{\Omega} \right\|}{\mu}. \quad (4.26)$$

Quando partículas sólidas colidem, suas velocidades de translação e rotação sofrem alterações, modificando a trajetória das mesmas. O modelo de colisão inelástica de esfera rígida faz uma busca do contato entre partículas e então quantifica as novas velocidades após a colisão. Já o modelo de colisão de esfera flexível contabiliza as forças de contato aplicadas em uma partícula e entra diretamente no vetor de de forças.

4.2.1 Modelo de esfera rígida

Tal modelo considera colisões binárias de modo que ambas as partículas são adotadas como esferas homogêneas e não deformáveis. Tratando-se de uma colisão inelástica, as partículas podem se deslizar durante todo o processo da colisão, ou podem se deslizar e parar depois de um certo tempo. O primeiro caso é conhecido como uma condição de deslizamento e o segundo como uma condição de não deslizamento. Segundo (SCHWARZKOPF et al., 2011), as componentes das velocidades linear e angular da partícula 1 após a colisão com a partícula 2 são mostradas na Eq. 4.27 para a condição de deslizamento, ou seja $\|\vec{u}_{rc_t}^-\| > -\frac{7}{2}\mu_d(1+e)(\vec{u}_r^- \cdot \vec{n})$.

$$\vec{u}_1^+ = \vec{u}_1^- - \left(\frac{m_q}{m_1 + m_2} \right) (1 + e) (\vec{u}_r^- \cdot \vec{n}) (\mu_d \vec{t} + \vec{n}), \quad (4.27a)$$

$$\vec{\omega}_1^+ = \vec{\omega}_1^- - \frac{5\mu_d}{d_p} \left(\frac{m_q}{m_1 + m_2} \right) (1 + e) (\vec{u}_r^- \cdot \vec{n}) (\vec{n} \times \vec{t}). \quad (4.27b)$$

Já para condição de não deslizamento as componentes de velocidades linear e angular são mostradas na Eq. 4.28.

$$\vec{u}_1^+ = \vec{u}_1^- - \left(\frac{m_q}{m_1 + m_2} \right) \left[\frac{2}{7} \vec{u}_{rc_t}^- + (1 + e) \vec{u}_{rc_n}^- \right], \quad (4.28a)$$

$$\vec{\omega}_1^+ = \vec{\omega}_1^- - \frac{10}{7} \frac{1}{d_p} \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right) (\vec{n} \times \vec{u}_{rc_t}^-). \quad (4.28b)$$

Nas Eqs. (4.27 e 4.28), os sobrescritos $-$ e $+$ correspondem às propriedades antes e depois da colisão, respectivamente. e e μ_d são os coeficientes de restituição e de fricção dinâmico, os quais estão associados às propriedades materiais das partículas. \vec{u}_r^- é a velocidade relativa das

partículas antes da colisão (Eq. 4.29).

$$\vec{u}_r^- = \vec{u}_1^- - \vec{u}_2^-, \quad (4.29)$$

onde \vec{u}_{rc}^- é a velocidade relativa no ponto de contato antes da colisão:

$$\vec{u}_{rc}^- = \vec{u}_r^- + \frac{d_1}{2} \vec{\omega}_1^- \times \vec{n} + \frac{d_2}{2} \vec{\omega}_2^- \times \vec{n}, \quad (4.30)$$

sendo as componentes normal e tangencial dadas, respectivamente, por:

$$\vec{u}_{rcn}^- = (\vec{u}_{rc}^- \cdot \vec{n}) \vec{n}, \quad (4.31a)$$

$$\vec{u}_{rc_t}^- = \vec{u}_{rc}^- - \vec{u}_{rcn}^-, \quad (4.31b)$$

sendo \vec{n} o vetor normal unitário cujo sentido está indicado na fig. 4.1, e \vec{t} o vetor tangencial unitário obtido por:

$$\vec{t} = \frac{\vec{u}_{rc_t}^-}{\|\vec{u}_{rc_t}^-\|}. \quad (4.32)$$

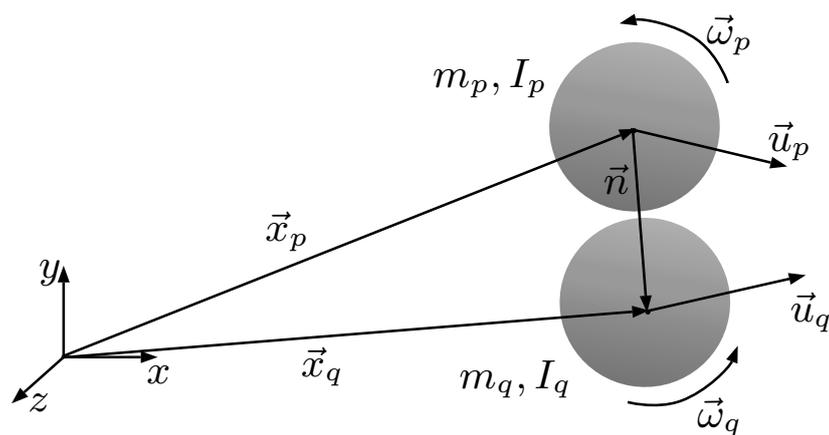


Figura 4.1: Representação esquemática do momento em que acontece o contato entre duas partículas. Fonte: Santos (2019).

4.2.2 Modelo de esfera flexível

O modelo DEM é mais abrangente e realista, no entanto dispense de maior custo computacional para resolução das equações do movimento. Neste modelo é necessária uma busca pelas

partículas em contato com a partícula analisada, considerando as colisões por meio de uma força de contato. A resolução da interação fluido-partícula e passa a ser expressa matematicamente pela Eq. (4.33) e Eq. (4.34) (SCHWARZKOPF et al., 2011).

$$m_p \frac{du_{p_i}}{dt} = f_{D_i} - f_{BW_i} + f_{S_i} + f_{M_i} + \sum_q^{n_p} (f_{C_i}^n + f_{C_i}^t), \quad (4.33)$$

$$I \frac{\partial \omega_i}{\partial t} = T_i + \sum_q^{n_p} (T_{C_i}^r + T_{C_i}^t), \quad (4.34)$$

onde $f_{C_i}^n$ é a força de contato normal e $f_{C_i}^t$ é a força de contato tangencial entre partículas. $T_{C_i}^t$ e $T_{C_i}^r$ são momentos de atrito tangencial e de rolamento devido ao contato entre partículas. Esta modelagem permite que diversas partículas estejam em contato com uma única partícula. Por isso, a força de contato e o momento que atuam sobre a mesma é resultante do somatório das forças e momentos de todas as n_p partículas em contato com ela.

O modelo de contato foi inicialmente desenvolvido por Cundall e Strack (1979). Nele, as partículas podem se sobrepor (conforme mostrado na fig. 4.2), e as forças de contato normais e tangenciais são determinadas por meio da avaliação das sobreposições nas direções normal e tangencial. O cálculo da sobreposição na direção normal entre as partículas 1 e 2 é dado pela Eq. 4.35:

$$\delta^n = R_1 + R_2 - \|x_2 - x_1\|, \quad (4.35)$$

onde x_1 e x_2 são os vetores de posição dos centros das partículas. Consequentemente, o sobreposição normal é positiva quando a distância entre as partículas 1 e 2 é menor que a soma de seus raios (R_1 e R_2 , respectivamente).

O vetor normal de contato (n_{12}) (veja a figura fig. 4.2), é um vetor que aponta da partícula 1 para a partícula 2, e é calculado conforme a Eq. 4.36.

$$n_{12} = \frac{x_2 - x_1}{\|x_2 - x_1\|}. \quad (4.36)$$

A sobreposição na direção tangencial (δ^t) no início de cada contato é igual a zero. Nos passos subsequentes depende do histórico de contato, seguindo a Eq. 4.37. (NOROUZI et al.,

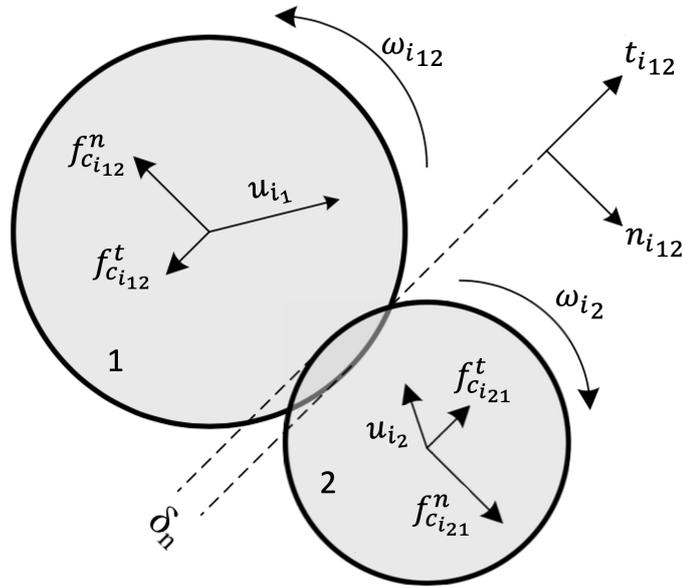


Figura 4.2: Contato partícula-partícula típico do modelo de esfera flexível DEM. Fonte: Adaptado de (GOLSHAN et al., 2022).

2016).

$$\delta_{12}^{t,new} = \delta_{12}^{t,old} + v_r^t dt, \quad (4.37)$$

sendo v_r^t é a velocidade relativa do contato na direção tangencial e é calculada conforme a Eq. 4.38.

$$v_r^t = v_{12} - v_r^n, \quad (4.38)$$

onde a velocidade relativa de contato v_{12} e a velocidade relativa na direção normal são dados por:

$$v_{12} = v_1 - v_2 + \left(\frac{d_{p1}}{2} * \omega_1 + \frac{d_{p2}}{2} * \omega_2 \right) \times n_{12}, \quad (4.39)$$

$$v_r = v_{12} - v_r^n. \quad (4.40)$$

A força de contato entre partículas na direção normal pode então ser descrita pela Eq. 4.41:

$$f_{Ci}^n = -(K^n \delta^n) n_{12} - (\eta^n v_r^n), \quad (4.41)$$

onde K^n é a rigidez na direção normal, η^n é o coeficiente de amortecimento na direção normal.

Já a componente tangencial é dada pela Eq. 4.42.

$$f_{C_i}^t = \begin{cases} -(K^t \delta^t) - (\eta^t v_r^t) & \text{se } |f_{C_i}^t| > \mu_{e_p} f_{C_{n_i}} \\ -\mu_{e_p} |f_{C_{n_i}}| \frac{f_{C_{n_i}}}{|f_{C_{n_i}}|} & \text{se } |f_{C_i}^t| \leq \mu_{e_p} f_{C_{n_i}} \end{cases}, \quad (4.42)$$

onde K^t é a rigidez na direção tangencial, η^t é o coeficiente de amortecimento na direção tangencial e μ_{e_p} é o coeficiente de atrito estático da partícula.

Note que se $|f_{C_i}^t| > \mu f_{C_{n_i}}$ ocorrer durante uma colisão, o critério de Coulomb é violado (também conhecido como *gross sliding*). Neste caso, a magnitude do atrito cinético exercido é independente da magnitude da velocidade da partícula, e a sobreposição tangencial é então limitada.

As constantes da mola e de amortecimento, em modelos lineares não dependem das sobreposições normais ou tangenciais, diferentemente de modelos não lineares. Existem na literatura vários modelos para o cálculo destas constantes, os modelos utilizados neste trabalho foi proposto por Kloss et al. (2012).

Para o modelo linear as constantes da mola e amortecimento são descritos pela Eq. 4.43.

$$K^n = \frac{16}{15} \sqrt{R_e Y_e} \left(\frac{15 m_e V^2}{16 \sqrt{R_e Y_e}} \right)^{0,2}, \quad (4.43a)$$

$$\eta^n = \sqrt{\frac{4 m_e K^n}{1 + \left(\frac{\pi}{\ln e} \right)^2}}, \quad (4.43b)$$

$$K^t = K^n, \quad (4.43c)$$

$$\eta^t = \eta^n. \quad (4.43d)$$

Já a Eq. 4.44 mostra o modelo não linear para tais constantes.

$$K^n = \frac{4}{3} Y_e \sqrt{R_e \delta^n}, \quad (4.44a)$$

$$\eta^n = -2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta\sqrt{S^n m_e}, \quad (4.44b)$$

$$K^t = 8G_e\sqrt{R_e\delta^n}, \quad (4.44c)$$

$$\eta^t = -2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta\sqrt{S^t m_e}. \quad (4.44d)$$

O parâmetros usados para o cálculo das Eqs. 4.43 e 4.44 são mostrados na tab. 4.2.

Tabela 4.2: Parâmetros Efetivos.

Parâmetro	Equação
Massa efetiva	$\frac{1}{m_e} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$
Raio efetivo	$\frac{1}{R_e} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$
Modulo de cisalhamento efetivo	$\frac{1}{G_e} = \frac{2(2-\nu_1)(1+\nu_1)}{Y_1} + \frac{2(2-\nu_2)(1+\nu_2)}{Y_2}$
Modulo de Elasticidade	$\frac{1}{Y_e} = \frac{(1-\nu_1^2)}{Y_1} + \frac{(1-\nu_2^2)}{Y_2}$
β	$\beta = \frac{\ln e}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}}$
S^n	$S^n = 2Y_e\sqrt{R_e\delta^n}$
S^t	$S^t = 8G_e\sqrt{R_e\delta^n}$

Os momentos de atrito tangencial e de rolamento atuante na partícula são descritos conforme as Eqs. 4.45 e 4.46.

$$T_{ci}^t = R_1 n_{12} \times f_{ci}^t, \quad (4.45)$$

$$T_{c_i}^r = \mu_{d_p} R_e |f_{c_i}^n| \hat{\omega}_1 2, \quad (4.46)$$

onde μ_{d_p} é coeficiente de atrito dinâmico da partícula e $\hat{\omega}_1 2$ é dado por:

$$\hat{\omega}_1 2 = \frac{\omega_1 - \omega_2}{|\omega_1 - \omega_2|}, \quad (4.47)$$

sendo ω_1 a velocidade angular da partícula 1 e ω_2 a velocidade angular da partícula 2.

4.3 Termo de acoplamento entre as fases

Considerando um acoplamento de 2 ou 4 vias entre as fases do escoamento, faz-se necessário calcular o termo que avalia a influência do transporte das partículas no escoamento do fluido. Esse termo é adicionado às equações de quantidade de movimento linear da fase contínua e é calculado pela Eq. 4.48

$$\vec{f}_{u,p} = -\frac{1}{V_{V.C}} \sum_{n=1}^{N_p} m_{p_n} \left[\frac{d\vec{u}_{p_n}}{dt} - \vec{g} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_{p_n}} \right) \right], \quad (4.48)$$

onde o somatório em n_p está relacionado ao número de partículas computacionais passando por um determinado volume de controle com volume $V_{V.C}$.

CAPÍTULO V

MODELO COMPUTACIONAL

Neste capítulo será mostrada a estrutura do código e algumas das funcionalidades presentes no MFSim, além da estrutura das novas implementações efetuadas durante esse trabalho.

O MFSim é uma ferramenta que permite a engenheiros e pesquisadores realizarem simulações para analisarem o comportamento de sistemas fluidos em diversas aplicações. Como já discutido anteriormente o MFSim oferece uma série de métodos para simulação de escoamento multifásicos, modelagem de turbulência e diferentes condições de contorno. Em geral, o MFSim é uma plataforma de simulação poderosa e versátil.

5.1 Discretização espacial e temporal

A discretização espacial das equações de balanço relativas ao domínio euleriano é realizada com o método de volumes finitos, utilizando uma malha bloco-estruturada deslocada para as componentes da velocidade. Já a discretização temporal é feita por métodos semi-implícitos de segunda ordem, com o passo de tempo que pode ser ajustado dinamicamente durante as simulações para garantir as restrições temporais. Além disso, as equações de balanço de quantidade de movimento linear podem ser discretizadas tanto na forma divergente quanto na forma não divergente, deixando a escolha para o usuário.

5.2 Acoplamento pressão-velocidade

O MFSim usa o método de passos fracionados proposto por Chorin (1968) para acoplar pressão e velocidade. Este método consiste em dois passos: o primeiro passo estima a ve-

locidade através da resolução de um sistema linear, e o segundo passo corrige a pressão. A equação de *momentum* é discretizada usando métodos semi-implícitos de segunda ordem e pode ser expressa tanto na forma divergente quanto na forma não divergente. A velocidade estimada é usada para resolver uma equação de Poisson para obter a correção de pressão. As condições iniciais e de contorno precisam ser especificadas antes de resolver as equações. Finalmente, os sistemas lineares resultantes das equações de balanço podem ser resolvidos com o método multigrid-multinível (VILLAR et al., 2007; LIMA, 2012) ou com a biblioteca PETSc (ABHYANKAR et al., 2018; BALAY et al., 2019).

5.3 Malha bloco-estruturada

O código MFSim é uma plataforma de simulação CFD que resolve a equação de balanço usando uma malha euleriana bloco-estruturada com refinamento adaptativo local. A malha é formada por vários níveis de refinamento e cada nível é composto por blocos de malhas cada vez mais finas (LIMA, 2012).

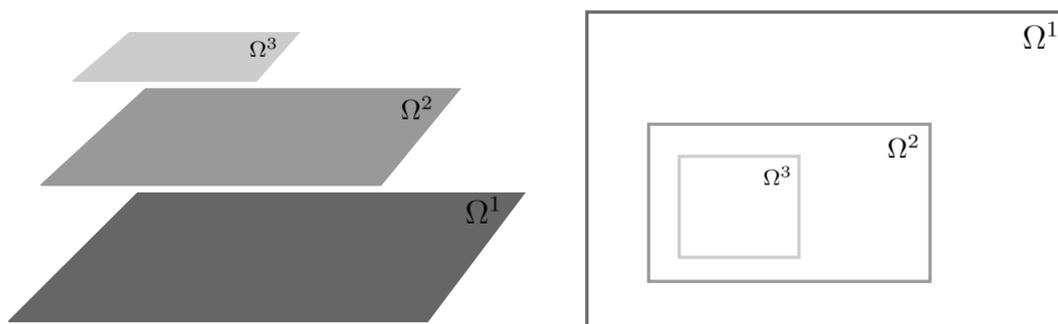


Figura 5.1: Exemplo de malha composta com três níveis de refinamento. Fonte: Santos (2019).

O refinamento é realizado em regiões específicas, como instabilidades no escoamento, turbulências intensas, regiões próximas às paredes, interfaces entre fluidos e presença de partículas, aumentando a precisão numérica e reduzindo o custo computacional (SANTOS, 2019).

A solução é dividida em uma sequência de malhas cartesianas adequadamente refinadas, com critérios de refinamento fixo local ou baseados em gradientes de propriedades do escoamento. O refinamento adaptativo pode ser estático ou dinâmico, ou uma combinação dos dois, e pode usar critérios de vorticidade para refinar a malha em regiões específicas.

Segundo Lima (2012) os cálculos em uma célula específica podem requerer informações de células vizinhas, então células fantasma são criadas para transferir essas informações, e as condições de contorno são aplicadas nas células fantasma nas fronteiras do domínio, com

opções de Dirichlet, Neumann, advectiva e periódica.

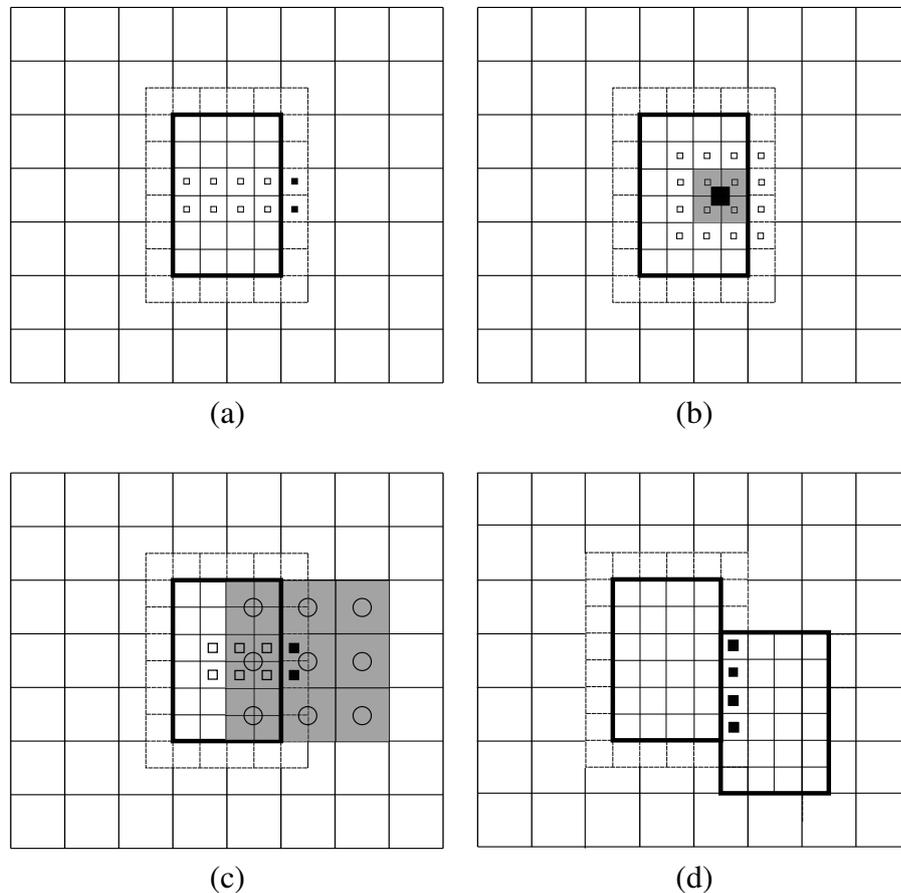


Figura 5.2: Representação esquemática do cálculo das propriedades de células fantasmas: (a) extrapolação cúbica utilizando as propriedades das células do próprio bloco da malha mais fina, (b) interpolação cúbica utilizando as propriedades da malha mais fina para as células do nível abaixo que estão no contorno do bloco da malha mais fina, (c) interpolação quadrática entre as propriedades das células da malha mais fina e da malha logo abaixo e (d) para o preenchimento das células fantasmas entre blocos do mesmo nível de malha, basta que as propriedades sejam transferidas da célula real para a célula fantasma. Fonte: Lima (2012).

5.4 Passo de tempo euleriano

No código MFSim, o tratamento dos termos advectivo e difusivo é feito utilizando os esquemas temporais propostos por Ascher, Ruuth e Wetton (1995) e Wang e Ruuth (2008) (denominados IMEX) que são métodos implícito-explícitos (semi-implícitos). O termo advectivo é tratado de forma explícita para contornar a solução de um sistema não linear, enquanto o termo difusivo é tratado de forma implícita para evitar a necessidade de escolher um passo de tempo muito restritivo. A condição de estabilidade utilizada nas simulações é baseada na condição CFL e o tamanho máximo permitido para o passo de tempo advectivo (Eq. 5.1) é avaliado em

todos os níveis da malha euleriana, escolhendo-se o menor valor.

$$\Delta t_E < C_{\text{CFL}} \Delta t_{adv}, \quad (5.1)$$

onde Δt_E é o passo de tempo euleriano, C_{CFL} é a condição CFL (COURANT; FRIEDRICHS; LEWY, 1967) que assume valores entre 0 e 1, e Δt_{adv} é o tamanho máximo permitido para o passo de tempo advectivo, que é definido por:

$$\Delta t_{adv} = \frac{\Delta x}{|u|_{\text{máx}}} + \frac{\Delta y}{|v|_{\text{máx}}} + \frac{\Delta z}{|w|_{\text{máx}}}, \quad (5.2)$$

no qual Δx , Δy , Δz correspondem ao tamanho do elemento da malha nas direções x , y e z . $|u|_{\text{máx}}$, $|v|_{\text{máx}}$ e $|w|_{\text{máx}}$ são os valores máximos absolutos das três componentes de velocidade.

Como a velocidade do campo de escoamento muda a cada iteração, o passo de tempo euleriano é variável.

5.5 Método da fronteira imersa

Uma das abordagens presentes no MFSim para modelar uma estrutura lagrangiana é o método da fronteira imersa (IBM). Ele permite a modelagem de geometrias complexas na análise de interações fluido-estrutura em simulações CFD, além de poder ser usada como condição de contorno para partículas usando os métodos DPM e DEM, como será mostrado posteriormente.

O Método de Fronteira Imersa, em geral, consiste em trabalhar com uma malha lagrangiana independente para representar uma estrutura sólida imersa em um fluido. No código MFSim, a fronteira imersa é discretizada por uma malha superficial de elementos triangulares.

Existem várias abordagens na literatura para o acoplamento da fronteira imersa com o domínio euleriano. A abordagem usada pela MFSim é conhecida como Método de Multi-Forçagem Direta e é mostrada em detalhes no trabalho de Vedovoto, Serfaty e Neto (2015).

No Método de Multi-Forçagem Direta, as forças externas são aplicadas na malha euleriana para simular a interação da fronteira imersa com o fluido. Essas forças são calculadas a partir da velocidade do fluido e das propriedades da fronteira imersa, como área superficial e coeficiente de arrasto. Em cada iteração, o solver da equação de Navier-Stokes é executado e as velocidades são atualizadas. A partir dessas velocidades, as forças são atualizadas e o processo é repetido

até que convergência seja alcançada.

Este método é considerado eficiente e preciso, especialmente quando comparado a outros métodos de fronteira imersa. No entanto, ele tem um alto custo computacional devido ao número de iterações necessárias para alcançar convergência. A modelagem matemática, e mais informações sobre a implementação deste método no MFSim pode ser encontradas nos trabalhos de Vedovoto (2011), Melo et al. (2017), Neto et al. (2016).

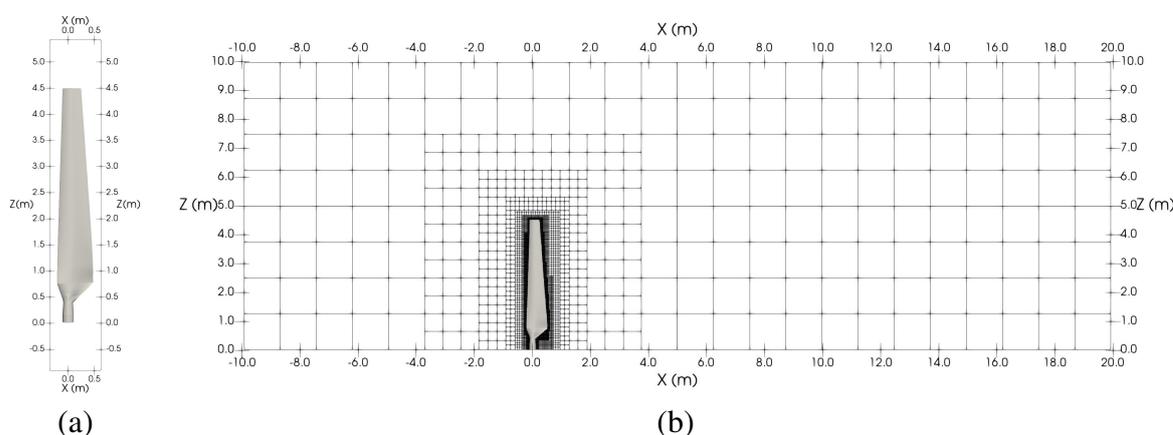


Figura 5.3: Representação de uma pá de turbina eólica através do IBM: (a) vista lateral da fronteira imersa e (b) fronteira imersa aplicada em um domínio euleriano multinível. Fonte: Adaptado de Stival (2022).

A figura 5.3 mostra o uso da IBM para representar uma pá de turbina eólica em uma simulação computacional de interação fluido-estrutura desenvolvida por Stival (2022).

5.5.1 Módulo DPM

Silva (2016) desenvolveu o módulo de partículas discretas no código computacional MFSim em sua tese de doutorado. Este módulo, conhecido como DPM, tem como objetivo principal rastrear a trajetória de cada partícula presente em um escoamento bifásico, seja ela uma gotícula, uma pequena bolha ou um particulado sólido. O principal foco da sua pesquisa foi a modelagem do processo de *breakup* de gotículas presentes em escoamentos gás-líquido.

Com o objetivo de continuar desenvolvendo o módulo DPM, em sua dissertação Santos (2019) teve como principal objetivo desenvolver uma modelagem numérico-computacional para o transporte lagrangiano de partículas em escoamentos turbulentos multifásicos dispersos. Foi então implementada ao código computacional, forças que atuam no transporte de partículas, condições de contorno para as partículas, termo de acoplamento entre fases do escoamento, modelo de colisão partícula-partícula, abordagem para avaliar a interação entre partícula e fron-

teira imersa e um modelo que considera a influência da turbulência na dispersão das partículas.

5.5.2 Integração temporal das equações de balanço

A dinâmica da partícula é determinada por uma série de equações diferenciais ordinárias que descrevem o avanço temporal da posição (\vec{x}_p), velocidade linear (\vec{u}_p) e velocidade angular ($\vec{\omega}_p$) da partícula. Essas equações são transformadas em equações algébricas através de esquemas de integração numérica, usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

A forma geral de uma equação ordinária diferencial de primeira ordem é dada pela Eq. 5.3.

$$\frac{d\phi}{dt} = f(\phi, t), \quad (5.3)$$

sendo ϕ uma variável arbitrária associada à partícula, como \vec{x}_p , \vec{u}_p ou $\vec{\omega}_p$, e $f(\phi, t)$ uma função dada dependente da variável ϕ e do tempo t .

Ao aplicar o método de Runge-Kutta de quarta ordem na equação geral, a expressão para ϕ no novo passo de tempo é obtida através da Eq. 5.4.

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) |^n \Delta t, \quad (5.4)$$

onde os coeficientes da equação são definidos como:

$$k_1 = f(\phi, t), \quad (5.5a)$$

$$k_2 = f\left(\phi + \frac{\Delta t}{2} k_1, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (5.5b)$$

$$k_3 = f\left(\phi + \frac{\Delta t}{2} k_2, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (5.5c)$$

$$k_4 = f(\phi + \Delta t k_3, t + \Delta t). \quad (5.5d)$$

5.5.3 Passo de tempo lagrangiano

O passo de tempo lagrangiano é limitado considerando tempos característicos locais relevantes em escoamentos gás-sólido, sendo elas:

- Tempo requerido para uma partícula atravessar um volume de controle ($t_{V.C}$);
- Tempo de resposta da partícula (τ_p);
- Tempo integral da turbulência lagrangiana (T_L);
- Tempo médio entre colisões de partículas (τ_c).

Ressalta-se que para formulação DPM é necessário o garantir que ocorram apenas colisões binárias dentro de um único passo de tempo.

O passo de tempo lagrangiano para o modelo DPM é obtido com base no menor valor desses tempos característicos como mostrado na Eq. 5.6. E de acordo com a sugestão de Sommerfeld et al. (2017), esse passo de tempo pode ser calculado como uma fração, aproximadamente 20%, do menor valor encontrado.

$$\Delta t_L = 0,2 \cdot \min(t_{V.C}, \tau_p, T_L, \tau_c). \quad (5.6)$$

Se o passo de tempo lagrangiano (Δt_L) for da mesma ordem que o passo de tempo Euleriano (Δt_E), a resolução das equações de balanço da fase dispersa é realizada logo após a resolução do campo de escoamento da fase contínua, na mesma iteração e com o mesmo passo de tempo.

Contudo, se o passo de tempo lagrangiano for significativamente menor que o passo de tempo euleriano, serão necessárias sub-iterações para a resolução dos cálculos lagrangianos (Sommerfeld et al. 2017). Enquanto o esquema numérico da fase particulada é resolvido em vários passos de tempo, a fase fluida é resolvida previamente e mantém-se em um estado "congelado" até o final do processo iterativo lagrangiano (veja a fig. 5.4).

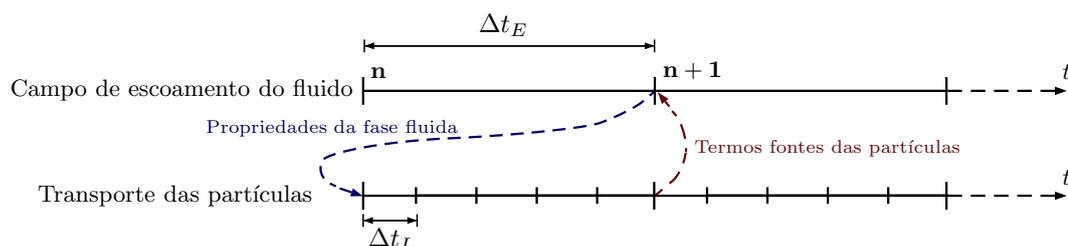


Figura 5.4: Ilustração das sub-iterações do passo de tempo lagrangiano. Fonte: Santos (2019).

5.5.4 *Condições de contorno do domínio lagrangiano*

Dependendo do problema a ser modelado, diferentes condições de contorno podem ser necessárias. No código MFSim, as partículas que saem da fronteira do domínio são simplesmente excluídas da estrutura de dados. No entanto, quando a física ou geometria específica requerem tratamento para condições de simetria, periodicidade e interação partícula-parede, as posições das partículas e componentes de suas velocidades são modificadas para atender a essas condições.

Quando a simetria é imposta em uma das fronteiras, a componente normal da velocidade linear é invertida em relação a essa fronteira. Se a periodicidade é considerada em uma das direções coordenadas, ao atravessar a fronteira correspondente, a partícula é reinjetada no lado oposto. A interação partícula-parede já foi discutida em uma seção anterior, e mais detalhes são apresentados em outra seção.

Ao iniciar uma simulação, há duas opções: preencher o domínio computacional com um número determinado de partículas ou aplicar a condição de entrada em uma das fronteiras. A condição de entrada foi implementada para modelar a injeção de partículas, e alguns parâmetros de entrada precisam ser definidos: massa de partículas injetadas, geometria da injeção e distribuição do tamanho das partículas.

A quantidade de partículas injetadas pode ser determinada com base na massa de partículas injetadas. Em casos de partículas monodispersas, com diâmetro constante, o número de partículas é obtido diretamente. Em casos polidispersos, com partículas de tamanhos diferentes, o número de partículas é determinado pela distribuição escolhida para o tamanho das partículas.

5.5.5 *Algoritmo de colisão*

A identificação das colisões entre partículas é realizada usando uma modelagem determinística, na qual a possibilidade de colisão é determinada analisando a trajetória das partículas. Para reduzir o custo computacional, um algoritmo de buscas limitado a procura por possíveis parceiras de colisão à células próximas no mapa lagrangiano foi implementado por Santos (2019).

A detecção de colisões entre partículas e elementos triangulares (pontos lagrangianos) pertencentes à fronteiras imersas é realizada por um algoritmo cuja chave é encontrar o ponto de interseção entre a reta da trajetória da partícula e o plano do elemento triangular. Para verificar se houve colisão, é necessário comparar a distância percorrida pela partícula com a distância

até o ponto de interseção e checar se o ponto está dentro do elemento triangular, comparando as áreas dos triângulos formados a partir dele.

Ressalta-se que informações detalhadas a respeito dos algoritmos de colisões presentes no módulo DPM podem ser encontradas em Santos (2019).

5.5.6 Estrutura de dados

O MFSim usa uma tabela *hash* multi-nível para representar o mapa lagrangiano. Essa estrutura foi implementada no trabalho de Ferreira (2015) onde, a malha euleriana é composta por células identificadas por índices i_c , j_c e k_c , e cada célula é representada por outra tabela *hash* que contém as partículas.

As partículas são representadas em uma outra tabela, onde, a partir do ID é possível acessar todas as informações relacionadas às mesmas. O pacote UTHASH em linguagem C é usado para criar e manipular as tabelas *hash*.

O código MFSim é altamente escalável devido à sua estrutura paralela, especialmente o módulo DPM, que é projetado para ser altamente paralelizável. A comunicação de dados é feita através do padrão MPI (Message Passing Interface) por meio de funções de envio e recebimento de dados. Cada processo tem um *rank*, que é um tipo de identificador inteiro, e um comunicador, que especifica o domínio de comunicação do grupo de processos.

Há duas formas de comunicação: ponto a ponto e coletiva. A primeira é usada para troca de informações entre processos, enquanto a segunda é usada para operações globais que requerem sincronização. As partículas são particionadas de acordo com a malha euleriana e têm um identificador único, mas conhecido apenas no processo local. A transferência de partículas entre processos é determinada pela sua nova posição após o transporte.

O módulo DPM é composto por três partes principais. A primeira parte é responsável pela inicialização do código, integração com o domínio euleriano e deleção das estruturas de dados das partículas e do mapa lagrangiano ao final das simulações. A segunda parte corresponde ao processo iterativo lagrangiano incorporado ao processo iterativo euleriano. Novas partículas são inseridas no domínio computacional com base no número de partículas por iteração ou na vazão mássica definida como parâmetro de entrada. A terceira parte envolve as funções de rastreamento de partículas, integração temporal das equações de balanço, verificação de colisões, condições de contorno e comunicação entre processos (SANTOS, 2019).

5.6 Implementação do modelo DEM ao MFSim

Para advecção das partículas no domínio lagrangiano e interação entre fases é utilizada toda estrutura computacional já mencionada anteriormente. A integração entre domínio lagrangiano e o processo iterativo lagrangiano são mostrados nas fig. 5.5 e 5.6.

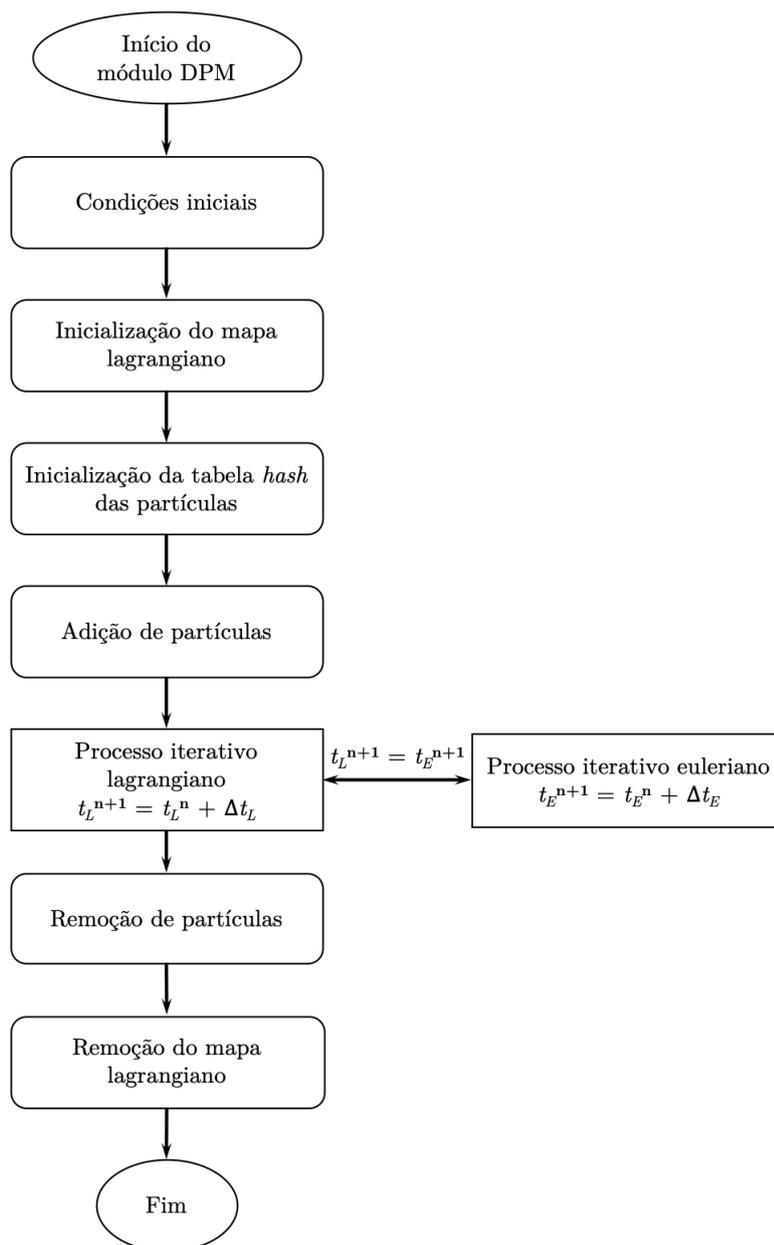


Figura 5.5: Algoritmo de inicialização do módulo DPM mostrando a sua integração com o domínio euleriano. Fonte: Santos (2019).

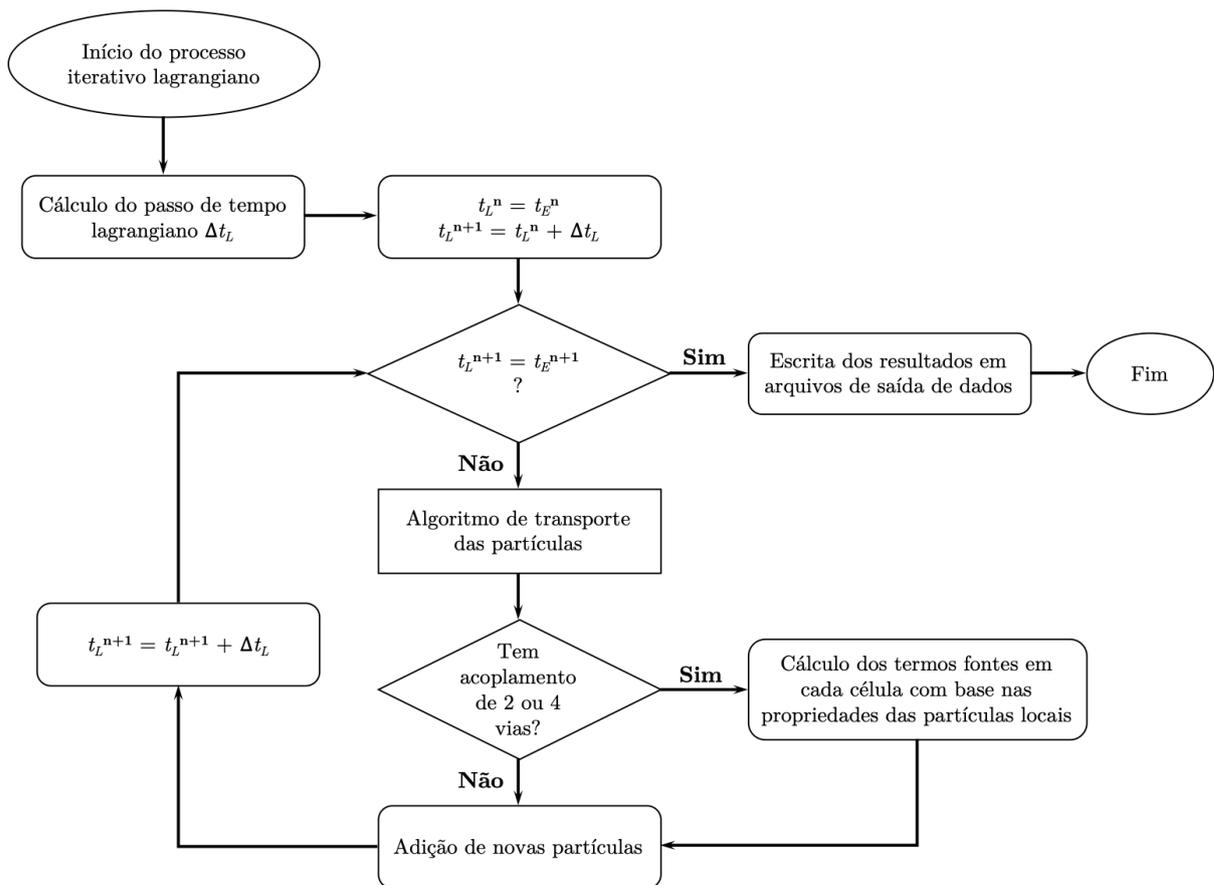


Figura 5.6: Algoritmo do processo iterativo lagrangiano. Fonte: Santos (2019).

Este trabalho tem como objetivo principal a implementação do modelo de colisão de esferas flexíveis no módulo DPM da plataforma MFSim. Esta implementação contribui para o avanço da simulação de sistemas com partículas sólidas em escoamentos multifásicos, permitindo uma análise mais precisa e realista do comportamento das mesmas. O algoritmo utilizado para cálculo das forças de contato é mostrado no fluxograma presente na fig. 5.7.

Diferentemente do modelo DPM, onde primeiro é calculada a advecção das partículas através das forças de campo para então modificar os parâmetros relacionados a velocidade e posição em função das colisões que ocorreram durante sua trajetória, o modelo DEM propõe o cálculo das forças de contato juntamente com as forças de campo para então realizar a advecção das partículas. O esquema da rotina de advecção das partículas para o modelo DEM é mostrado na fig. 5.8.

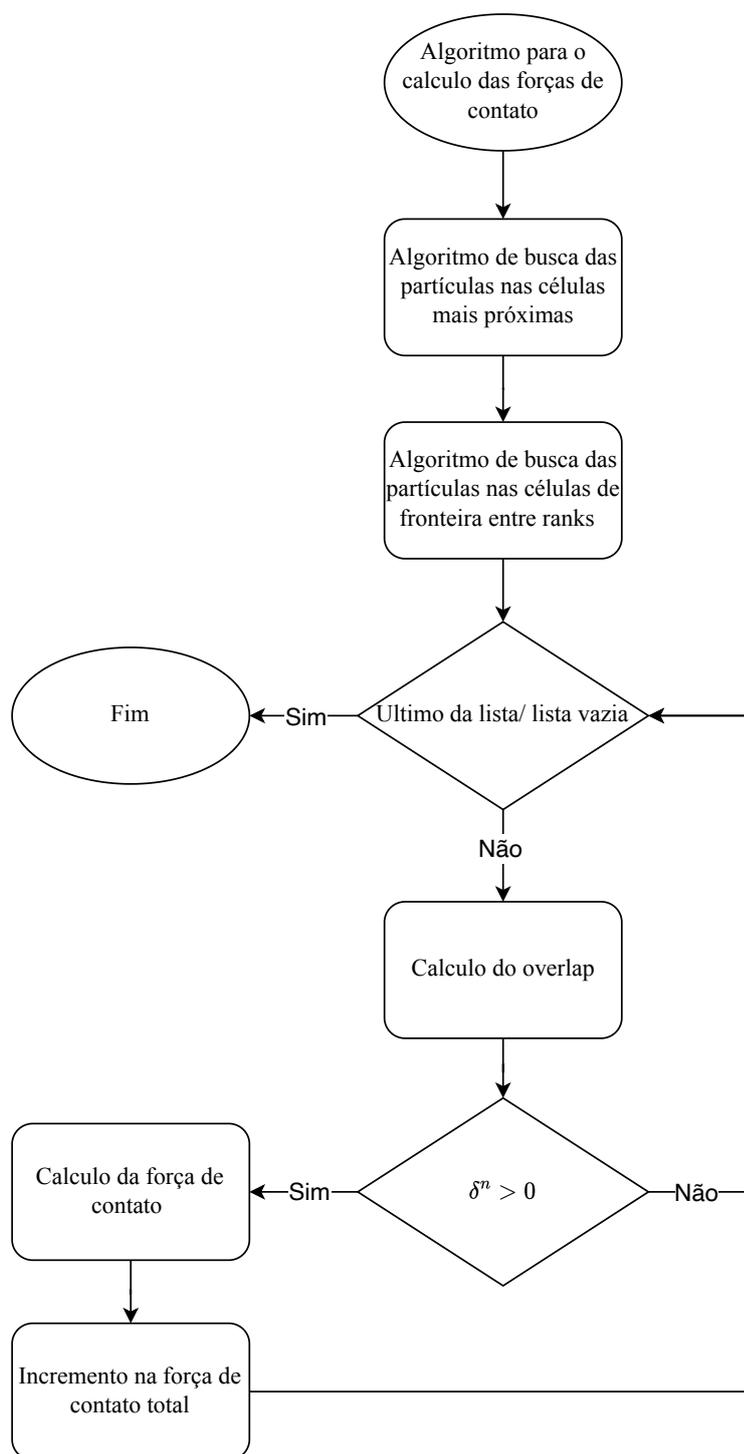


Figura 5.7: Algoritmo para o cálculo das forças de contato.

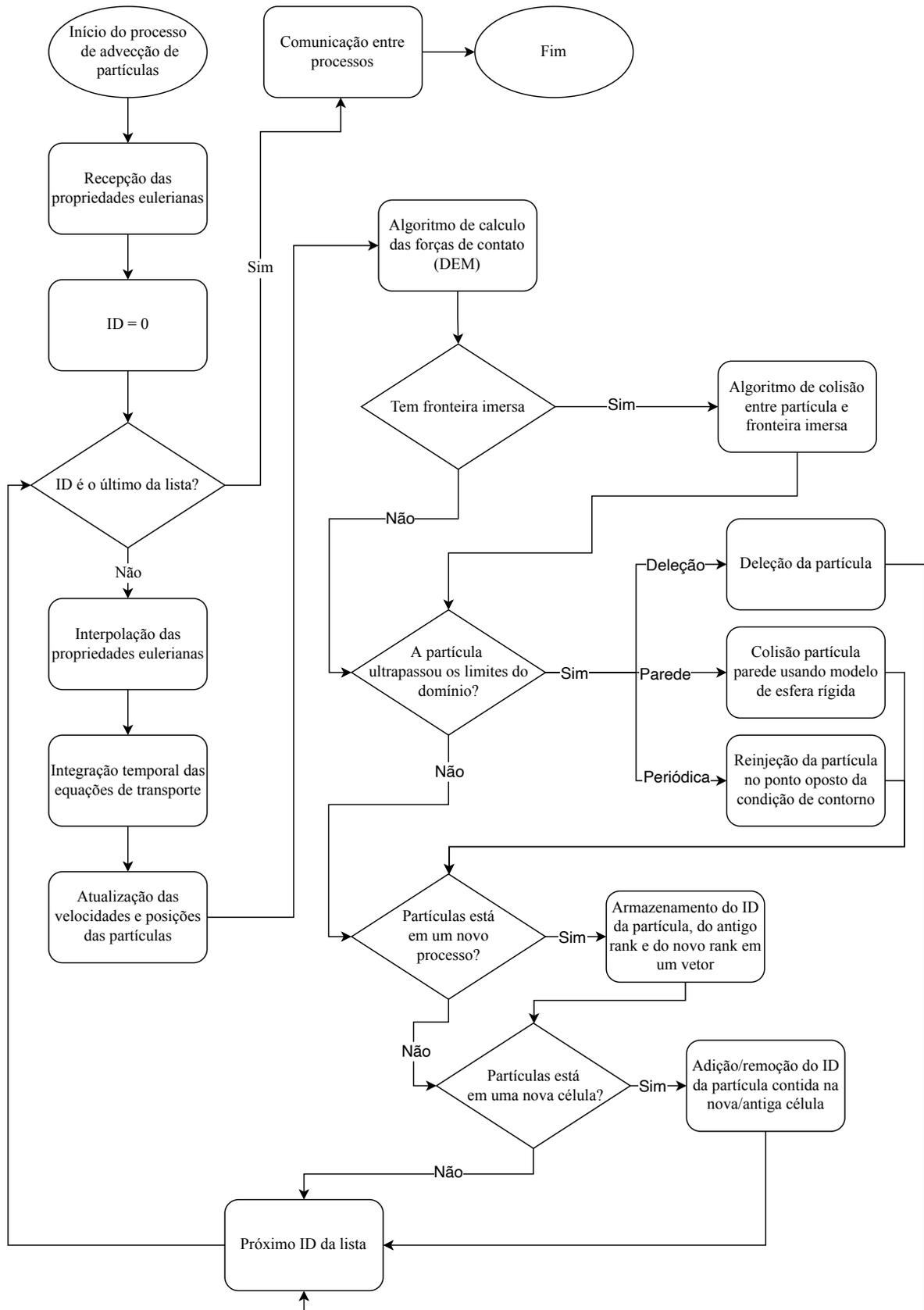


Figura 5.8: Algoritmo do transporte de partículas para o DEM.

Ressalta-se que devido a estrutura computacional do código as forças de contato usadas no passo de tempo atual, são calculadas após a advecção e reatribuição dos parâmetros de posição da partícula no passo de tempo anterior.

A principal desvantagem da metodologia DEM é o alto custo computacional. Isso se deve ao fato de que o DEM requer uma quantidade significativa de cálculos para determinar a interação entre cada partícula com todas as outras em células próximas, e a medida que se aumenta o número de partículas em uma simulação, o crescimento do custo computacional é exponencial. Visto isso, foi implementado ao MFSim uma rotina adaptativa para a simulação de escoamentos multifásicos com particulado.

A fração volumétrica da fase dispersa (α_d) indica a proporção de partículas em relação ao volume total do escoamento nas células computacionais. Ela é usada para determinar a probabilidade de colisão entre partículas, o que é crucial para prever o comportamento da mistura de fluido e partículas. Assim, de acordo com o valor de α_p , é decidida a necessidade do uso do algoritmo para cálculo das forças de contato ou o algoritmo de colisão entre partículas, ou ainda se não será necessário utilizar nenhum destes algoritmos.

O modelo de esfera rígida é utilizado em situações em que a fração volumétrica de sólidos é relativamente baixa, enquanto o modelo de esfera flexível é mais apropriado quando a fração volumétrica é elevada. O fluxograma em que esse algoritmo é descrito é mostrado na fig. 5.9.

Essa rotina tem o objetivo de otimizar o processo de advecção das partículas, de modo a minimizar o custo computacional sem assim prejudicar a qualidade das informações processadas.

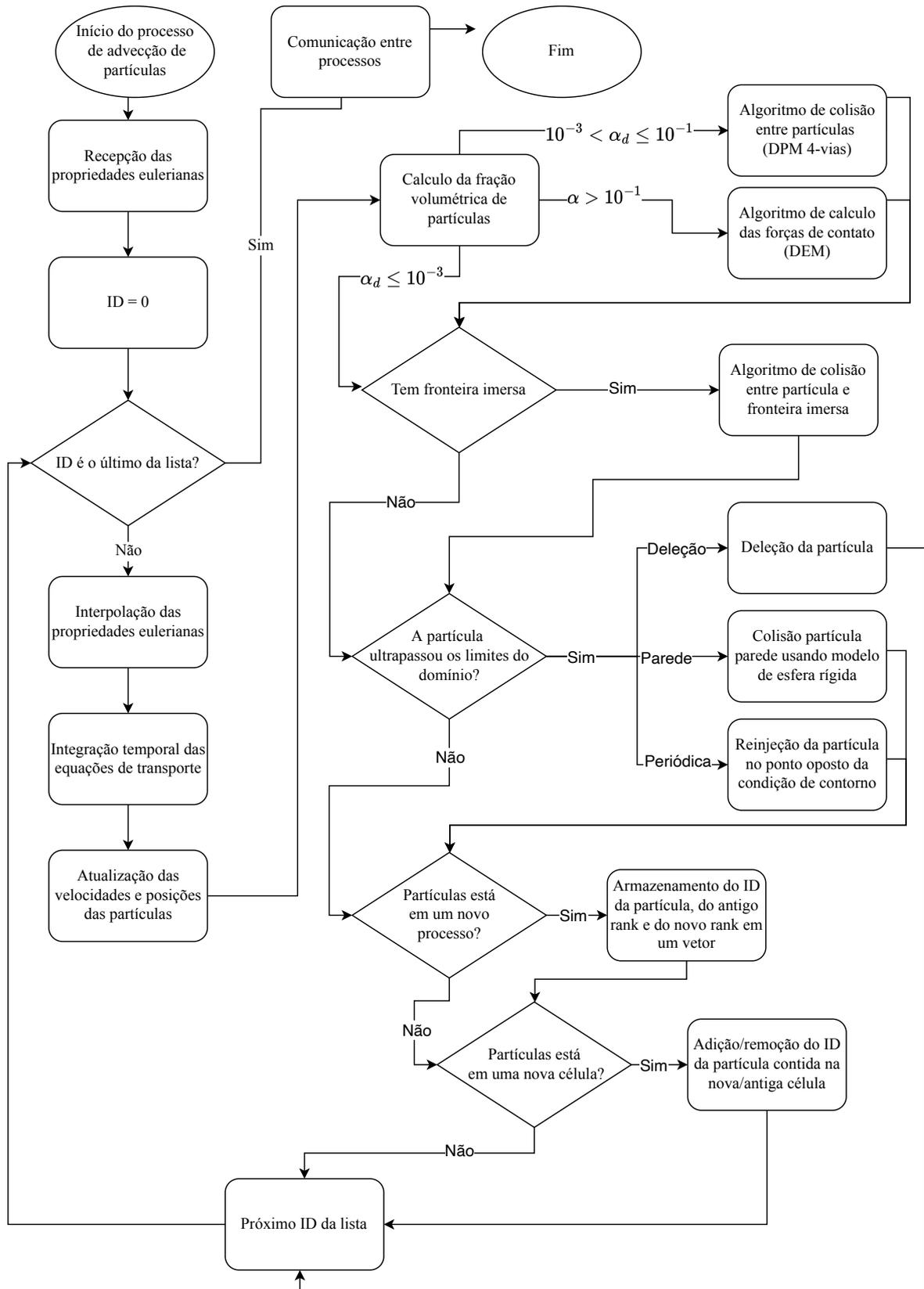


Figura 5.9: Algoritmo do transporte de partículas Adaptativo.

CAPÍTULO VI

VALIDAÇÃO DO MODELO DE COLISÃO

O modelo DEM foi implementado na plataforma computacional MFSim e alguns teste iniciais foram realizados. Como previamente discutido, o modelo DPM com acoplamento 1-via destina-se à simulações de escoamentos diluídos onde não há colisão entre partículas, podendo as mesmas eventualmente ocuparem o mesmo lugar no espaço. Já o modelo DPM com acoplamento 4-vias é utilizado em escoamentos regidos por colisão e tende a ter um comportamento difusivo onde ocorre o espalhamento das partículas, mas devido ao fato de que as partículas são tratadas como pontos infinitesimais, ainda é possível que ocasionalmente as mesmas ocupem o mesmo lugar no espaço. Por fim, o modelo DEM trata as partículas como volumes, sendo indicado para escoamentos regidos pelo contato como no caso descrito pela presente tese, onde a altura de deposição é fator preponderante. Na figura 6.1 é ilustrada as características de cada método.

As características geométricas das partículas são fatores que afetam significativamente o resultado das simulações utilizando o modelo DEM. Como pode ser observado na fig. 6.2, e como esperado, há uma maior compactação do volume da pilha na deposição de partículas com diâmetros variáveis em comparação à uma deposição de partículas de diâmetro fixo.

Com o intuito de validar o modelo de esferas flexíveis (DEM) implementado ao MFSIM, reproduziu-se o experimento apresentado no artigo (AI et al., 2011). O experimento consiste em avaliar o ângulo de deposição das partículas após o descarte das mesmas a partir de um funil com bocal de diâmetro 55 mm. O funil a partir do qual é efetuado o descarte de partículas é representado por uma malha 2d e é considerada dentro da simulação através do método de fronteira imersa. Mais informações a respeito das características geométricas do experimento

são mostradas na fig. 6.3, já as características físicas do problema são mostrados na tab. 6.1.

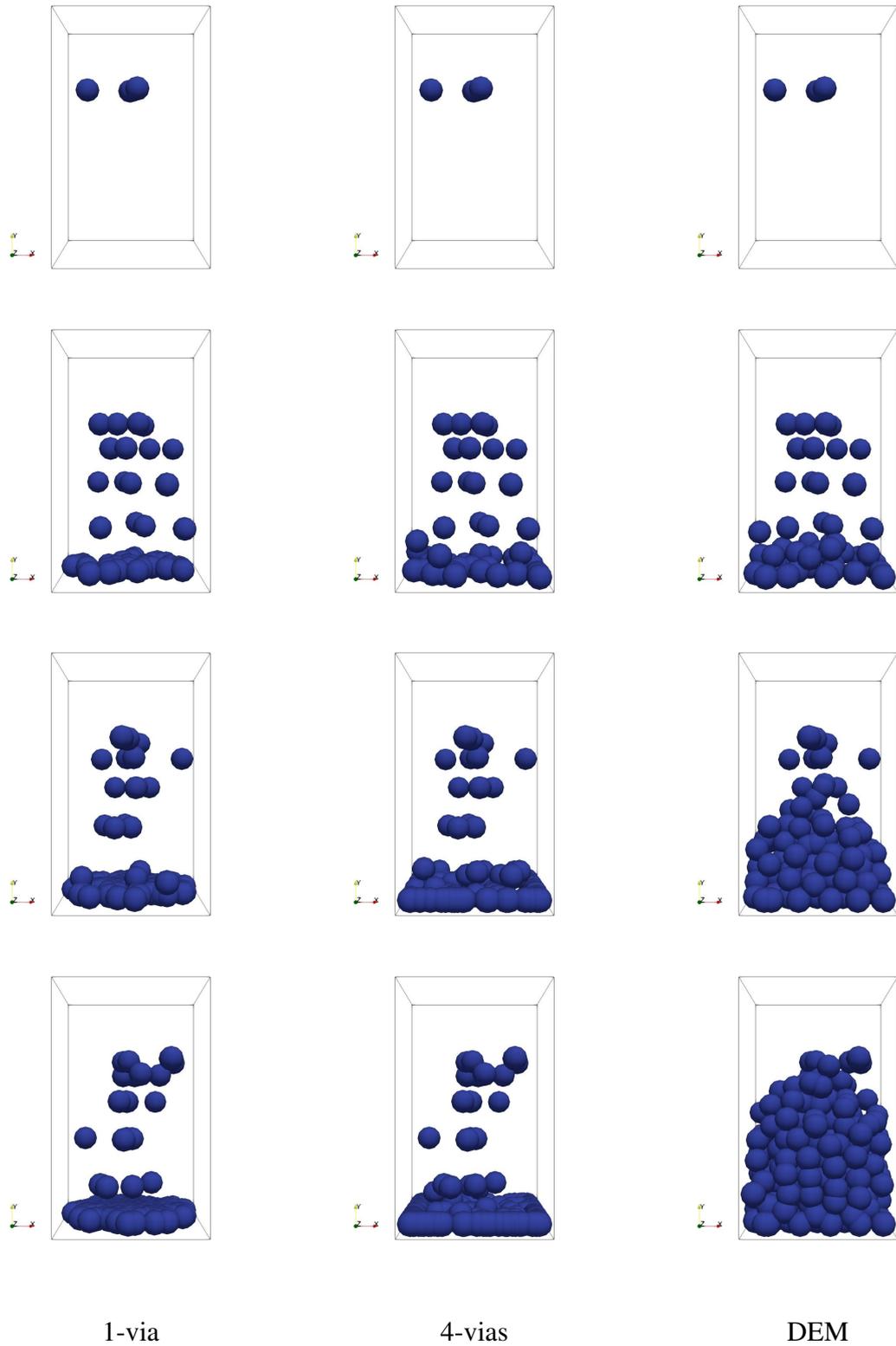


Figura 6.1: Comparação entre os modelos DPM com acoplamento 1-via, DPM com acoplamento 4-vias e DEM.

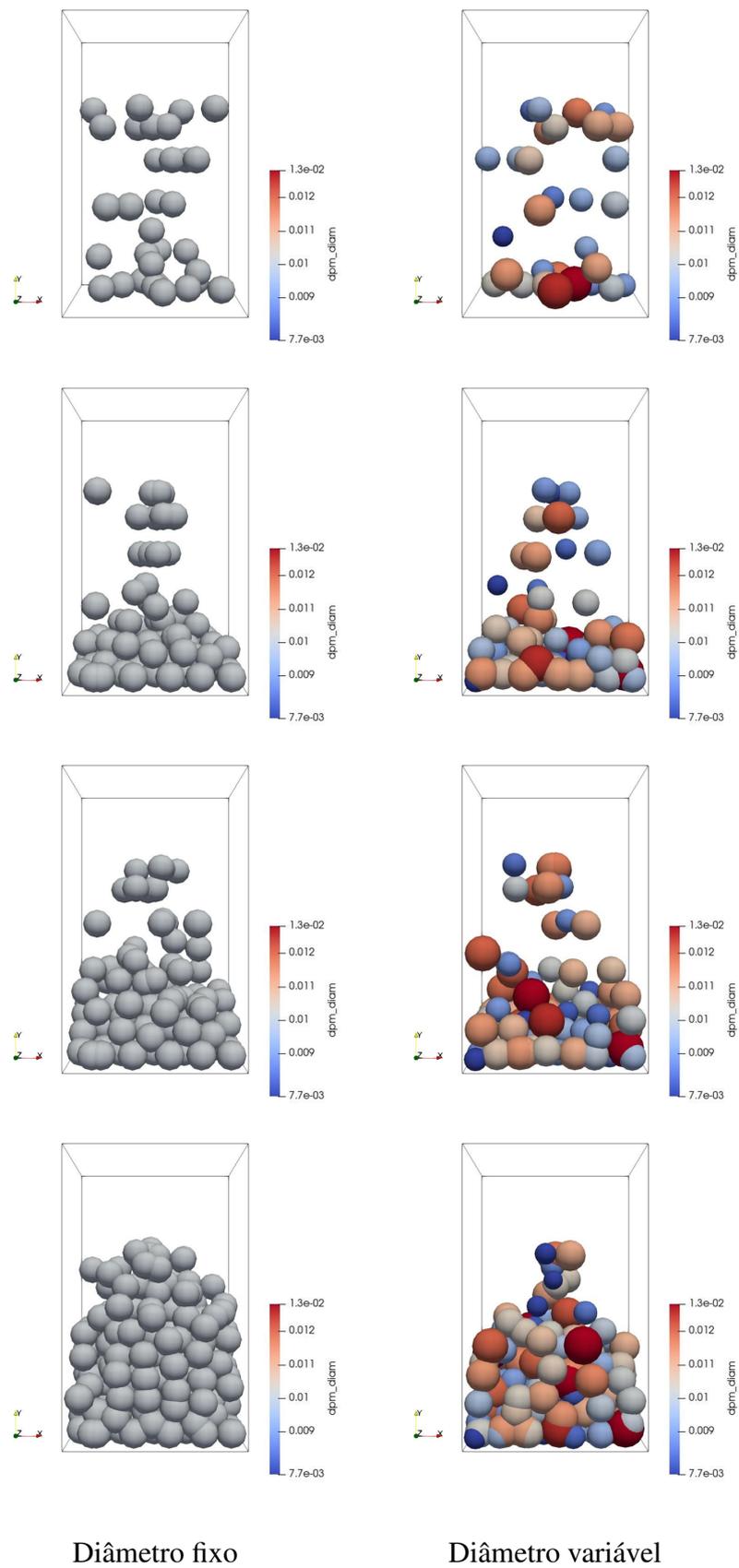


Figura 6.2: Comparação entre o modelo DEM com partículas de diâmetro fixo e variável.

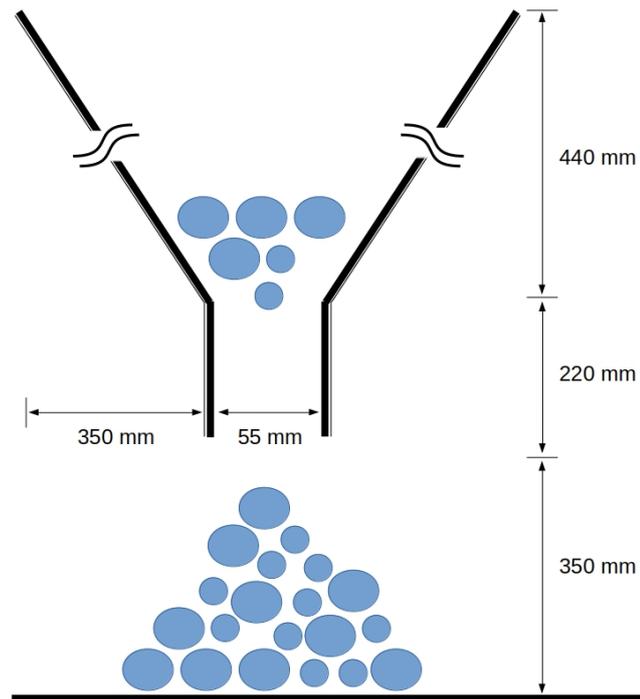


Figura 6.3: Experimento numérico de deposição de partículas.

O fluido que preenche o domínio é o ar com massa específica de $1,27 \text{ kg/m}^3$ e viscosidade de $17,2 \times 10^{-6} \text{ P}$. O domínio computacional foi considerado como uma caixa onde as condições de contorno para o fluido são impostas como velocidade nula em todas as paredes, já as condições de contorno para as partículas foram impostas como não deslizamento para a parede sul, e deleção para todas as outras paredes.

Tabela 6.1: Parâmetros da simulação de validação do modelo de colisão entre partículas.

Propriedade	Valor
Número de partículas, N_p	3000
Diâmetro médio, $D_p \mu\text{m}$	7,27 mm
Massa específica, ρ_p	1056 kg/m^3
Módulo de Elasticidade, E_p	4 MPa
Coefficiente de Poisson, ν	0,49
Coefficiente de restituição, e	0,3
Coefficiente de fricção estático, ν_e	0,8
Coefficiente de fricção dinâmico, ν_d	0,3
Coefficiente de amortecimento viscoso, η	0,3 Ns/m

O resultado obtido por meio de simulações com o MFSim é mostrado na fig. 6.4, e pode ser comparado com os resultados mostrados em (AI et al., 2011) (fig. 6.5).

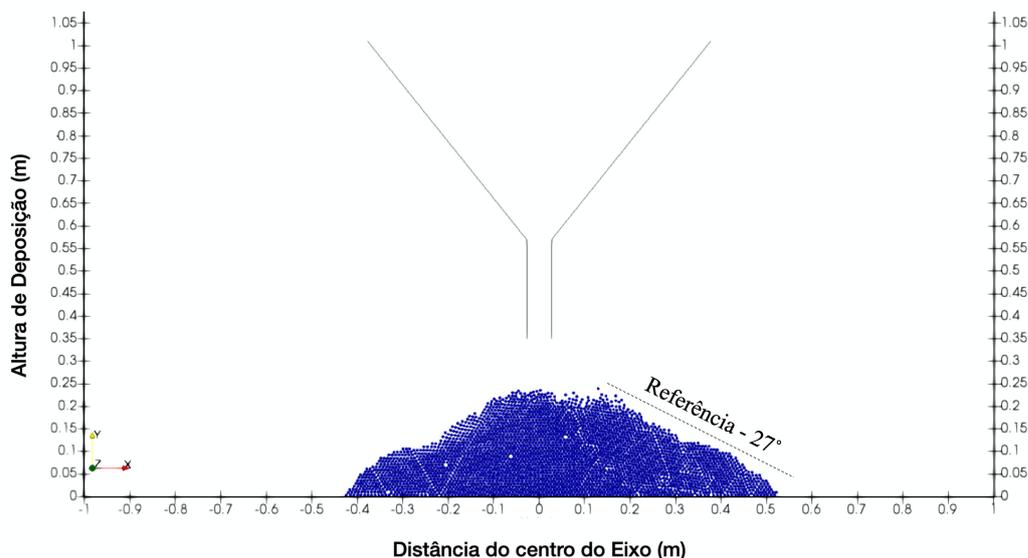


Figura 6.4: Resultado obtido pelo MFSim para a simulação do caso de validação.

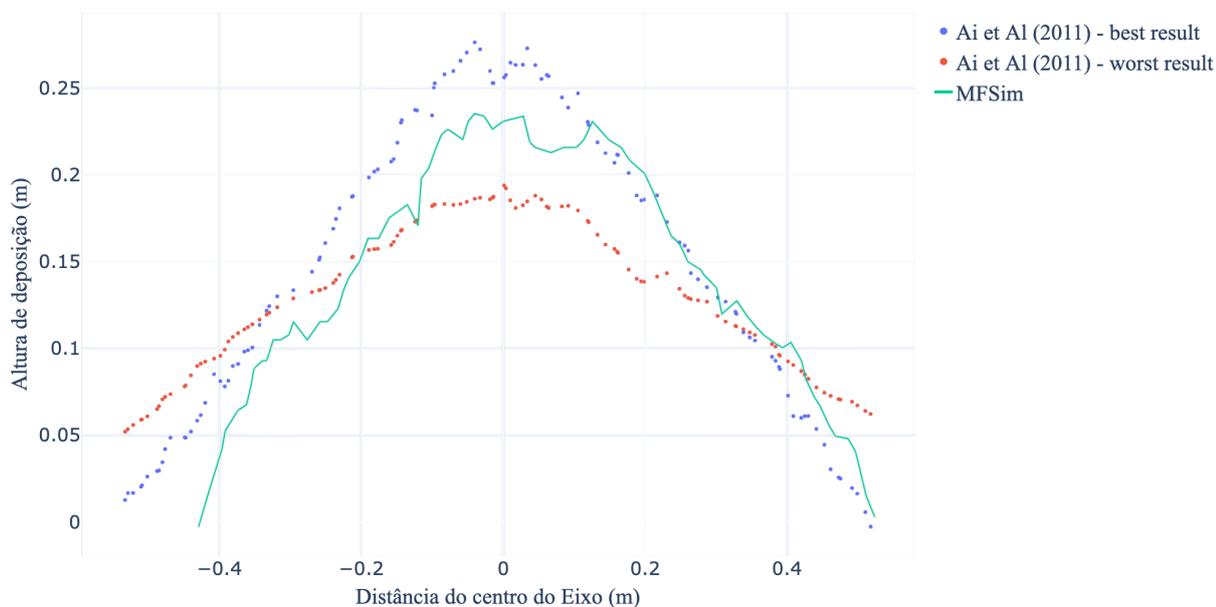


Figura 6.5: Comparação dos resultados obtidos pelo MFSim com resultados da literatura.

Como discutido anteriormente o fator preponderante para essa validação é o ângulo de deposição da pilha que deve ser de aproximadamente 27° , o resultado da simulação usando o MFSim obteve uma boa concordância com os resultados mostrados na literatura uma vez que

com a altura de deposição de 0.23 m e raio da pilha de aproximante 0,45m, o angulo medido é de 27,072° (veja a fig. 6.5).

Após validar o modelo implementado com resultados da literatura, foi verificado o ganho computacional do modelo adaptativo para escoamentos multifásicos particulados. Na fig. 6.6 observa-se um descarte de partículas em um domínio quadrado utilizando o modelo adaptativo. Então, o tempo necessário para uma simulação de 60 segundos foi comparado com a mesma simulação utilizando somente o modelo DEM. As partículas foram injetadas em um domínio contendo ar, com o fluido estático e com todas as condições de contorno de Neumann (derivada nula). A partículas foram introduzidas com uma vazão volumétrica constante em uma entrada circular, as condições de contorno para as mesmas consiste em não deslizamento para a parede sul e deleção para todas as outras paredes.

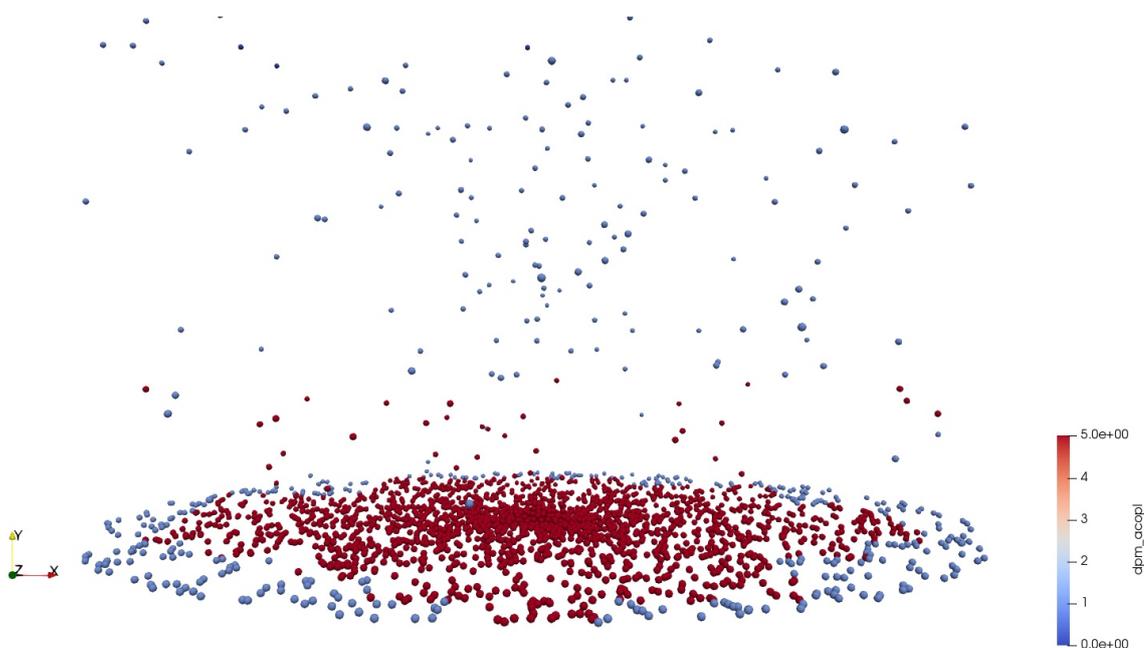


Figura 6.6: Descarte de partículas em um domínio quadrado utilizando modelo adaptativo. As partículas em vermelho estão sendo resolvidas com modelo DEM enquanto as partículas azuis são resolvidas com modelo DPM-1V

Durante a simulação de 60 segundos, foram injetadas 67 mil partículas no domínio computacional. Para o modelo DEM, foram necessárias 135 horas, utilizando 4 processadores e 1 GB de RAM, com um tempo final de 210 segundos por iteração. Já para o modelo adaptativo, foram necessárias 58 horas, utilizando 4 processadores e 1 GB de RAM, com um tempo final de 85 segundos por iteração. Assim o modelo adaptativo obteve um ganho computacional de cerca de 60% com relação o modelo puramente DEM.

CAPÍTULO VII

MODELOS DE MACHINE LEARNING

Um modelo de *Machine Learning* é um algoritmos que aprende padrões de comportamentos a partir de uma base de dado, e é capaz de fazer previsões e tomar decisões estratégicas (MITCHELL, 1997), podendo ainda usar sua própria experiência para aprender e aprimorar seus resultados através do aprendizado por reforço (WATKINS, 1989).

Os modelos de ML são derivados de métodos e teorias estatísticas e podem ser aplicados como classificadores, onde o intuito é categorizar e subdividir conjuntos de dados, ou como regressores, onde se pretende obter uma valor específico.

Esta é uma tecnologia emergente que tem sido aplicada com sucesso em uma ampla variedade de aplicações, incluindo simulações científicas e engenharia. Em simulações multifásicas, o ML pode ser usado de várias maneiras, incluindo a otimização de modelos, a aceleração de simulações e a identificação de padrões em dados complexos. O que nos permite, por exemplo, que sejam identificados parâmetros ideais para simulações futuras, resultando em simulações mais precisas e eficientes.

Nesta tese foram usados os dados das simulações para validação do modelo DEM (38 mil amostras), mostrada no capítulo anterior, para treinamento de modelos de máquina de vetores de suporte (*Support Vector Machine - SVM*) e rede neural perceptron multicamadas (*Multi-layer Perceptron - MLP*). Com o intuito de substituir os algoritmos de cálculo das forças de contato (DEM), permitindo que sejam realizadas simulações com um menor custo computacional.

O MLP (Multi Layer Perceptron) é um tipo de modelo de rede neural artificial que tem a capacidade de modelar relações não lineares entre os dados. Isso o torna uma opção atraente para a resolução de problemas que envolvem previsões baseadas em dados complexos. Além

disso, o MLP é capaz de aprender a partir dos dados, sem a necessidade de uma programação específica, o que o torna altamente flexível.

Já o SVR (Support Vector Regression) é um modelo de aprendizado de máquina que utiliza técnicas de aprendizado supervisionado para realizar previsões. Ele é conhecido por ser altamente preciso e eficiente na solução de problemas de regressão, especialmente quando os dados são complexos ou não linearmente separáveis. Além disso, o SVR é capaz de lidar com problemas de dados com ruído, o que o torna uma opção atraente para a resolução de problemas reais.

Ambos os modelos têm vantagens únicas em relação a outros modelos de machine learning, o que os torna opções atraentes para a solução de diferentes tipos de problemas de previsão. O uso destas técnicas ainda é recente na área de CFD, e esse trabalho é o precursor deste tipo de análise usando a plataforma MFSim. Os modelos aqui desenvolvidos poderão ser usados futuramente para ajustes e até mesmo na completa substituição de modelos de colisão e contanto dentro do código MFSim.

7.1 Modelo SVM aplicado a simulações multifásicas

Um algoritmo bastante popular de machine learning que pode ser usado tanto para classificação, quanto regressão de dados é o SVM - *Support Vector Machine*. Em geral, sua utilização é recomendada para um conjunto de dados complexos de quantidade pequena à intermediária.

O modelo de classificação busca a adequação de uma linha, também chamada de hiperplano, entre as classes, no intuito de maximizar a distância da linha até os pontos das classes. A fig. 7.1 mostra uma representação simplificada da separação de classes conforme o modelo de SVM.

Nota-se que os vetores de suporte são os pontos que se encontram mais próximos ao hiperplano, e a margem pode ser entendida como a distância entre os vetores de suporte e o hiperplano.

No espaço bidimensional, esse hiperplano é uma linha que divide o plano em duas partes, para um conjunto de dados tridimensional, o hiperplano é de fato um plano. E assim sucessivamente (GÉRON, 2021).

A classificação oferece suporte para espaços lineares e não lineares através de um truque de *kernel*, do inglês *Kernel Trick*. Isso significa que é possível criar uma fronteira de decisão em uma nova dimensão a partir da minimização de uma fórmula, ou seja, o *kernel* é responsável

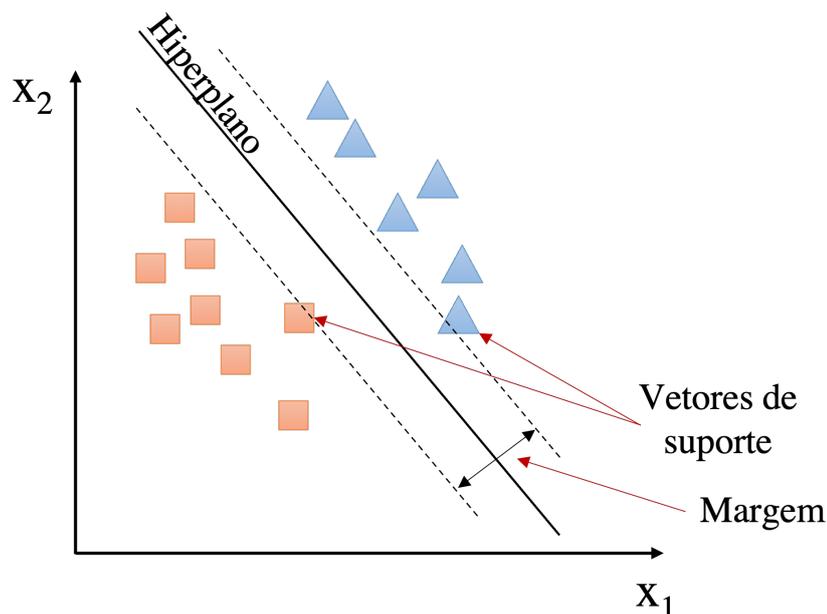


Figura 7.1: Divisão de classes através de um hiperplano - SVM.

por transformar os dados de entrada no formato necessário. Alguns dos *kernels* usados no SVM são lineares, polinomiais e radiais (função de base) (HARRISON, 2020):

- Polinomial - $K(a, b) = (ab + 1)^d$;
- *Radial Basis Function* (RBF) - $K(a, b) = e^{(-\gamma \|a-b\|^2)}$;
- Sigmoide - $K(a, b) = \tanh(\kappa ab + c)$;

Observe que a função *kernel* é um tipo de função de similaridade entre dois vetores em que a saída da função é maximizada quando os dois vetores se tornam equivalentes (YU; KIM, 2012).

Estes conceitos da classificação a partir da separação de classes foi inicialmente proposto por Cortes e Vapnik (1995).

Como mencionado, o SVM é também compatível com a regressão linear e não linear. O algoritmo usado para regressão é uma generalização do algoritmo *Generalized Portrait* desenvolvido por Vapnik e Lerner (1963).

O SVR - *SVM Regression* é um método para estimar uma função que mapeia um objeto de entrada para um número real com base em dados de treinamento. Da mesma forma que o classificador SVM, o SVR tem as mesmas propriedades de maximização de margem e truque

de *kernel*. Um conjunto de treinamento para regressão é representado pela Eq. 7.1:

$$D = (\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m) \quad (7.1)$$

onde \mathbf{x}_i é um vetor n -dimensional, y_i é o número real para cada \mathbf{x}_i .

A função SVR $F(\mathbf{x}_i)$ faz um mapeamento de um vetor de entrada \mathbf{x}_i para o alvo y_i conforme mostrado na Eq. 7.2, cuja representação é uma reta (função linear):

$$F(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\mathbf{x} + b \quad (7.2)$$

onde \mathbf{w} é o vetor de peso e b é o bias. O objetivo é estimar os parâmetros (\mathbf{w} e b) da função que fornecem o melhor ajuste dos dados. Uma função SVR $F(\mathbf{x})$ aproxima todos os pares (\mathbf{x}_i, y_i) enquanto mantém as diferenças entre os valores estimados e os valores reais sob a precisão ε (tolerância). Ou seja, para cada vetor de entrada \mathbf{x} em D :

$$\begin{cases} y_i - \mathbf{w}\mathbf{x}_i - b \leq \varepsilon \\ \mathbf{w}\mathbf{x}_i + b - y_i \leq \varepsilon \end{cases} \quad (7.3)$$

A margem é representada pela Eq. 7.4.

$$\frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \quad (7.4)$$

Ao minimizar $\|\mathbf{w}\|^2$ para maximizar a margem, o treinamento em SVR torna-se um problema de otimização restrita como segue:

$$\text{minimizar : } L(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad \text{limitado por : } \begin{cases} y_i - \mathbf{w}\mathbf{x}_i - b \leq \varepsilon \\ \mathbf{w}\mathbf{x}_i + b - y_i \leq \varepsilon \end{cases} \quad (7.5)$$

A fig. 7.2 mostra uma representação do problema linear de regressão que simboliza o procedimento adotado pelo SVR.

A solução deste problema não permite erros. Para permitir que alguns erros lidem com o ruído nos dados de treinamento, o SVR de margem suave usa variáveis de folga ξ e ξ^2 . Então,

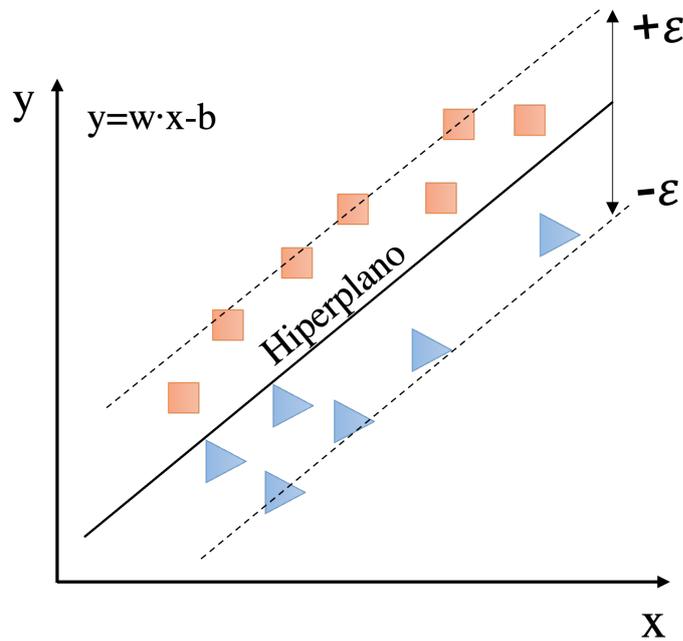


Figura 7.2: Regressão linear através de um hiperplano - SVR.

o problema de otimização pode ser revisado conforme a Eq. 7.6.

$$\begin{aligned}
 & \text{minimizar : } L(\mathbf{w}, \xi) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_i (\xi_i^2, \xi_i^{*2}), C > 0 \\
 & \text{limitado por : } \begin{cases} y_i - \mathbf{w}\mathbf{x}_i - b \leq \varepsilon + \xi_i, \quad \forall (\mathbf{x}_i, y_i) \in D \\ \mathbf{w}\mathbf{x}_i + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^*, \quad \forall (\mathbf{x}_i, y_i) \in D \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0 \end{cases} \quad (7.6)
 \end{aligned}$$

A constante $C > 0$ é o parâmetro de compensação entre o tamanho da margem e a quantidade de erros. As variáveis de folga ξ e ξ^2 lidam com restrições inviáveis do problema de otimização impondo a penalidade aos desvios em excesso maiores que ε . A fig. 7.3 representa esta condição, onde estes parâmetros são evidenciados com relação ao hiperplano.

Para resolver o problema de otimização da Eq. 7.6, podemos construir uma função de Lagrange a partir da função objetivo com multiplicadores de Lagrange da seguinte forma:

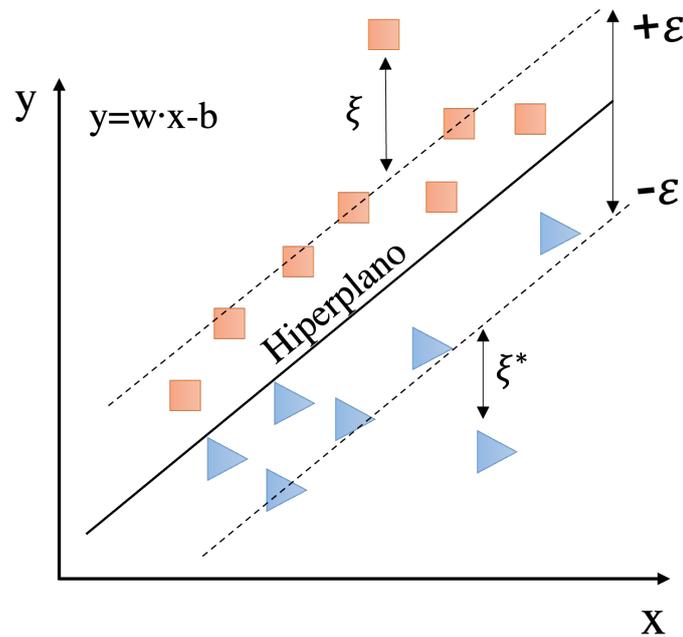


Figura 7.3: Regressão linear através de um hiperplano com variáveis de folga - SVR.

$$\begin{aligned}
 \text{minimizar : } L(\mathbf{w}, \xi) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_i (\xi^2, \xi^{*2}) - \sum_i (\eta_i \xi, \eta_i^* \xi^*) \\
 &\quad - \sum_i \alpha_i (\varepsilon + \eta_i - y_i + \mathbf{w} \mathbf{x}_i + b) \\
 &\quad - \sum_i \alpha_i^* (\varepsilon + \eta_i^* + y_i - \mathbf{w} \mathbf{x}_i - b)
 \end{aligned} \tag{7.7}$$

$$\text{limitado por : } \begin{cases} (\eta_i, \eta_i^*) \geq 0 \\ (\alpha_i, \alpha_i^*) \geq 0 \end{cases}$$

onde $\eta_i, \eta_i^*, \alpha_i, \alpha_i^*$ são os multiplicadores de Lagrange que satisfazem restrições positivas. A seguir está o processo para encontrar o ponto de sela usando as derivadas parciais de L em relação a cada multiplicador lagrangiano para minimizar a função L .

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial L}{\partial b} &= \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\
 \frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} &= \mathbf{w} - \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{x}_i = 0, \quad \mathbf{w} = \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{x}_i \\
 \frac{\partial L}{\partial \xi_i^*} &= C - \alpha_i^* - \eta_i^* = 0, \quad \eta_i^* = C - \alpha_i^*
 \end{aligned} \tag{7.8}$$

O problema de otimização com restrições de desigualdade pode ser alterado para o seguinte

problema de otimização dupla substituindo a Eq. 7.8 na 7.7. As variáveis duais η_i, η_i^* são eliminadas nesse processo e tem-se que:

$$\begin{aligned} w &= \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{x}_i \\ \eta_i &= C - \alpha_i \\ \eta_i^* &= C - \alpha_i^* \end{aligned} \tag{7.9}$$

onde w é representado por uma combinação linear dos vetores de treinamento \mathbf{x}_i . Assim, a função SVR $F(\mathbf{x})$ torna-se a seguinte função:

$$F(\mathbf{x}) = \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{x}_i \mathbf{x} + b \tag{7.10}$$

A Eq. 7.10 pode mapear os vetores de treinamento para valores reais de destino, permitindo alguns erros, mas não pode lidar com o caso SVR não linear. O mesmo truque de *kernel* pode ser aplicado substituindo o produto interno de dois vetores $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ por uma função de *kernel* $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. O espaço de recursos transformado geralmente é de alta dimensão e a função SVR nesse espaço torna-se não linear no espaço de entrada original. Dessa forma a Eq. 7.10 agrega o *kernel* conforme mostrado na Eq. 7.11:

$$F(\mathbf{x}) = \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*) K(\mathbf{x}_i \mathbf{x}) + b \tag{7.11}$$

Mais detalhes da formulação, equacionamento e priorização de *ranking* podem ser encontrados no trabalho dos autores Yu e Kim (2012).

A fig. 7.4 mostra uma representação da aproximação não linear a partir do uso de *kernel* polinomial para o SVR. Este resultado é melhor detalhado pelo própria referência citada - Awad et al. (2015).

7.2 Modelo MLP aplicado a simulações multifásicas

Uma rede neural é um método de inteligência artificial que utiliza uma característica de cálculo inspirada no cérebro humano de forma a processar dados e determinar padrões na busca pela solução do problema através da lógica de entradas e saídas. As redes neurais foram apresentadas pela primeira vez por McCulloch e Pitts (1943). Neste trabalho foi apresentado um

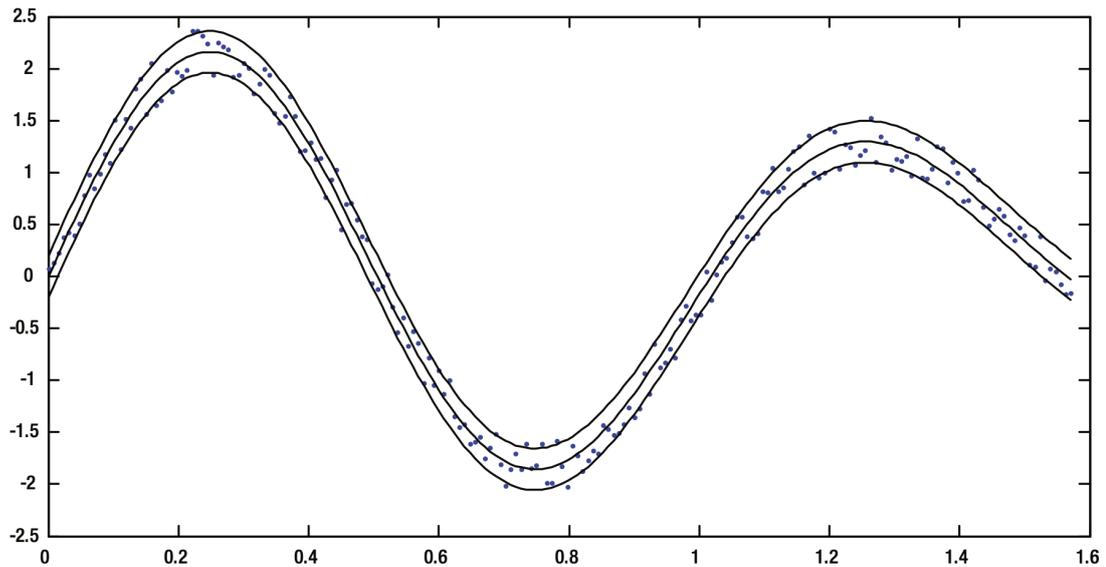


Figura 7.4: Regressão polinomial - SVR. Fonte: Awad et al. (2015)

modelo computacional simplificado para cálculos complexos tendo como ideologia o caráter “tudo ou nada” da atividade nervosa, sendo os eventos neurais e as relações entre eles tratados por meio da lógica proposicional.

Este trabalho proposto por McCulloch e Pitts (1943), foi desenvolvido um modelo simples de neurônio biológico, que ficaria conhecido como neurônio artificial uma vez que ele apresenta uma ou mais entradas binárias e uma saída binária.

A fig. 7.5 ilustra um esquema de cálculos lógicos, assumindo a hipótese de que um neurônio está ativo quando pelo menos duas de suas entradas estiverem ativas.

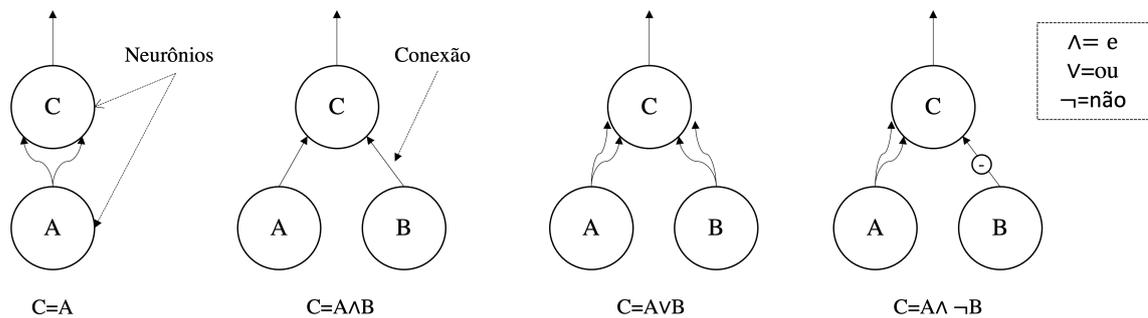


Figura 7.5: Redes Neurais Artificiais e seus cálculos lógicos. Fonte: Géron (2021).

Pela fig. 7.5 é possível perceber que na primeira rede se o neurônio A estiver Ativado, o neurônio C também será ativado, pois recebe dois sinais de A. Na segunda rede, C somente será ativado se A E B estiverem ativados. Na terceira rede C será ativado se A ou B estiverem ativados ou se ambos estiverem ativados. E na última rede C somente é ativado se A estiver

ativado e B desativado (GÉRON, 2021).

O Perceptron é uma arquitetura simples de rede neural desenvolvida por Rosenblatt (1958). Esta rede é baseada no classificador binário que mapeia sua entrada \mathbf{x} (um vetor de números reais ao invés de valores binários) para um valor de saída $f(\mathbf{x})$, e cada conexão de entrada se associa a um peso. O neurônio é chamado de unidade de limiar linear (LTU).

A fig. 7.6 mostra a estrutura de uma LTU, com três entradas. A LTU calcula a soma ponderada das entradas conforme o peso associada a cada uma delas, e aplica uma função degrau a essa soma para obtenção do resultado $h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})$.

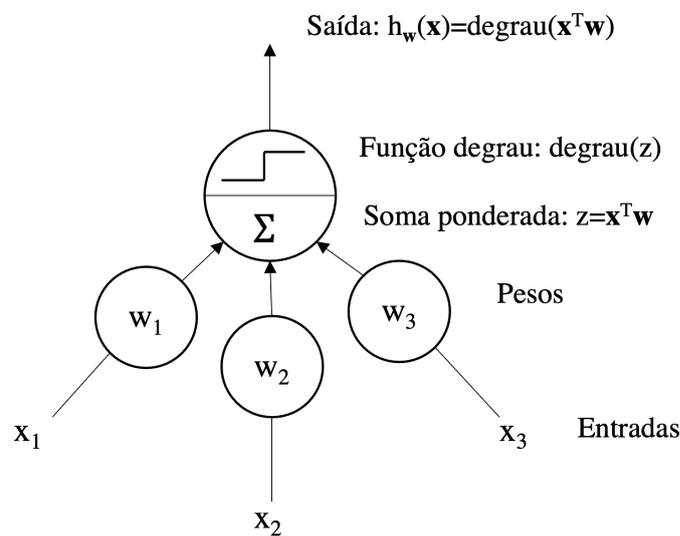


Figura 7.6: Representação de um LTU. Fonte: Géron (2021)

Como função degrau, em geral é bastante utilizado a função *Heaviside* ou a função de degrau unitário conforme mostrado na Eq. 7.12.

$$\text{heaviside}(z) = \begin{cases} 0, & \text{se } z < 0 \\ 1, & \text{se } z \geq 0 \end{cases} \quad (7.12a)$$

$$\text{sgn}(z) = \begin{cases} -1, & \text{se } z < 0 \\ 0, & \text{se } z = 0 \\ 1, & \text{se } z > 0 \end{cases} \quad (7.12b)$$

Um perceptron é composto apenas de uma camada de LTU que está diretamente conectado a todas as entradas. Quando um neurônio de uma camada se conecta a todos os outros da camada

anterior, temos uma camada conhecida como camada densa, ou camada totalmente conectada (GÉRON, 2021). Para calcular as saídas de uma camada de neurônios de diversas instâncias pode-se utilizar a Eq. 7.13.

$$h_{\mathbf{W},\mathbf{b}}(\mathbf{X}) = \phi(\mathbf{x}\mathbf{W} + \mathbf{b}_{\text{MLP}}) \quad (7.13)$$

onde \mathbf{X} é a matriz de entradas, \mathbf{W} representa a matriz de pesos de conexão, \mathbf{b}_{MLP} é o vetor de vies (um por neurônio) e ϕ é conhecido como função de ativação (na LTU é a função degrau).

O treinamento de um perceptron se baseia na *teoria hebbiana*. Simplificadamente, a teoria é resumida como "células que disparam juntas, permanecem conectadas", a ideia é que se um neurônio aciona outro neurônio com frequência, a conexão entre eles se torna forte. Essa regra também ficou conhecida como *regra de Hebb* em homenagem ao seu desenvolvedor Donald Hebb (GÉRON, 2021).

A Perceptron Multicamadas (MLP) é uma rede neural semelhante à rede conhecida somente como Perceptron, porém com mais camadas em uma estrutura composta por uma camada de entrada, uma ou mais camadas de LTU chamada de camadas ocultas e uma camada de saída (ver fig. 7.7). Quando uma rede possui muitas camadas ocultas (dezenas ou até mesmo centenas) pode ser considerada como uma rede neural profunda.

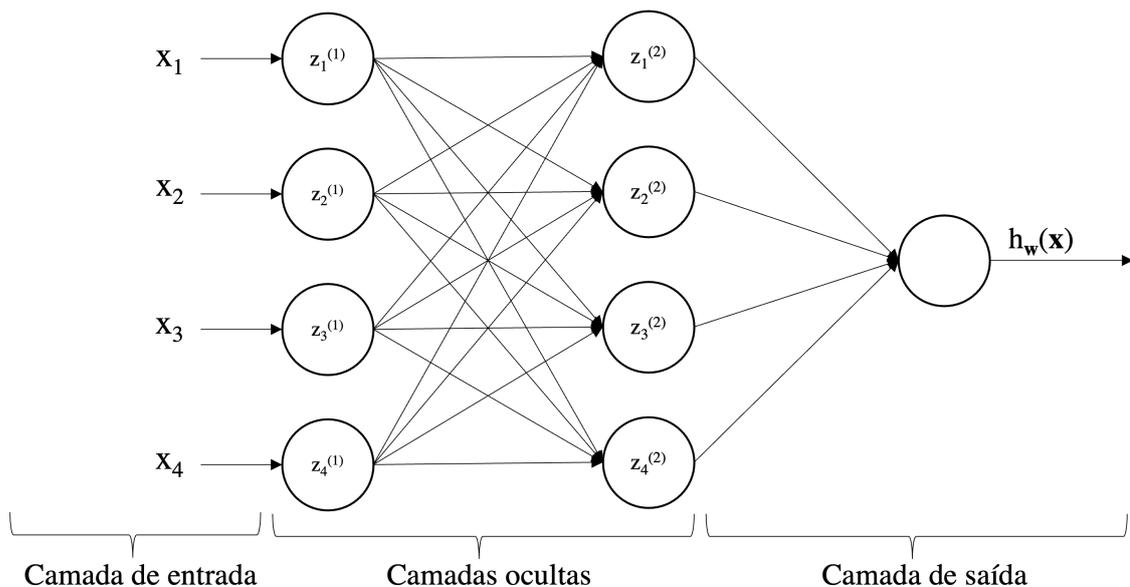


Figura 7.7: Diagrama de um Perceptron Multicamadas. Fonte: Géron (2021).

É importante destacar que a fig. 7.7 trás uma representação de uma rede neural *Feed-Forward*, isso significa que o cálculo e armazenamento de variáveis intermediárias (incluindo

saídas) para uma rede neural é feito somente a partir da camada de entrada para a camada de saída.

Já o *Backpropagation* refere-se ao método de cálculo do gradiente dos parâmetros da rede neural. Resumindo, o método percorre a rede na ordem inversa, da camada de saída para a camada de entrada, de acordo com a regra da cadeia do cálculo. O algoritmo armazena quaisquer variáveis intermediárias (derivadas parciais) necessárias ao calcular o gradiente em relação a alguns parâmetros. Em resumo, esse método busca otimizar o erro na saída em relação a uma variável dependente desejada. Ele funciona computando o gradiente da função de perda com relação a cada peso na rede e, em seguida, atualizando esses pesos na direção oposta ao gradiente para minimizar o erro. Este processo é repetido várias vezes até que o erro seja aceitavelmente baixo ou uma condição de parada é alcançada (AGGARWAL, 2018).

A função de perda que é minimizada durante o treinamento é geralmente a *mean squared error* (MSE), que é dada por:

$$J = \frac{1}{2} \sum_i (y^i - \phi(z^i))^2 \quad (7.14)$$

As funções de ativação mais populares são mostradas pela fig. 7.8.

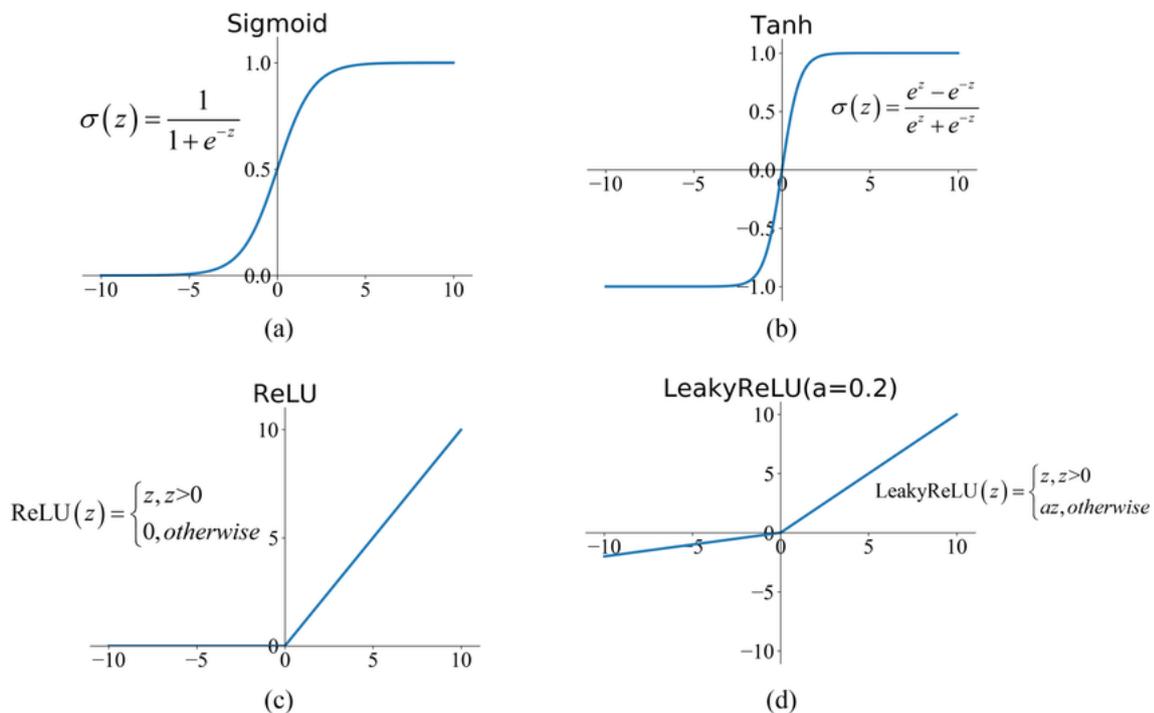


Figura 7.8: Funções de ativação. Fonte: Feng et al. (2019).

As redes neurais para regressão são uma subcategoria de modelos de redes neurais que são

utilizados para prever valores contínuos. Em contraste com os modelos de classificação, que preveem a categoria a que um determinado exemplo pertence, os modelos de regressão são projetados para estimar valores numéricos precisos.

Em geral, MLPs para regressão não necessitam de nenhuma função de ativação para saída. Em vez disso, a saída da MLP é uma combinação linear dos inputs passados através de todas as camadas ocultas.

A principal diferença entre o modelo de classificação e regressão estará na camada de saída. Neste caso, para resolver problemas de classificação, a camada de saída precisa ter tantos neurônios quanto as classes existentes. Por isso, na regressão não precisamos limitar nossa saída, uma vez que esta pode ser uma função de ativação linear. Ou seja, a entrada será reproduzida exatamente igual na saída (GÉRON, 2021).

7.2.1 Resultado dos modelos ML em comparação com o modelo DEM

Para o modelo de MLP usado neste trabalho foi utilizada a classe SVR contida na biblioteca *open source* de machine learning *scikit-learn* em linguagem de programação Python™. Os parâmetros de velocidade u_i e vorticidade ω_k vindos do domínio euleriano, além do número de partículas presentes nas células computacionais próximas à partícula analisada n_p , foram definidos como parâmetros de entrada (*feature*) para o treinamento do modelo, e o como parâmetro de saída (*target*) foi utilizado o deslocamento da partícula ao longo do passo de tempo ($x_{p_i}^{new} - x_{p_i}^{old}$).

Uma comparação entre o resultado dos modelos DEM e SVR para as direções X e Y são mostradas nas fig. 7.9 e 7.10, respectivamente. As figuras apresentam o gráfico de dispersão dos resultados obtidos pelos dois modelos, a linha em preto no gráfico é uma linha de referência que nos permite uma melhor avaliação visual da performance do modelo SVR.

Pela figura 7.9, é possível notar que o modelo SVR apresenta uma performance bastante semelhante à do modelo DEM, com valores bastante próximos aos valores esperados. Já na figura 7.10, é possível notar que o modelo SVR apresenta uma performance ligeiramente inferior em relação ao apresentado para a direção X, o que é confirmado pelas métricas de erro mostrados na tab. 7.1.

Assim como para o modelo SVR, gráficos de dispersão para a comparação entre os resultados dos modelos DEM e MLP para as direções X e Y são mostradas nas fig. 7.11 e 7.12, respectivamente.

A análise da figura 7.11 revela que o modelo MLP apresenta uma eficiência comparável

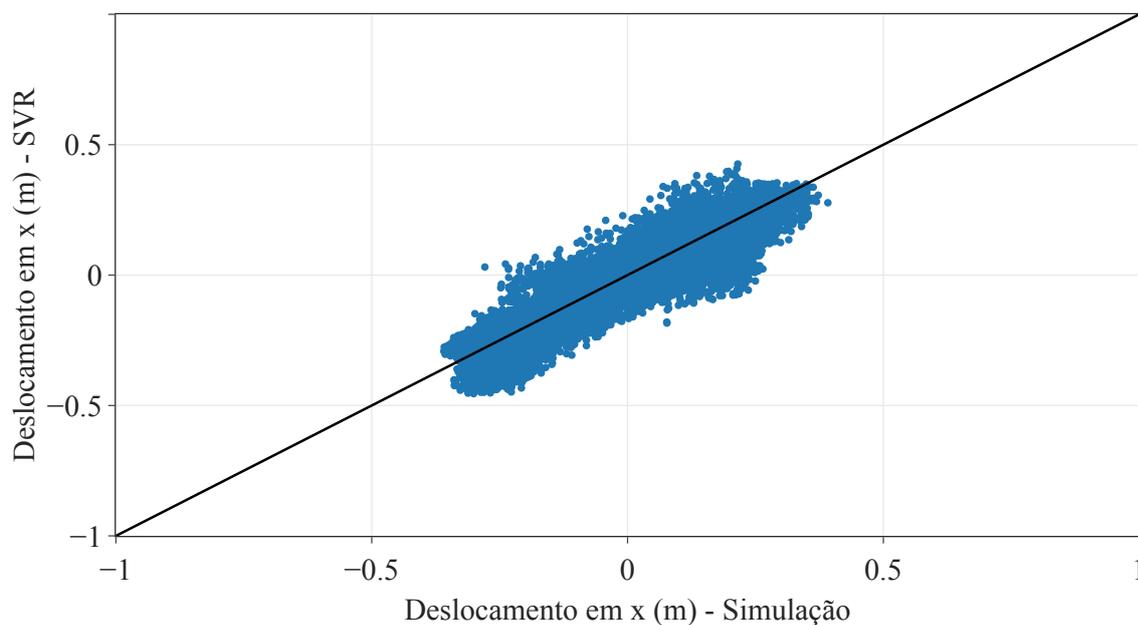


Figura 7.9: Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção x obtidos pelo DEM e pelo SVR.

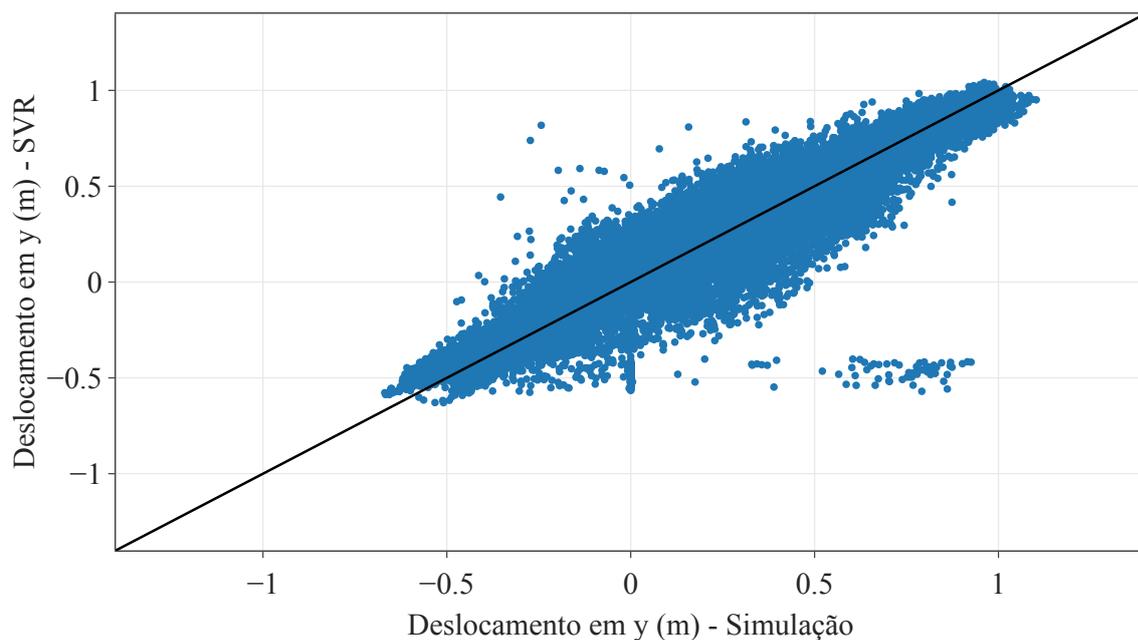


Figura 7.10: Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção y obtidos pelo DEM e pelo SVR.

ao modelo SVR, com resultados semelhantes aos valores apresentados pelo DEM. Na figura 7.12, é possível perceber que o desempenho do modelo MLP, assim como o modelo SVR, é ligeiramente inferior em comparação com a direção X. Essa diferença para alguns valores de deslocamento em ambos os modelos pode ser explicada pela aplicação de condições de contorno dentro do MFSim que não são aplicadas ao modelo MLP.

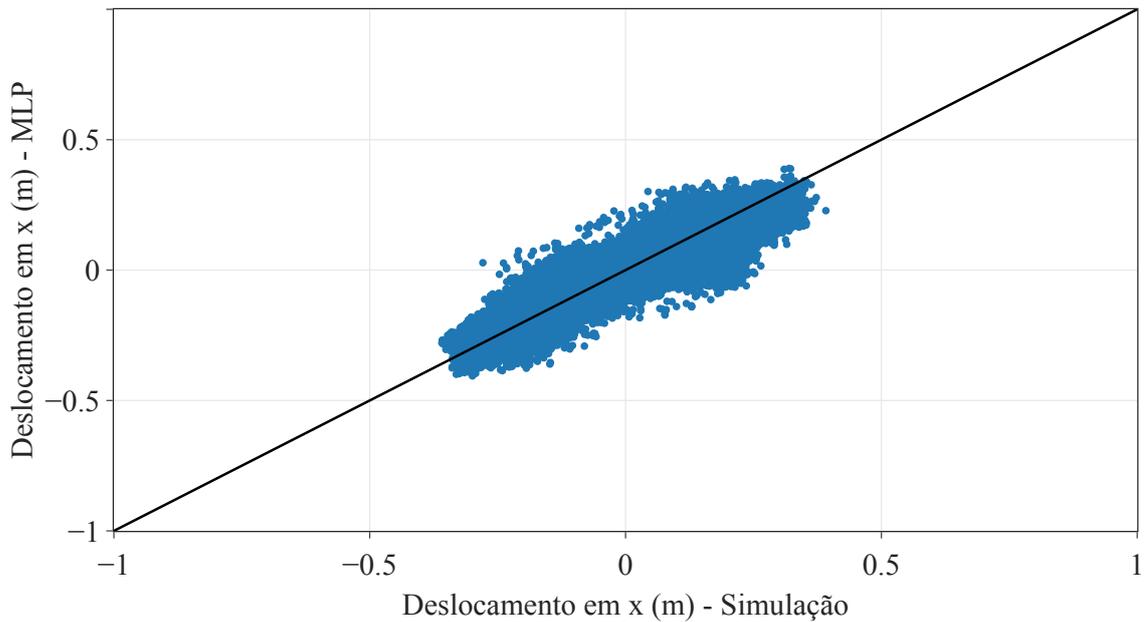


Figura 7.11: Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção x obtidos pelo DEM e pelo MLP.

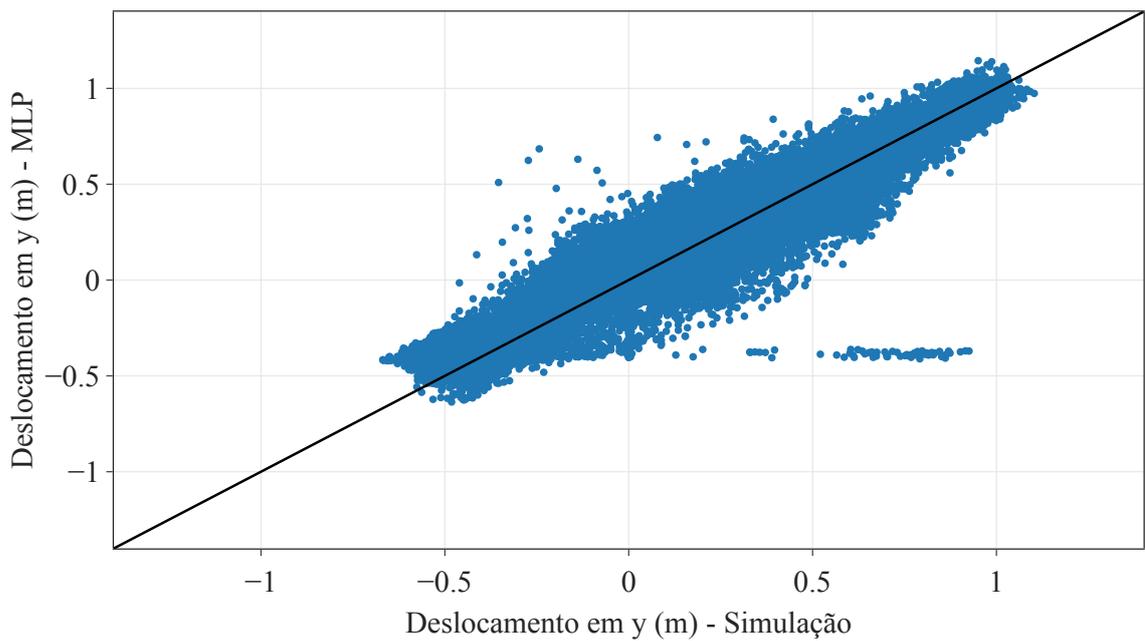


Figura 7.12: Gráfico de dispersão para comparação dos valores de deslocamento na direção y obtidos pelo DEM e pelo MLP.

Na tab. 7.1 também são apresentadas as métricas de erro do modelo MLP com relação ao DEM. Ressalta-se que o modelo SVR teve um desempenho notadamente melhor que o modelo SVR, apesar de ser um modelo computacionalmente mais caro.

Os modelos ML apresentaram uma boa performance para a previsão do deslocamento das

Tabela 7.1: Métricas de erro para o modelo MLP

Métrica	Direção x		Direção y	
	SVR	MLP	SVR	MLP
<i>mean absolute error</i>	0.046025236	0.097234029	0.044148088	0.094777399
<i>mean squared error</i>	0.003657459	0.017900399	0.003523554	0.018244744
<i>mean root squared error</i>	0.060476926	0.133792374	0.059359530	0.135073105

partículas. No entanto, o seu uso dentro do MFSim é momentaneamente inviabilizado devido à dificuldade de interação entre o MFSim e o *script* python dos modelos de ML, que no momento é feito através da escrita em arquivos de texto, um processo computacionalmente caro. O processo de advecção de partículas usando os modelos de ML, em substituição à modelos tradicionais, é mostrado no fluxograma apresentado no fig. 7.13.

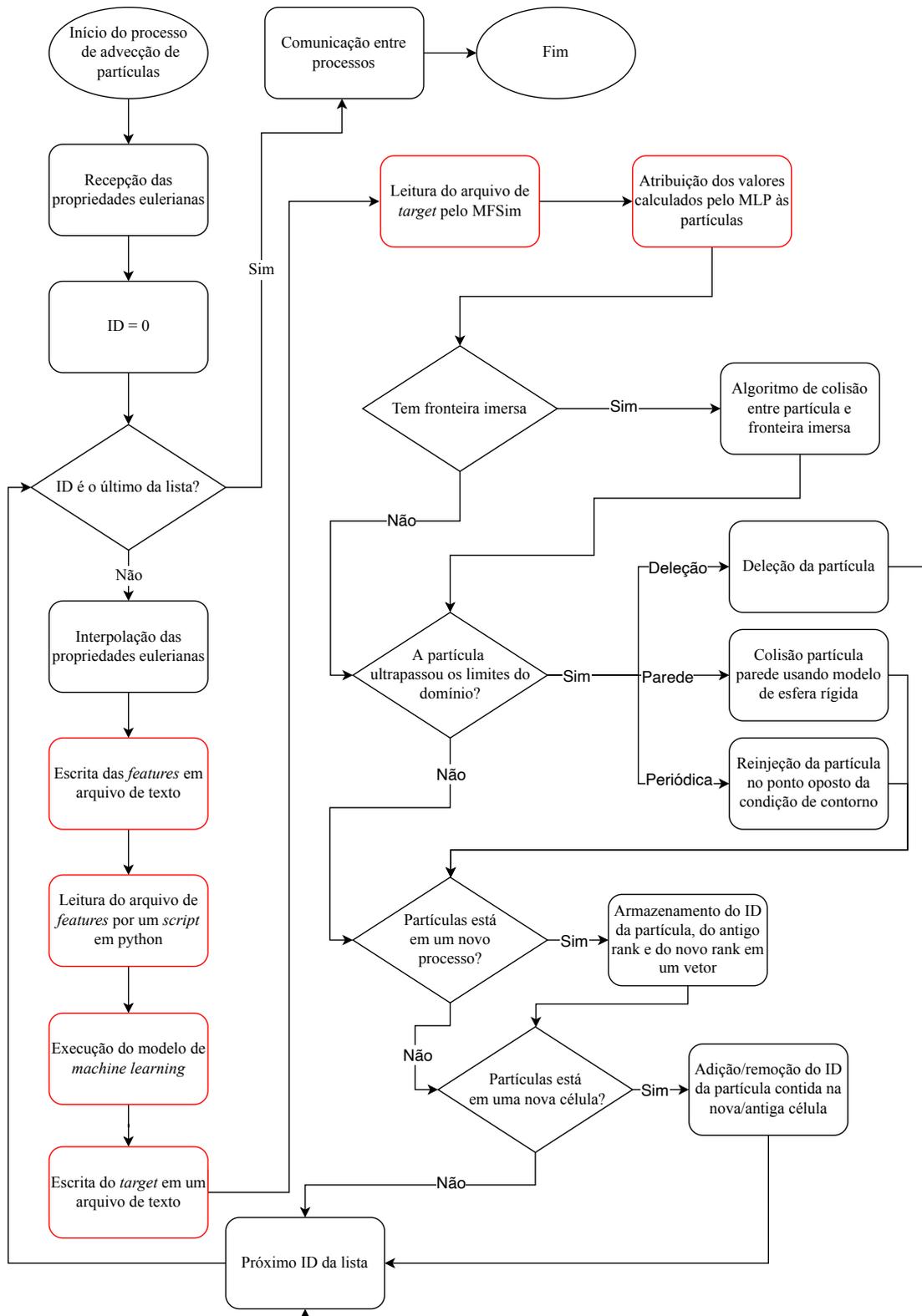


Figura 7.13: Algoritmo do transporte de partículas para os modelos de ML.

CAPÍTULO VIII

ESTUDO DA DISPERSÃO DE CASCALHOS DESCARTADOS EM FASE DE PERFURAÇÃO SEM RETORNO

Segundo a Agencia Nacional de petróleo (ANP) a produção nacional de petróleo tem sido crescente nos últimos anos. Em 2019 houve um aumento de 7,8%, atingindo a marca de 2,8 milhões de barris/dia e, mesmo durante a pandemia de COVID-19 registrou-se, de acordo com a Petrobras, uma alta de 9% nos três primeiros trimestres de 2020, totalizando 2,839 milhões de barris de óleo e gás natural. Esta elevação foi liderada pela oferta de petróleo do pré-sal, que corresponde a cerca de 50% da produção nacional.

Em virtude do impacto ambiental causado pelos rejeitos provenientes da crescente exploração e produção de petróleo e gás, vê-se a necessidade do monitoramento de dispersão de resíduos oriundos de tal atividade. Dentro deste contexto a perfuração de poços tem se tornado alvo de processos de licenciamento ambiental por parte dos órgãos responsáveis pelo controle e fiscalização sobre uso dos recursos naturais – IBAMA, que em muitos casos pode limitar a produção em função da extensão, e da altura de deposição, da área afetada pelo descarte.

As perfurações de poços podem ser exploratórias, onde se tem como objetivo a identificação da presença de óleo ou gás e a avaliação do poço em si quanto à qualidade do mesmo, extensão do acúmulo e etc, ou podem ser de desenvolvimento, na qual objetiva-se a retirada de óleo e gás. Na primeira etapa de perfuração, dita sem *riser* (veja a fig. 8.1), um fluido de base aquosa é destinado, dentre outras finalidades, ao bombeamento do cascalho (calcarenito) para fora do poço, portanto, o cascalho e o fluido de perfuração são descartados sobre o assoalho oceânico a poucos metros acima do fundo do mar, em região de águas profundas. Na etapa com *riser* (veja a fig. 8.1) o fluido de perfuração (de base orgânica com baixa solubilidade em água) e

o cascalho retornam para a superfície, sendo apenas este último, descartado no mar (DIAS; COUTINHO; MARTINS, 2005).

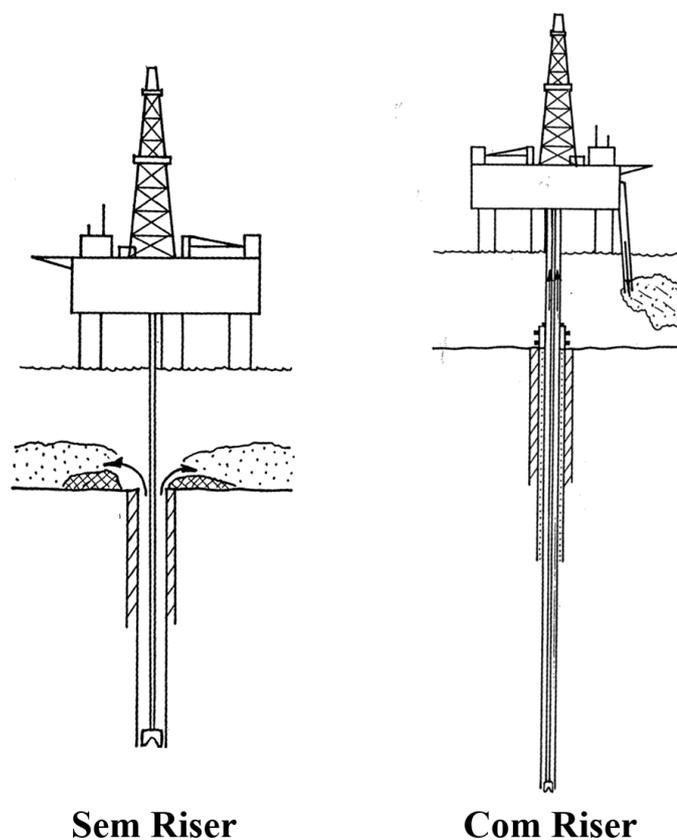


Figura 8.1: Esquema das fase sem riser e fase com riser da perfuração de poços de petróleo. Fonte: Hinwood et al. (1994).

Segundo o Termo de Referência ELPN/IBAMA N^o 039/05: “deve-se elaborar estudos de modelagem para a simulação da trajetória e da dispersão, de cada tipo de efluente que pretenda lançar ao mar (fluido de perfuração, cascalhos, água de produção, efluentes provenientes de teste de estanqueidade, etc), devendo para tal, utilizar ferramentas informatizadas, dados operacionais e meteo-oceanográficos, dentre outros que se façam necessário”.

O processo inicial de perfuração de poços de petróleo no mar descarta fluido de perfuração e fragmentos de rocha que se depositam no assoalho oceânico, implicando na exposição de organismos bentônicos a agentes estressores de ordem química e física. Pretende-se então modelar o transporte, dispersão e deposição de cascalhos no assoalho oceânico com ênfase em sólidos grosseiros de diversos diâmetros para avaliação do impacto causado pelas primeiras fases de perfuração, dita sem *riser*.

Nessa seção são apresentados resultados para simulações do descarte de cascalho com

a formulação DPM, comparados os acoplamentos 2-vias e 4-vias, bem como resultados de simulação com a formulação DEM. Por fim são mostradas extrapolações temporais da simulações no sentido de se obter uma estimativa da altura e área da pilha de descarte para uma simulação de 36 horas.

8.1 Modelo computacional

Nesta tese foram realizadas simulações com parâmetros representativos para os poços de Búzios e Marlim. No modelo numérico implementado para Búzios foi considerando um domínio retangular de $[8,5 \times 8,5 \times 8,5]$ m nas direções x, y e z respectivamente e velocidade de corrente marítima média igual a $0,06$ m/s e profundidade 2200 metros (veja a fig. 8.2), já para Marlim foi considerando um domínio retangular de $[10,2 \times 8,5 \times 8,5]$ m nas direções x, y e z respectivamente e velocidade de corrente marítima média igual a $0,16$ m/s e profundidade 1200 metros (veja a fig. 8.3).

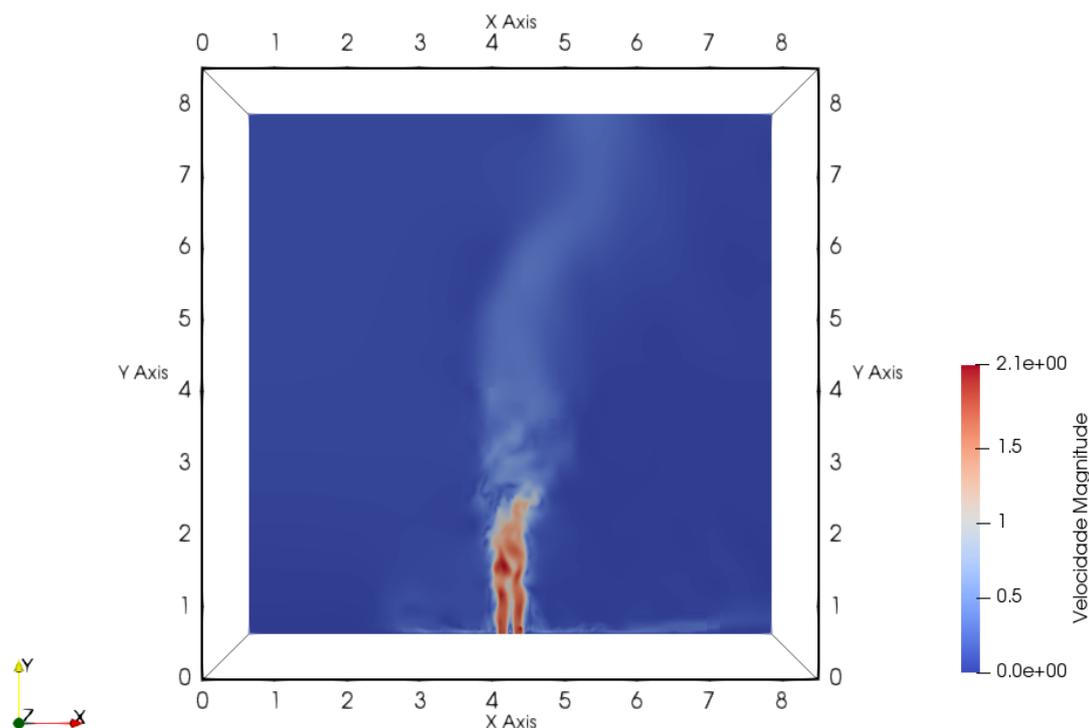


Figura 8.2: Domínio computacional usado nas simulações para o poço de Búzios.

Em ambos os modelos utilizou-se malha adaptativa, com critérios de adaptatividade para

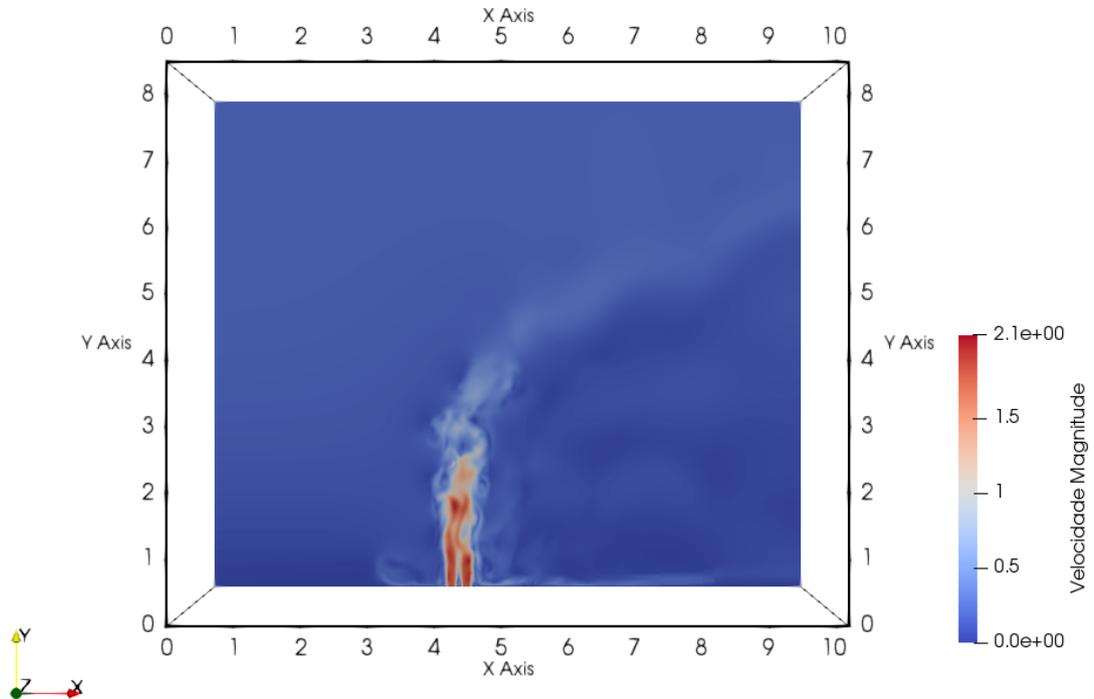


Figura 8.3: Domínio computacional usado nas simulações para o poço de Marlim.

vorticidade e para a presença de partículas, a malha mais refinada foi discretizada em volumes cujas laterais possuem tamanho de 26,56 mm, e a malha mais grosseira tem volumes cujas laterais possuem tamanho de 212,5 mm. Para as fronteiras Sul e Leste foram definidas condições de contorno de Dirichlet (valor imposto) para velocidade e de Neumann (derivada nula) para pressão, em Leste foi utilizado um perfil de velocidade e em Sul foi definido velocidade nula. Nas fronteiras Inferior, Superior e Norte foram definidas condições de contorno de Neumann para velocidade e de Dirichlet para pressão e, por fim, foi utilizada a condição de contorno wave transmissive (ORLANSKI, 1976) para a velocidade e Neumann para pressão na fronteira Oeste (na fig. 8.4 é possível observar a posição de cada condição de contorno apresentadas anteriormente). As partículas foram injetadas no domínio a partir da posição localizada em $x = 4,25$ m, $y = 2$ m e $z = 4,25$ m na forma de um anel com 0,46 m de diâmetro externo e 0,15 de diâmetro interno.

Os parâmetros e as propriedades utilizadas para o fluido de perfuração e para as partículas que saem da cabeça de poço são mostradas na tab. 8.1. Ressalta-se que nas simulações apre-

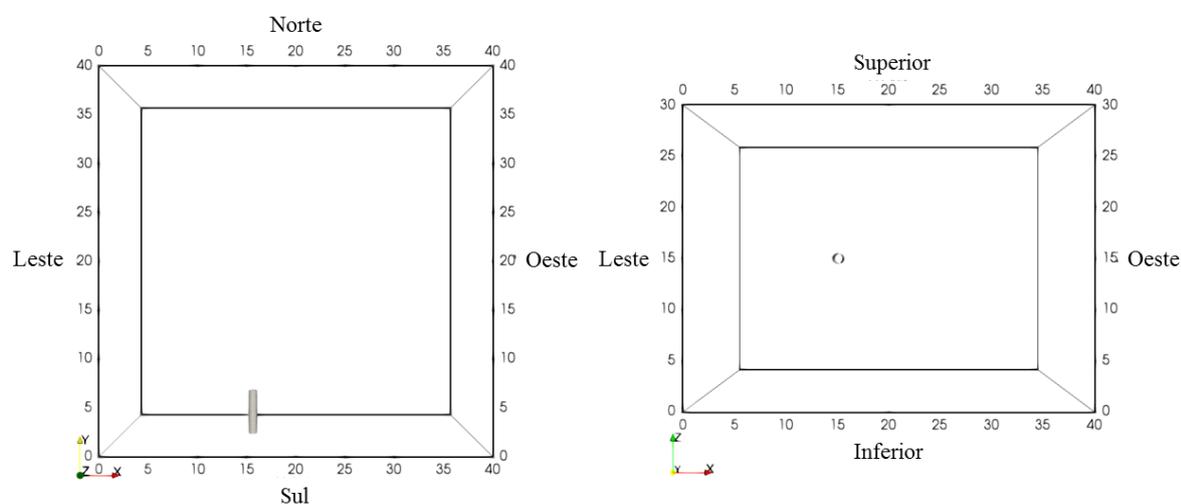


Figura 8.4: Representação gráfica da posição das condições de contorno.

sentadas nesta tese foi considerado que o fluido que escoar no domínio e o fluido que sai da cabeça de poço (fluido de perfuração) possuem as mesmas propriedades fluido dinâmicas (i.e. densidade e viscosidade).

Tabela 8.1: Propriedades do fluido de perfuração e do cascalho

Vazão (Q)	$0,004 \text{ m}^3/\text{s}$	$2,09 \text{ m}^3/\text{s}$
Massa específica (ρ)	$2500 \text{ kg}/\text{m}^3$	$1032 \text{ kg}/\text{m}^3$
Velocidade (V) na direção y	$1,85 \text{ m}/\text{s}$	$1,85 \text{ m}/\text{s}$
Viscosidade Dinâmica do fluido (μ)	$0,00098 \text{ Pa}\cdot\text{s}$	
Diâmetro médio das Partículas (d_p)	10 mm	
Velocidade angular da partícula (ω_p)	$10,41 \text{ rad}/\text{s}$	

Destaca-se que foi considerado a mesma velocidade para o cascalho e para o fluido de perfuração, e que a mesma foi encontrada empiricamente para a similitude com um fluido de perfuração de base água com viscosidade aparente de 180 cP e velocidade de 0,6 m/s.

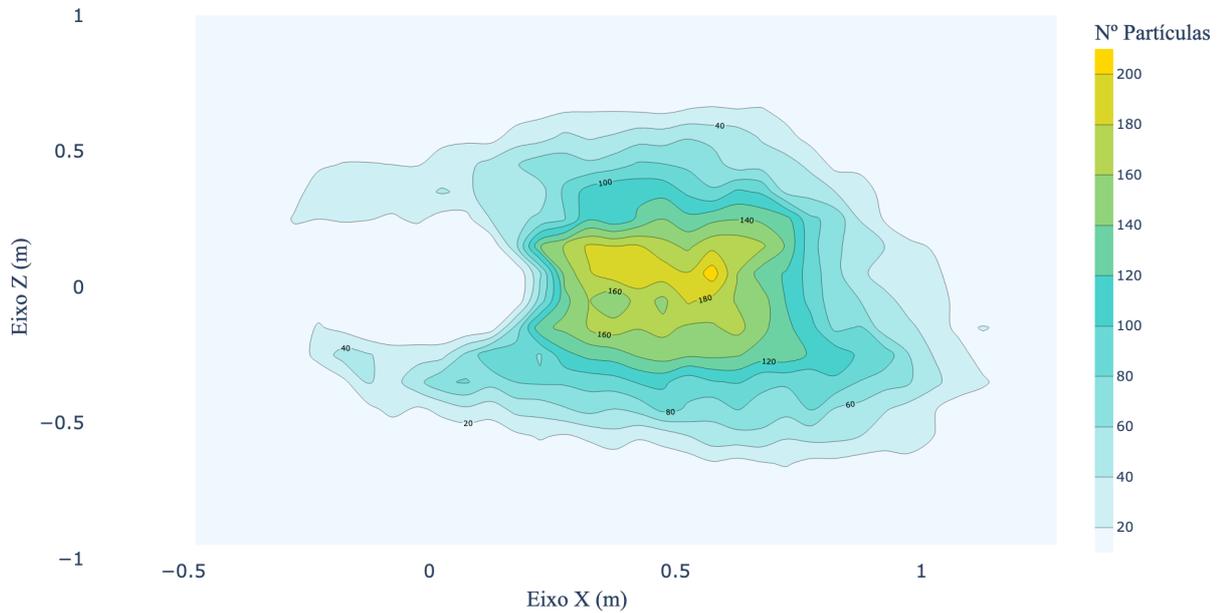
8.2 Simulações com a formulação DPM e acoplamento 2-vias e 4-vias

A formulação de 2-vias embora forneça a resolução para o problema através de uma forma simplificada, proporciona exemplificar de maneira qualitativa a dinâmica do transporte de partículas e distribuição espacial do cascalho. A formulação 4-vias possibilita o choque entre partículas e proporciona uma melhor representação da dispersão das partículas no domínio. Foram simula-

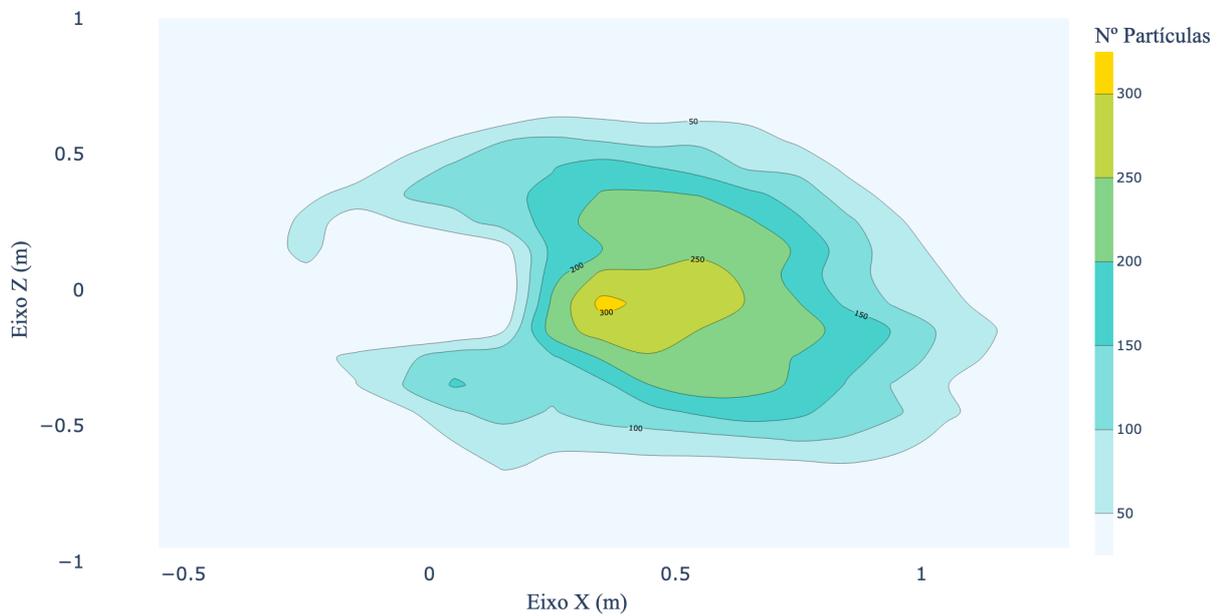
dos quatro casos para uma avaliação inicial da dinâmica do problema:

- O primeiro considerou a emissão de partículas, usando a formulação 2-vias, através de uma cabeça de poço com comprimento de 2 m situada no assoalho oceânico a uma profundidade de 2000 m, sendo influenciada pela ação de uma corrente marítima na direção x com velocidade de 0,16 m/s, que atua na dispersão das partículas. Foi estabelecido o tempo de descarte igual a 45 s;
- O segundo considerou a emissão de partículas, usando a formulação 4-vias, através de uma cabeça de poço com comprimento de 2 m situada no assoalho oceânico a uma profundidade de 2000 m, sendo influenciada pela ação de uma corrente marítima na direção x com velocidade de 0,16 m/s, que atua na dispersão das partículas. Foi estabelecido o tempo de descarte igual a 45 s;
- O terceiro considerou a emissão de partículas, usando a formulação 4-vias, através de uma cabeça de poço com comprimento de 2 m situada no assoalho oceânico a uma profundidade de 1000 m, sendo influenciada pela ação de uma corrente marítima na direção x com velocidade de 0,06 m/s, que atua na dispersão das partículas. Foi estabelecido o tempo de descarte igual a 45 s;
- Por fim, considerou-se a emissão de partículas através de uma cabeça de poço com comprimento de 2 m situado no assoalho oceânico a uma profundidade de 1000 m, sendo influenciada pela ação de uma corrente marítima na direção x com velocidade de 0,16 m/s, juntamente com a presença de uma fronteira imersa com velocidade de rotação de 100 rpm, simulando os efeitos gerados pela coluna de perfuração. Foi estabelecido o tempo de descarte igual a 45 s. Nesta simulação as partículas são injetadas sem velocidade angular, sendo sua rotação influenciada apenas pela coluna de perfuração.

As figs. 8.5, 8.6 e 8.7 mostram a distribuição das partículas ao longo do domínio e são coloridas de acordo com o número de partículas em um volume finito, destaca-se que nestas figuras são mostrados os deslocamentos da partículas com relação a posição de descarte, representada graficamente na posição (0;0).

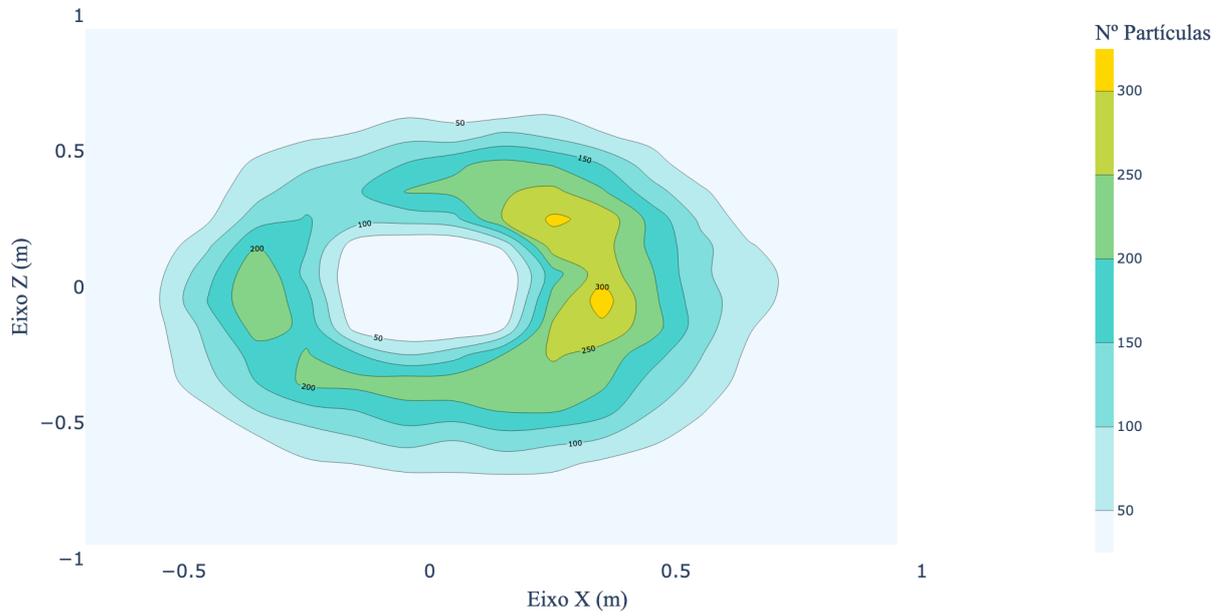


(a)

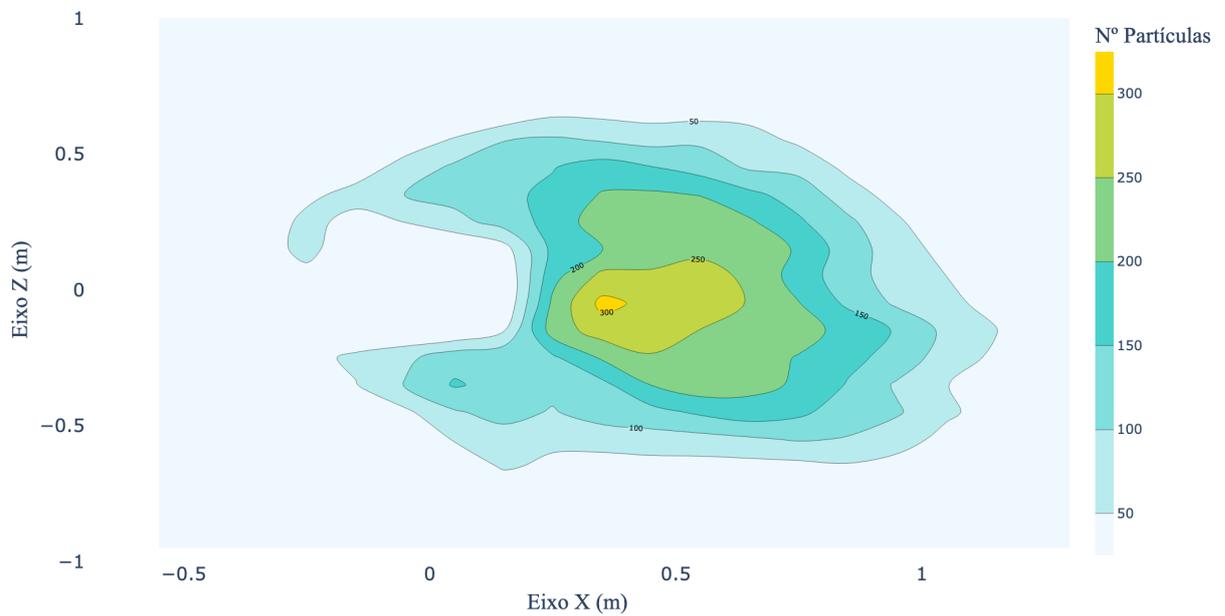


(b)

Figura 8.5: Panorama da dispersão de cascalho. (a) Dispersão de cascalho para $V_e = 0, 16$ m/s e formulação 2-vias, (b) Dispersão de cascalho para $V_e = 0, 16$ m/s e formulação 4-vias.

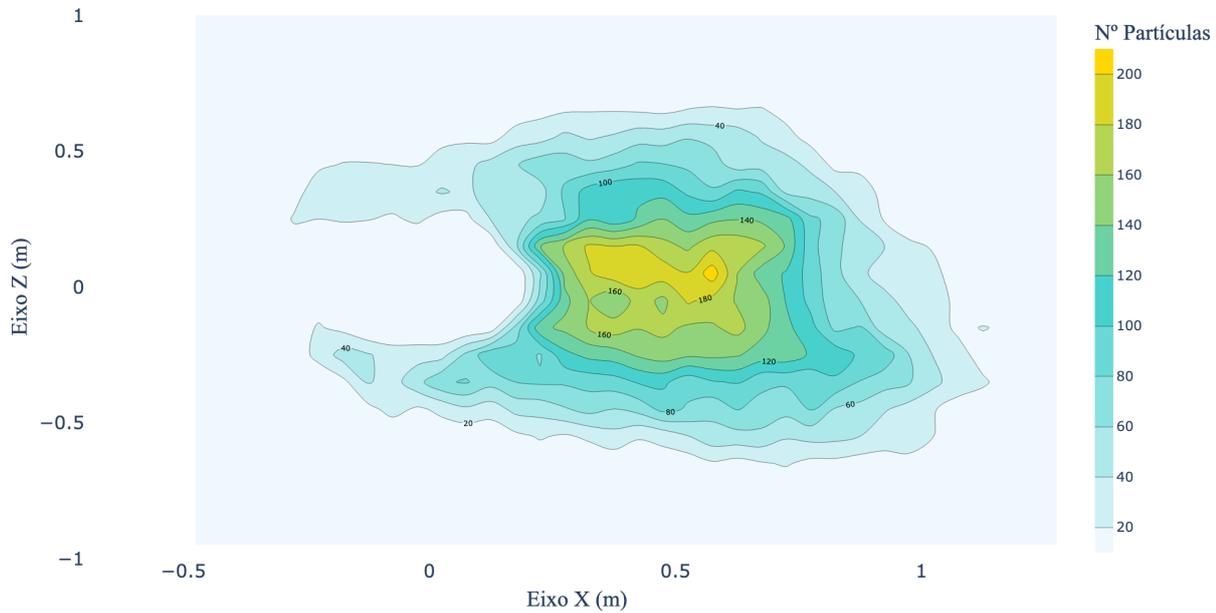


(a)

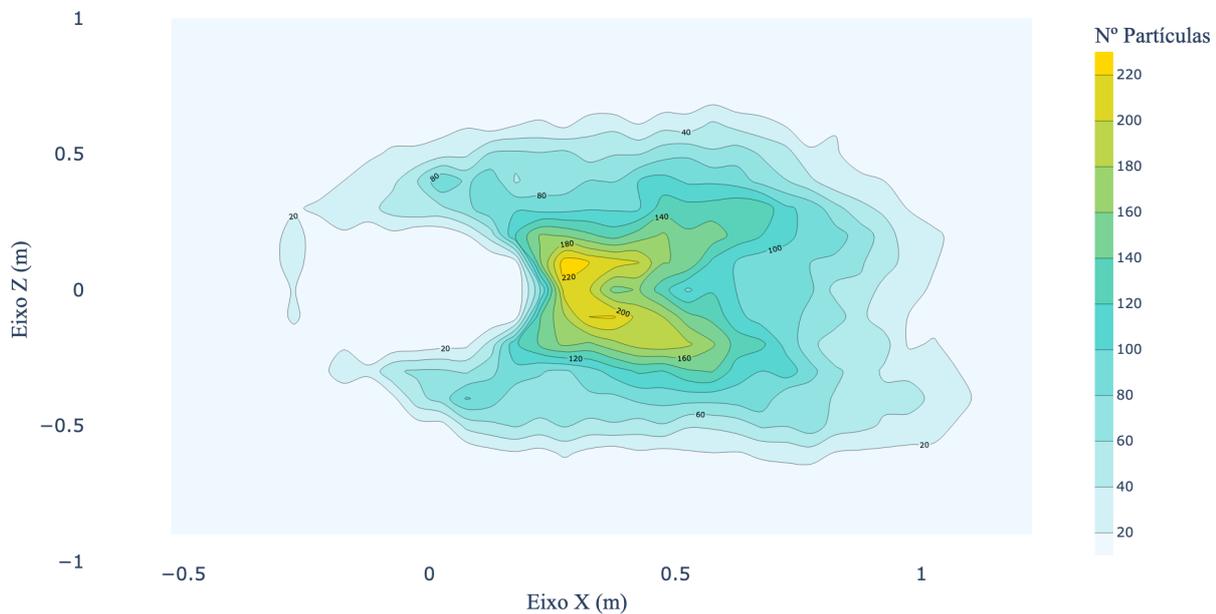


(b)

Figura 8.6: Panorama da dispersão de cascalho. (a) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,06$ m/s e formulação 4-vias, (b) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s e formulação 4-vias.



(a)



(b)

Figura 8.7: Panorama da dispersão de cascalho. (a) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s e formulação 2-vias, (b) Dispersão de cascalho para $V_e = 0,16$ m/s, formulação 2-vias e com uma fronteira imersa girando a uma velocidade de 100 rpm.

É possível observar nos resultados das simulações que, devido ao fluxo cruzado, surgem vórtices que afetam o trajeto inicial das partículas. No entanto, a força da gravidade (força

peso) age de maneira predominante na dinâmica do movimento, devido ao tamanho, densidade e peso das partículas, levando a concentrações mais elevadas nas áreas próximas à região de descarte.

Como esperado, o escoamento com maior velocidade proporciona uma dispersão maior do cascalho ao longo da direção preferencial, conforme mostrado na fig. 8.6. É possível notar que a formulação de 4 vias proporciona uma maior dispersão das partículas em comparação com a formulação de 2 vias, como discutido anteriormente (veja a fig. 8.5). A presença da coluna de perfuração não causa uma mudança significativa na dinâmica do movimento das partículas quando injetadas com uma velocidade angular inicial, conforme apresentado na fig. 8.7.

8.3 Simulações com a formulação DEM

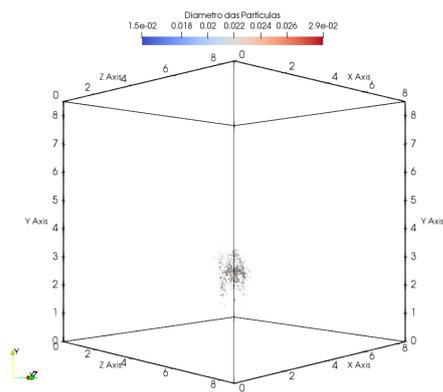
O Método dos Elementos Discretos (DEM), é utilizado para simulações com regimes densos e rígidos por contato entre partículas, sendo a interação entre estas modeladas como uma força de contato através da qual é obtido o acúmulo de partículas.

Foi simulado usando o modelo DEM o caso de emissão de partículas de 8 a 10 mm de diâmetro através de um jato com velocidade de 1,85 m/s na direção y situado no assoalho oceânico. A evolução da pluma de cascalhos descartados para condições referentes a Búzios são mostrados na fig. 8.8 e a pilha de descarte resultante é mostrada em maiores detalhes na fig. 8.10. Enquanto a evolução da pluma de cascalhos descartados para condições referentes a Marlim são mostrados na fig. 8.9 e a pilha de descarte resultante é mostrada em maiores detalhes na fig. 8.11. Destaca-se que os gráficos de panorama de dispersão são construídos a partir de dados estatísticos, sendo o ponto de injeção das partículas a posição (0;0).

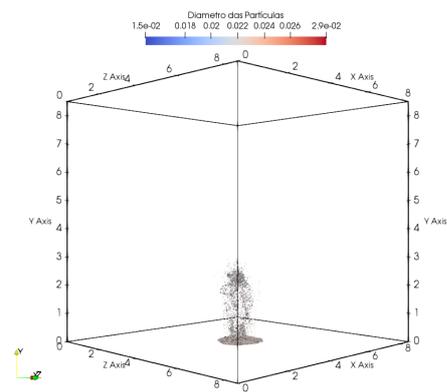
Analogamente aos resultados mostrados para a formulação DPM, nota-se pelas fig. 8.8 e fig. 8.9 que a pluma assenta rapidamente e se acumula próximo ao ponto de descarga devido ao tamanho consideravelmente grande das partículas. A dinâmica da dispersão é então uma consequência da formação da própria pilha de cascalhos.

8.3.1 *Extrapolação temporal do descarte de cascalho*

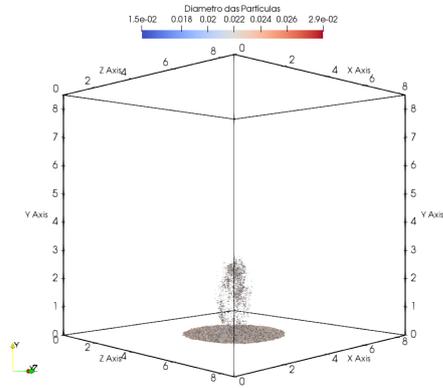
A partir dos dados da simulação mostrada acima é possível obter a taxa de crescimento da pilha de cascalho ao longo do tempo, determinando assim através de métodos de extrapolção, a altura e a extensão de deposição para 36h de perfuração.



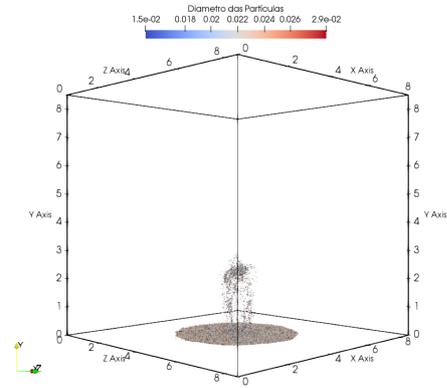
5 s



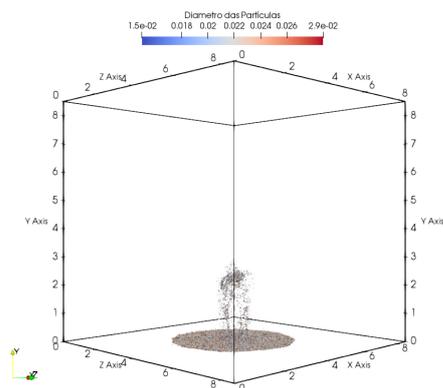
11,5 s



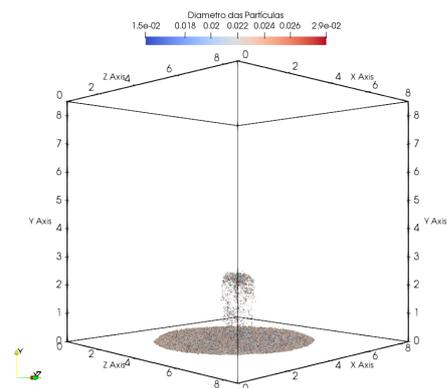
46 s



69 s



69 s



115 s

Figura 8.8: Evolução temporal da simulação de dispersão de cascalho com velocidade de corrente marítima $V_e = 0,06$ m/s.

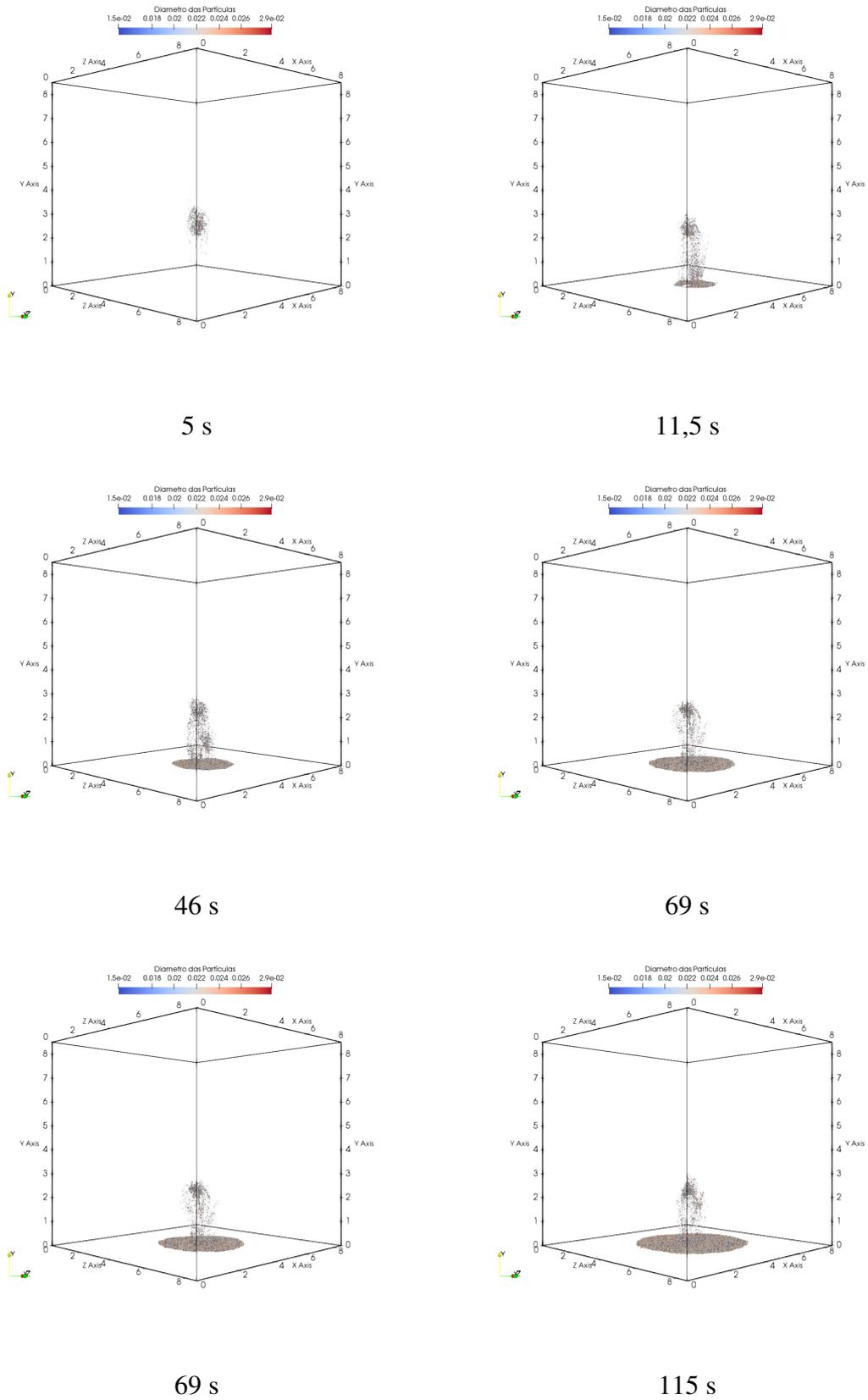


Figura 8.9: Evolução temporal da simulação de dispersão de cascalho com velocidade de corrente marítima $V_e = 0,16$ m/s.

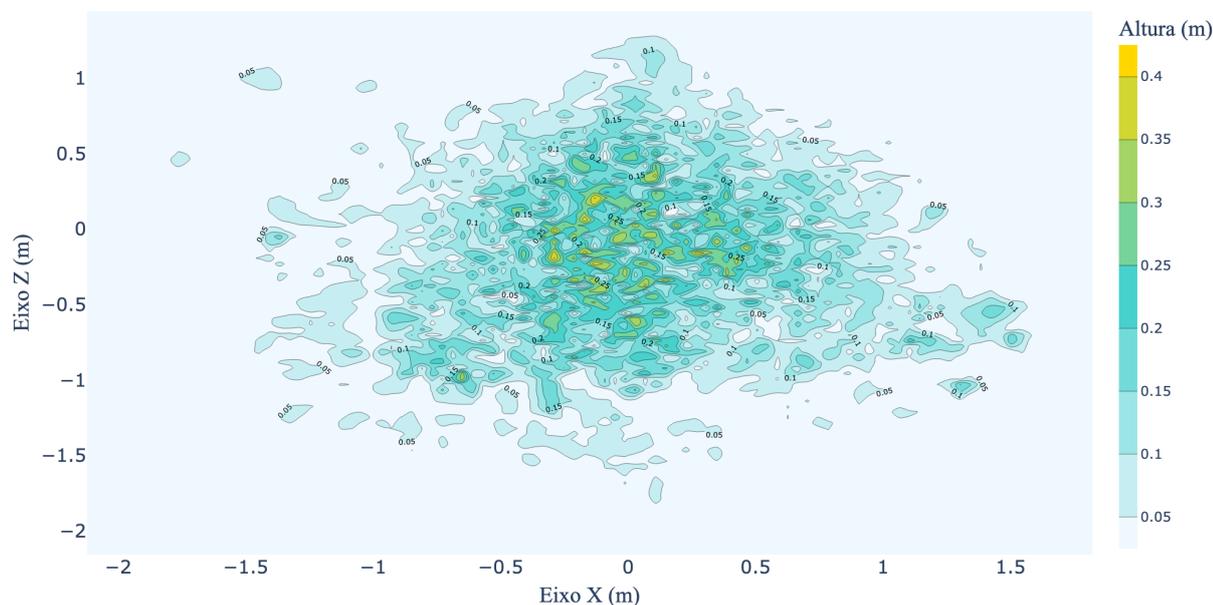


Figura 8.10: Panorama da dispersão de cascalho ao final da simulação usado formulação DEM e velocidade de corrente marítima $V_e = 0,06$ m/s.

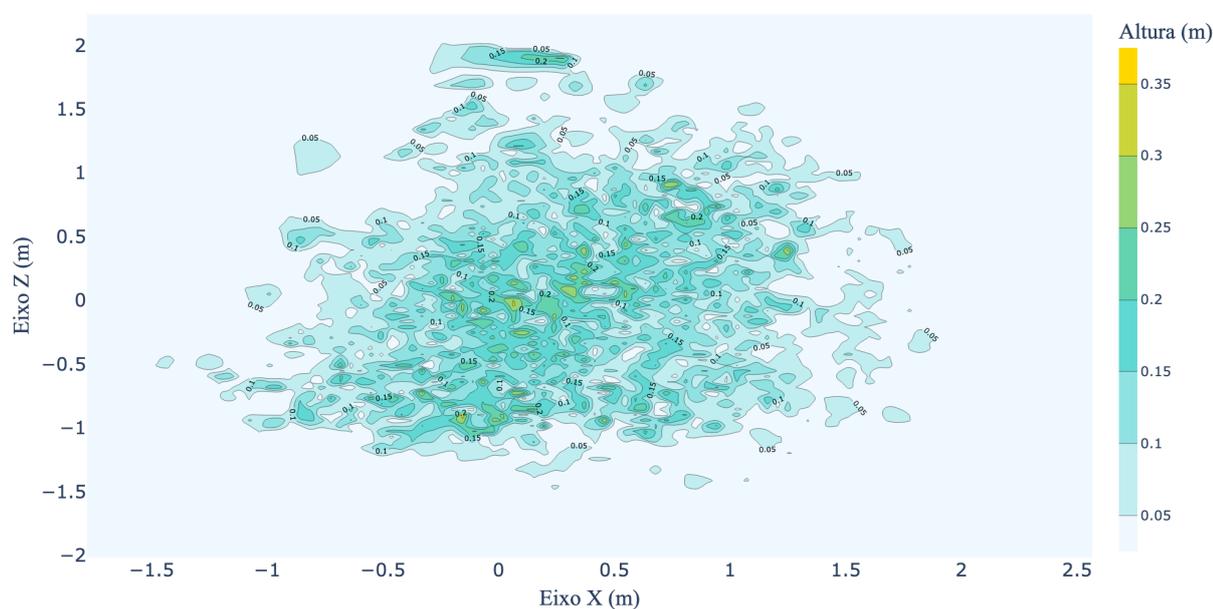


Figura 8.11: Panorama da dispersão de cascalho ao final da simulação usado formulação DEM e velocidade de corrente marítima $V_e = 0,16$ m/s.

Para tal foi utilizado o modelo ARIMA (*AutoRegressive Integrated Moving Average*) que é um modelo estatístico que é amplamente utilizado em análise de séries temporais para prever valores futuros a partir de valores passados.

O modelo ARIMA é composto por três componentes principais: o componente de auto-regressão (AR) representa a relação entre o valor atual e valores passados da série temporal; já

componente de integração (I) é responsável por tornar a série estacionária, o que significa que sua tendência e variância são constantes ao longo do tempo e; por fim, o componente de média móvel (MA) representa a relação entre a média dos erros residuais e valores futuros.

A previsão é feita usando os parâmetros identificados, juntamente com os valores passados da série temporal. O modelo ARIMA é capaz de capturar tendências, sazonalidade e ciclos, tornando-o uma escolha popular para séries temporais com comportamentos complexos. O que o torna um ótimo método para os ajustes das curvas de Búzio, fig. 8.12, e Marlim, fig. 8.13.

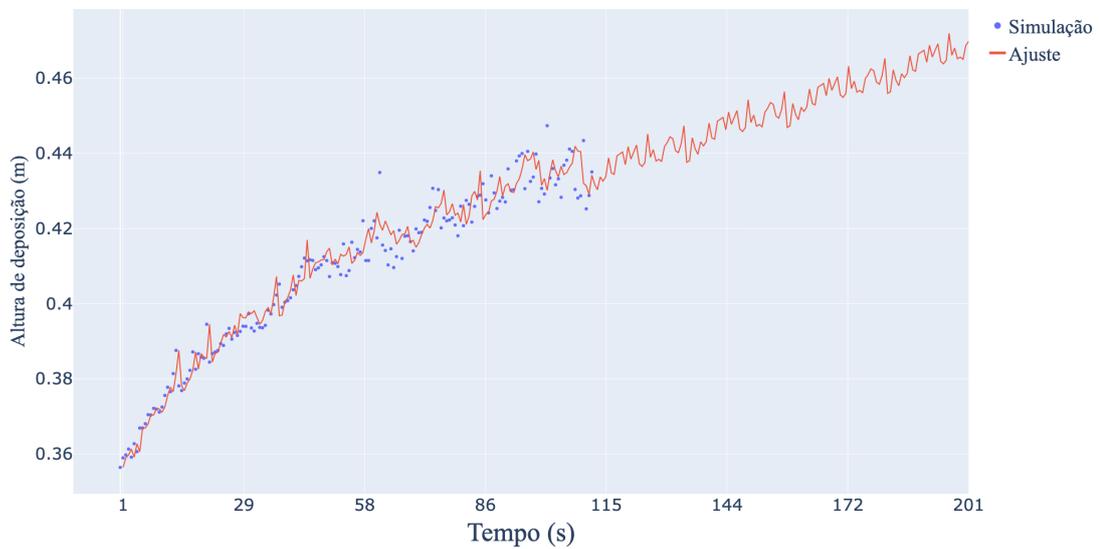


Figura 8.12: Ajuste da curva da altura de deposição de descartes para o poço de Búzio.

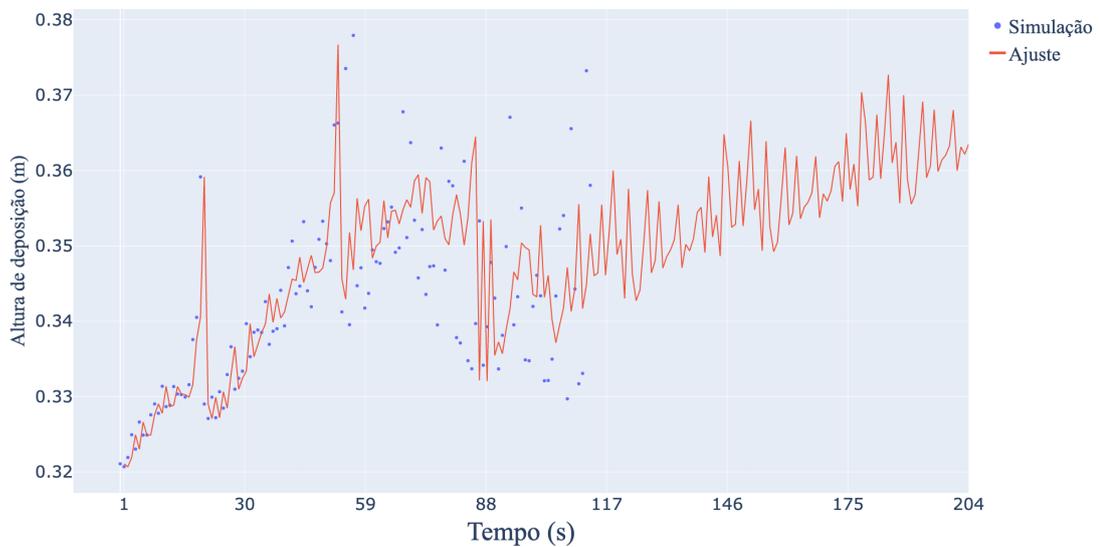


Figura 8.13: Ajuste da curva da altura de deposição de descartes para o poço de Marlim.

Com o modelo ajustado foi então efetuada uma extrapolação para 36 horas de descarte. Foi

definido um parâmetro de incerteza igual a 30%, assim foi obtido uma faixa de valores para a altura de deposição (fig. 8.14 e fig. 8.15).

O algoritmo ARIMA obteve um bom ajuste para as curvas e as extrapolações apresentam limites máximos e mínimos, nos quais o valor máximo resulta em uma maior altura de deposição, enquanto o valor mínimo resulta em uma maior área de descarte como pode ser observado nas figuras abaixo. As figuras 8.16 e fig. 8.17 representam o panorama da dispersão para valor de altura de deposição máximo e mínimo, respectivamente, para Búzios.

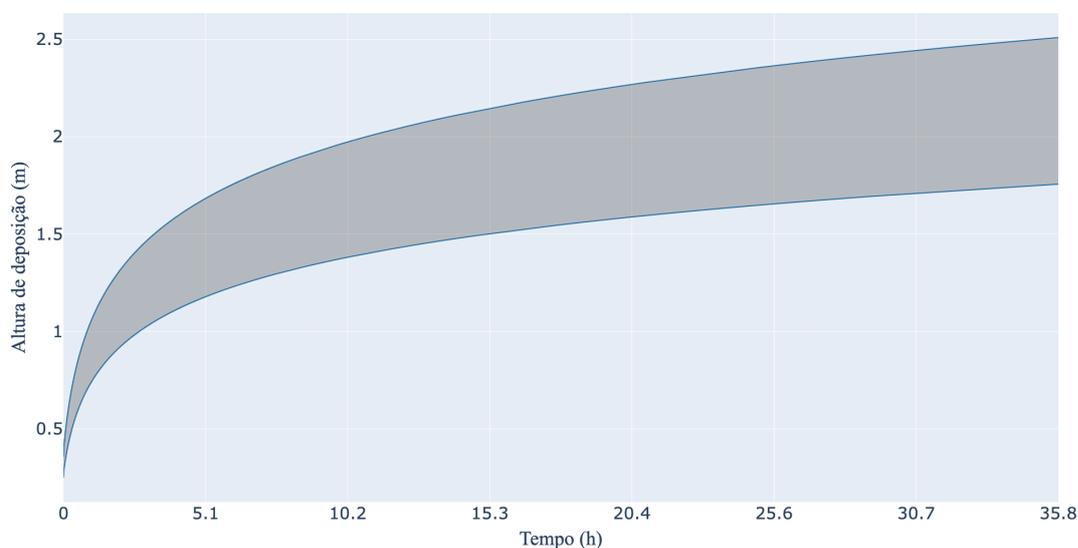


Figura 8.14: Extrapolação temporal da altura de deposição de descartes para o poço de Búzios.

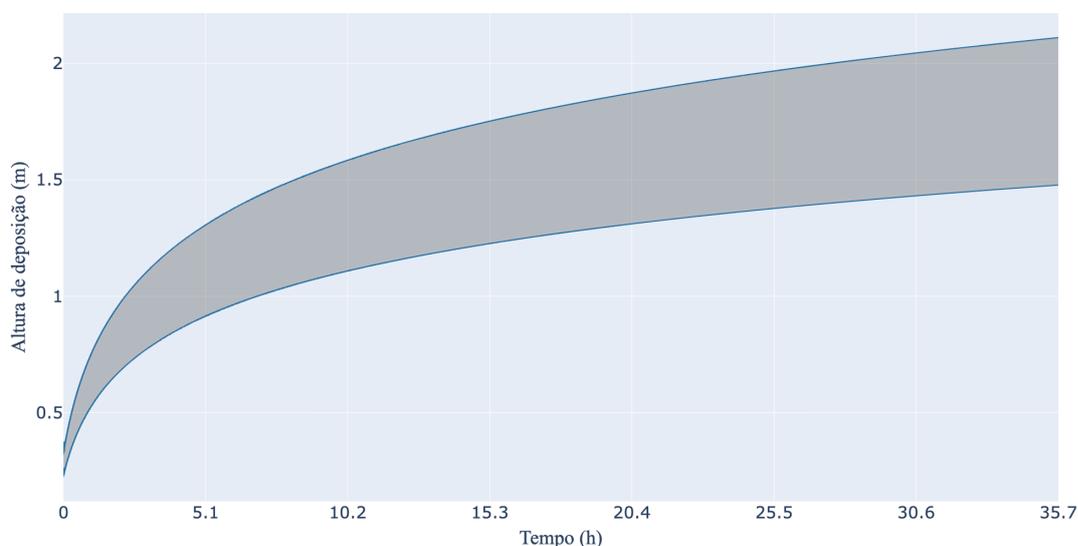


Figura 8.15: Extrapolação temporal da altura de deposição de descartes para o poço de Marlim.

Uma fase de perfuração sem riser com duração de 36 h em uma velocidade de corrente

marítima de 0,06 m/s resulta em uma pilha com diâmetro entre 32 m e 38 m e altura entre 1,7 m e 2,40 m. Neste caso a corrente marítima não tem velocidade o suficiente para carregar as partículas, sendo mais significativa a velocidade angular imprimida às partículas pela coluna de perfuração, por isso a posição do centro da pilha de partículas é (0,0;-0,22), sendo a posição de injeção de referencia (0;0).

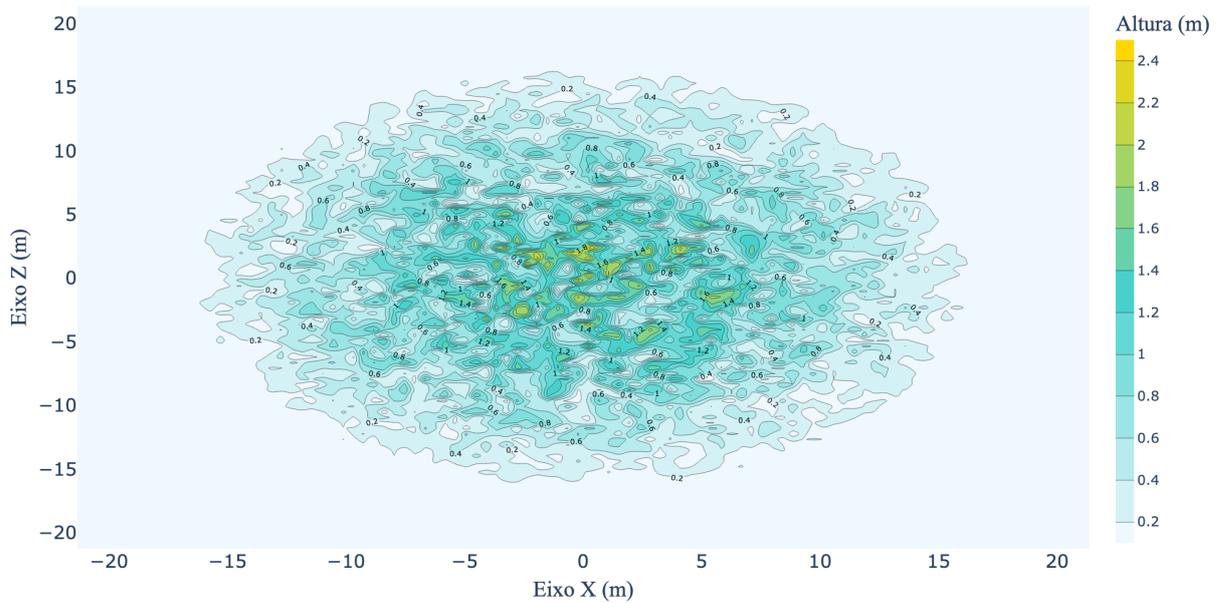


Figura 8.16: Panorama da dispersão de cascalho máximo para 36 h de perfuração para Búzios.

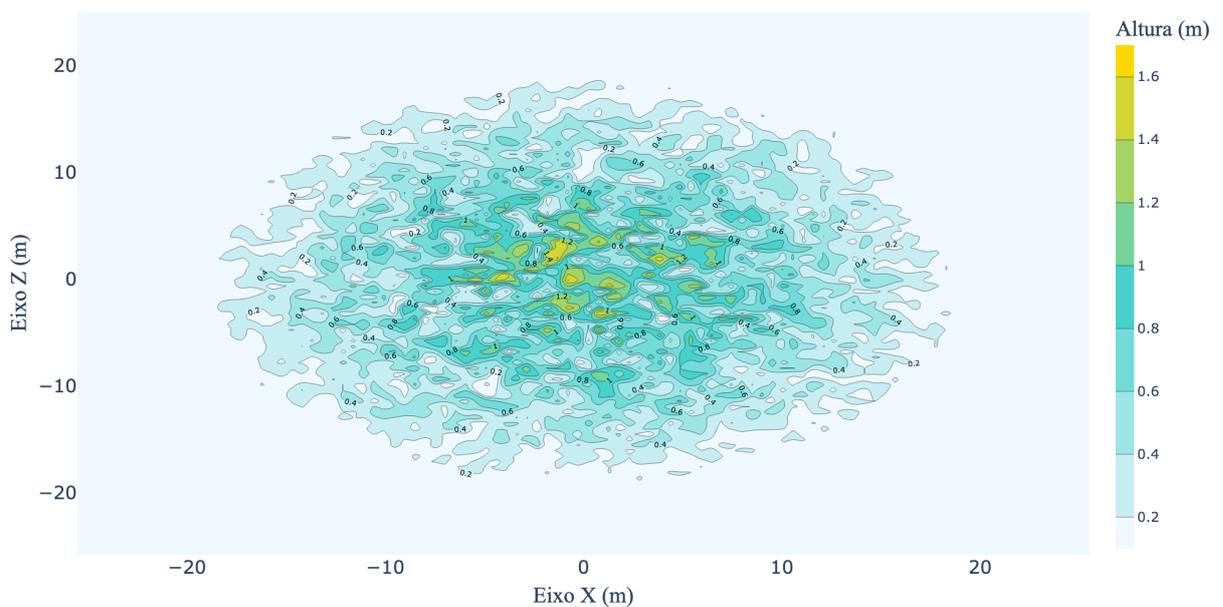


Figura 8.17: Panorama da dispersão de cascalho mínimo para 36 h de perfuração para Búzios.

Já as fig. 8.18 e fig. 8.19 representam o panorama da dispersão para valor de altura de

deposição máximo e mínimo, respectivamente, para Marlim.

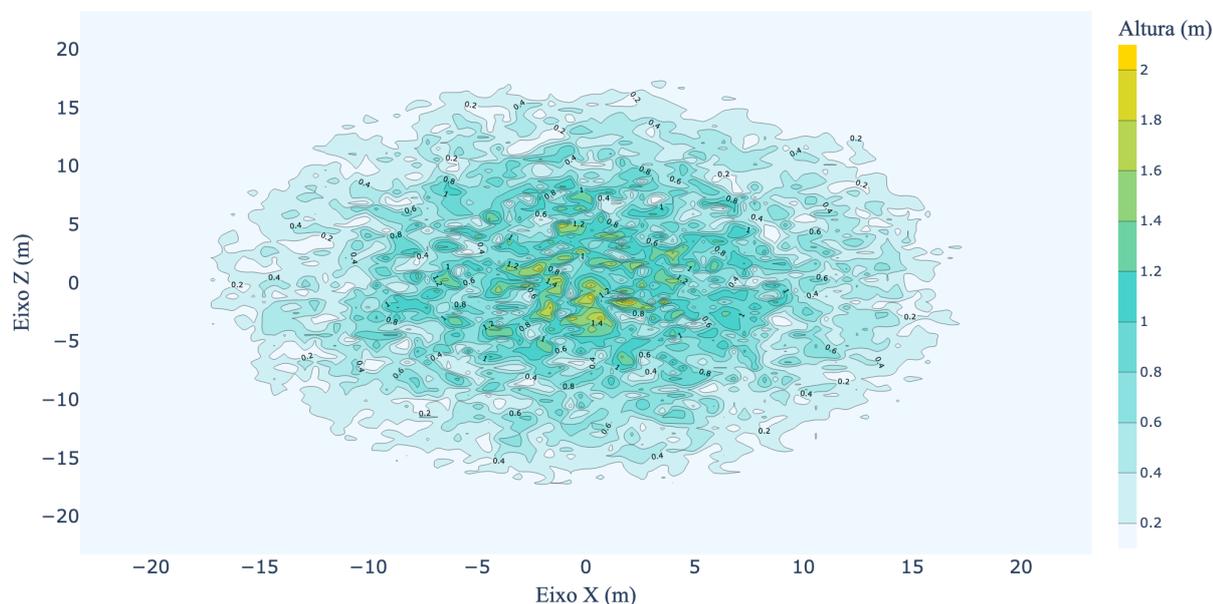


Figura 8.18: Panorama da dispersão de cascalho máximo para 36 h de perfuração para Marlim.

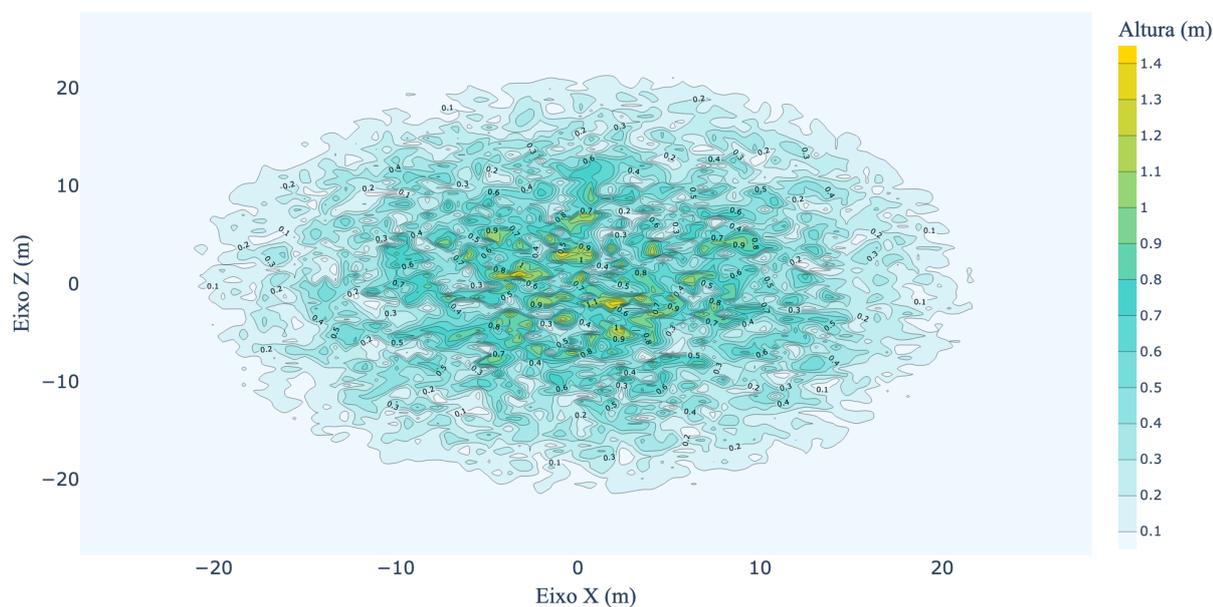


Figura 8.19: Panorama da dispersão de cascalho mínimo para 36 h de perfuração para Marlim.

Em uma fase de perfuração sem *riser* com duração de 36 em uma velocidade de corrente marítima de 0,16 m/s resulta em uma pilha com diâmetro entre 34 m e 42 m e altura dentre 1,43 m e 2,1 m. Devido a velocidade de corrente marítima a posição do centro da pilha de partículas é (0,37;0,01), sendo a posição de injeção de referencia (0;0).

CAPÍTULO IX

CONCLUSÕES

A dinâmica de fluidos computacional é uma ferramenta poderosa para entender o comportamento de escoamentos multifásicos. Esta tese teve como objetivo o estudo e desenvolvimento matemático-computacional de uma modelagem para escoamentos multifásicos com partículas sólidas. A análise desse tipo de escoamento é importante para a eficiência e sustentabilidade de processos industriais.

Este trabalho foi desenvolvido em uma parceria entre o MFLab e a Petrobras e o objetivo era simular computacionalmente as primeiras fases da perfuração de poços de petróleo, fases sem *riser*.

Para tal foi implementada uma rotina adaptativa para advecção de partículas em escoamentos multifásicos usando os modelos de esfera rígida e esfera flexível que apresentou uma redução de até 60% no custo computacional em relação ao uso apenas do DEM. Os modelos SVR e MLP implementados se mostraram uma boa alternativa para substituição de modelos mais complexos de colisão e contato em escoamentos multifásicos com partículas, mas o acoplamento entre estes modelos e o MFSim, inviabilizou momentaneamente o uso dos mesmos para simulações complexas, como é o caso desta tese.

Inicialmente, foram simulados quatro casos usando o modelo DPM para exemplificar de maneira qualitativa a ocorrência de uma distribuição espacial do cascalho em virtude de determinados parâmetros preponderantes em cada estudo de caso. Nesse primeiro estudo de caso foi observado que injetar as partículas com uma velocidade angular é uma boa simplificação em relação ao uso de uma fronteira imersa com rotação para representar a coluna de perfuração. Como era de se esperar as simulações mostraram que uma maior velocidade de corrente marítima

aumenta a dispersão do cascalho na direção preferencial do escoamento. Assim como a utilização do modelo de colisão, mesmo que esse aumento na dispersão devido as colisões tenha sido pouco significativo.

O modelo DEM foi validado em comparação com resultados da literatura e os resultados obtidos representaram bem o crescimento da pilha de cascalho, embora o método apresente um alto custo computacional mesmo usando a rotina adaptativa. As simulações mostraram que o mecanismo de transporte das partículas nesta fase de perfuração se dá essencialmente pela ação gravitacional e posteriormente pelo deslizamento das partículas sobre a pilha formada.

Apesar do pouco tempo simulado, foi possível reconhecer e reproduzir o padrão de crescimento da pilha e assim extrapolar a altura de deposição para uma perfuração com duração de 36 h. Os resultados desta extrapolação mostram uma pilhas significativamente próxima a cabeça do poço, sendo que no pior dos casos um diâmetro de descarte de 42 m. Segundo a literatura, o principal fator de impacto ambiental neste tipo de operação é o soterramento, estando assim o dano ambiental limitado à um raio de 20 m.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABHYANKAR, S. et al. Petsc/ts: A modern scalable ode/dae solver library. *arXiv preprint arXiv:1806.01437*, 2018.
- AGGARWAL, C. *Neural Networks and Deep Learning: A Textbook*. [S.l.]: Chapman and Hall/CRC, 2018.
- AI, J. et al. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. *Powder Technology*, Elsevier, v. 206, n. 3, p. 269–282, 2011.
- ALLETTO, M. *Numerical Investigation of the Influence of Particle–Particle and Particle–Wall Collisions in Turbulent Wall–Bounded Flows at High Mass Loadings*. Tese (Doutorado) — Institut für Mechanik, 2014. Disponível em: <http://edoc.sub.uni-hamburg.de/hsu/volltexte/2014/3077/>.
- ANH, D. T. et al. Deep learning long short-term memory combined with discrete element method for porosity prediction in gravel-bed rivers. *International Journal of Sediment Research*, Elsevier, v. 38, n. 1, p. 128–140, 2023.
- ASCHER, U. M.; RUUTH, S. J.; WETTON, B. T. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 32, n. 3, p. 797–823, 1995. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/0732037>.
- AWAD, M. et al. Support vector regression. *Efficient learning machines: Theories, concepts, and applications for engineers and system designers*, Springer, p. 67–80, 2015.
- BALAY, S. et al. *PETSc Web page*. 2019. Disponível em: <https://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- BARBI, F. et al. Experimentação numérica de bolhas em ascensão. Universidade Federal de Uberlândia, 2016.
- BRENNEN, C. E.; BRENNEN, C. E. *Fundamentals of multiphase flow*. Cambridge university press, 2005.
- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968.
- COETZEE, C. Calibration of the discrete element method. *Powder Technology*, Elsevier, v. 310, p. 104–142, 2017.
- CORTES, C.; VAPNIK, V. Support-vector networks. *Machine learning*, Springer, v. 20, p. 273–297, 1995.

- COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM journal of Research and Development*, IBM, v. 11, n. 2, p. 215–234, 1967. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1147/rd.112.0215⟩](https://doi.org/10.1147/rd.112.0215).
- CROWE, C.; TROUTT, T.; CHUNG, J. Particle interactions with vortices. *Fluid Vortices*, Springer, p. 829–861, 1995.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. A discrete numerical model for granular assemblies. *geotechnique*, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979.
- DAMASCENO, M. M. R.; SANTOS, J. G. de F.; VEDOVOTO, J. M. Simulation of turbulent reactive flows using a fdf methodology—advances in particle density control for normalized variables. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 170, p. 128–140, 2018.
- DENNIS, S.; SINGH, S.; INGHAM, D. The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 101, n. 2, p. 257–279, 1980. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1017/S0022112080001656⟩](https://doi.org/10.1017/S0022112080001656).
- DIAS, G. J.; COUTINHO, A.; MARTINS, R. P. Modelagem tridimensional do lançamento de cascalhos de perfuração de poços de petróleo em águas profundas. In: *CONGRESSO BRASILEIRO DE P&D EM PETRÓLEO E GÁS*. [S.l.: s.n.], 2005. v. 3.
- DING, C.; LAM, K. P. Data-driven model for cross ventilation potential in high-density cities based on coupled cfd simulation and machine learning. *Building and Environment*, Elsevier, v. 165, p. 106394, 2019.
- DURGUT, Í. et al. Dynamic modeling of environmental risk associated with drilling discharges to marine sediments. *Marine pollution bulletin*, Elsevier, v. 99, n. 1-2, p. 240–249, 2015.
- ELIAS, A. J. et al. Modelagem híbrida urans-les para escoamentos turbulentos. Universidade Federal de Uberlândia, 2018.
- FENG, J. et al. Reconstruction of porous media from extremely limited information using conditional generative adversarial networks. *Physical Review E*, APS, v. 100, n. 3, p. 033308, 2019.
- FERREIRA, V. M. V. *A hybrid LES / Lagrangian FDF method on adaptive, block-structured mesh*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015. Disponível em: [⟨https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14982⟩](https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14982).
- FILHO, F. A. O. *O Projeto de Monitoramento Ambiental na Etapa de Perfuração de Poços Marítimos de Óleo e Gás no Brasil: Um Estudo de Caso na Bacia de Campos, Rio de Janeiro. 2012*. Tese (Doutorado) — Dissertação (Mestrado)-Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola ..., 2012.
- FRIES, L. et al. Dem-cfd modeling of a fluidized bed spray granulator. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 66, n. 11, p. 2340–2355, 2011.
- GÉRON, A. *Mãos à Obra: Aprendizado de Máquina com Scikit-Learn & TensorFlow*. [S.l.]: Alta Books, 2021.

- GOLSHAN, S. et al. Lethem: An open-source parallel discrete element solver with load balancing. *Computational Particle Mechanics*, Springer, p. 1–20, 2022.
- HAMMOND, J. et al. Machine learning methods in cfd for turbomachinery: a review. *International Journal of Turbomachinery, Propulsion and Power*, MDPI, v. 7, n. 2, p. 16, 2022.
- HANNA, B. N. et al. Machine-learning based error prediction approach for coarse-grid computational fluid dynamics (cg-cfd). *Progress in Nuclear Energy*, Elsevier, v. 118, p. 103140, 2020.
- HARRISON, M. *Machine Learning—Guia de referência rápida: trabalhando com dados estruturados em Python*. [S.l.]: Novatec Editora, 2020.
- HINWOOD, J. et al. Environmental implications of offshore oil and gas development in australia - drilling activities. In: _____. [S.l.: s.n.], 1994. p. 123–209. ISBN 0 908277 17 2.
- JAYASUNDARA, C.; ZHU, H. Predicting liner wear of ball mills using discrete element method and artificial neural network. *Chemical Engineering Research and Design*, Elsevier, v. 182, p. 438–447, 2022.
- KAJISHIMA, T.; TAKIGUCHI, S. Interaction between particle clusters and particle-induced turbulence. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 23, n. 5, p. 639–646, 2002. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0142-727X\(02\)00159-5](https://doi.org/10.1016/S0142-727X(02)00159-5).
- KEMPE, T.; FRÖHLICH, J. An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 231, n. 9, p. 3663–3684, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.01.021>.
- KLOSS, C. et al. Comprehensive dem-dpm-cfd simulations-model synthesis, experimental validation and scalability. In: *Proceedings of the seventh international conference on CFD in the minerals and process industries, CSIRO, Melbourne, Australia*. [S.l.: s.n.], 2009.
- KLOSS, C. et al. Models, algorithms and validation for opensource dem and cfd-dem. *Progress in Computational Fluid Dynamics, an International Journal*, Inderscience Publishers, v. 12, n. 2-3, p. 140–152, 2012.
- KUSSIN, J.; SOMMERFELD, M. Experimental studies on particle behaviour and turbulence modification in horizontal channel flow with different wall roughness. *Experiments in Fluids*, Springer, v. 33, n. 1, p. 143–159, 2002.
- LAI, Z.; CHEN, Q.; HUANG, L. Machine-learning-enabled discrete element method: Contact detection and resolution of irregular-shaped particles. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Wiley Online Library, v. 46, n. 1, p. 113–140, 2022.
- LAÍN, S.; SOMMERFELD, M. Numerical calculation of pneumatic conveying in horizontal channels and pipes: Detailed analysis of conveying behaviour. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 39, p. 105–120, 2012.
- LAÍN, S.; SOMMERFELD, M. Characterisation of pneumatic conveying systems using the euler/lagrange approach. *Powder Technology*, Elsevier, v. 235, p. 764–782, 2013.

LEE, S.; DURST, F. On the motion of particles in turbulent duct flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 8, n. 2, p. 125–146, 1982.

LIMA, R. S. *Desenvolvimento e implementação de malhas adaptativas bloco–estruturadas para computação paralela em mecânica dos fluidos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2012. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14727>.

LIU, Y. et al. Porosity prediction of granular materials through discrete element method and back propagation neural network algorithm. *Applied Sciences*, MDPI, v. 10, n. 5, p. 1693, 2020.

LIU, Y. et al. Uncertainty quantification for multiphase-cfd simulations of bubbly flows: a machine learning-based bayesian approach supported by high-resolution experiments. *Reliability Engineering & System Safety*, Elsevier, v. 212, p. 107636, 2021.

MAGALHÃES, G. M. et al. Soluções contínuas e discretas de escoamentos cisalhantes livres em regimes laminar e turbulento. Universidade Federal de Uberlândia, 2018.

MARIANO, J. B. Proposta de metodologia de avaliação integrada de riscos e impactos ambientais para estudos de avaliação ambiental estratégica do setor de petróleo e gás natural em áreas offshore. *Rio de Janeiro: Universidade Federal do Rio de Janeiro*, 2007.

MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical biophysics*, Springer, v. 5, p. 115–133, 1943.

MELO, R. R. d. S. et al. Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia da fronteira imersa e malha adaptativa. Universidade Federal de Uberlândia, 2017.

MEZHERICHER, M.; BROSH, T.; LEVY, A. Modeling of particle pneumatic conveying using dem and dpm methods. *Particulate Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 29, n. 2, p. 197–208, 2011.

MICHAELIDES, E.; CROWE, C. T.; SCHWARZKOPF, J. D. *Multiphase flow handbook*. [S.l.]: CRC Press, 2016.

MITCHELL, T. M. Does machine learning really work? *AI magazine*, v. 18, n. 3, p. 11–11, 1997.

MOHAMMADPOUR, J. et al. Machine learning regression-cfd models for the nanofluid heat transfer of a microchannel heat sink with double synthetic jets. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 130, p. 105808, 2022.

MORIKAWA, Y. et al. Pressure drops due to pipe bends in air-solids two phase flows; circular and elliptical bends. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 4, n. 5-6, p. 575–583, 1978.

MOSAVI, A. et al. Prediction of multi-inputs bubble column reactor using a novel hybrid model of computational fluid dynamics and machine learning. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, Taylor & Francis, v. 13, n. 1, p. 482–492, 2019.

- NETO, H. R. et al. Modelagem matemática para a interação fluido-estrutura acoplando escoamentos incompressíveis e viga de timoshenko. Universidade Federal de Uberlândia, 2016.
- NOROUZI, H. R. et al. *Coupled CFD-DEM modeling: formulation, implementation and application to multiphase flows*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016.
- OESTERLE, B.; PETITJEAN, A. Simulation of particle-to-particle interactions in gas solid flows. *International journal of multiphase flow*, Elsevier, v. 19, n. 1, p. 199–211, 1993.
- OEVERMANN, M.; GERBER, S.; BEHRENDT, F. Euler–lagrange/dem simulation of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor. *Particuology*, Elsevier, v. 7, n. 4, p. 307–316, 2009.
- OKHOVAT-ALAVIAN, S. et al. Effect of interparticle force on gas dynamics in a bubbling gas–solid fluidized bed: A cfd-dem study. *Chemical Engineering Research and Design*, Elsevier, v. 152, p. 348–362, 2019.
- OLIVEIRA, D. de; WUC, C.; NANDAKUMAR, K. Numerical investigation of pulsed fluidized bed using cfd-dem: Insights on the dynamics. *Powder Technology*, Elsevier, 2020.
- ORLANSKI, I. A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 21, n. 3, p. 251–269, 1976.
- OTTJES, J. Digital simulation of pneumatic particle transport. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 33, n. 6, p. 783–786, 1978.
- PINHEIRO, A. P. et al. Modelling of aviation kerosene droplet heating and evaporation using complete fuel composition and surrogates. *Fuel*, Elsevier, v. 305, p. 121564, 2021.
- PIVELLO, M. R. et al. A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 58, p. 72–82, 2014.
- POPINET, S. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 228, n. 16, p. 5838–5866, 2009.
- RIBERA, R. L. et al. Understanding the dynamics of gas-liquid-solid contact points. Universidade Federal de Uberlândia, 2015.
- ROSENBLATT, F. The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychological review*, American Psychological Association, v. 65, n. 6, p. 386, 1958.
- RUBINOW, S. I.; KELLER, J. B. The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 11, n. 3, p. 447–459, 1961. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0022112061000640>.
- SANTOS, J. G. d. F. Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-sólido em malha adaptativa dinâmica. Universidade Federal de Uberlândia, 2019.
- SANTOS, P. V. dos. Impactos ambientais causados pela perfuração em busca do petróleo. *Caderno de Graduação-Ciências Exatas e Tecnológicas-UNIT*, v. 1, n. 1, p. 153–163, 2012.

- SANZONE, D.; VINHAEIRO, N.; NEFF, J. *Environmental fates and effects of ocean discharge of drill cuttings and associated drilling fluids from offshore oil and gas operations*. [S.l.], 2018.
- SCHILLER, L. A drag coefficient correlation. *Zeit. Ver. Deutsch. Ing.*, v. 77, p. 318–320, 1933.
- SCHWARZKOPF, J. D. et al. *Multiphase flows with droplets and particles*. [S.l.]: CRC press, 2011.
- SILVEIRA-NETO, A. d. *Escoamentos turbulentos: análise física e modelagem teórica. Uberlândia: Composer, 2020.*
- SMIT, M. G. et al. Species sensitivity distributions for suspended clays, sediment burial, and grain size change in the marine environment. *Environmental Toxicology and Chemistry: An International Journal*, Wiley Online Library, v. 27, n. 4, p. 1006–1012, 2008.
- SOMMERFELD, M. Modelling of particle-wall collisions in confined gas-particle flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 18, n. 6, p. 905–926, 1992.
- SOMMERFELD, M. Theoretical and experimental modelling of particulate flows. *Lecture Series 2000-06*, von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2000. Disponível em: <https://pt.scribd.com/document/210268575/2000-Modelling-Particulate-Flows>.
- SOMMERFELD, M. Numerical methods for dispersed multiphase flows. In: *Particles in Flows*. [S.l.]: Springer, 2017. p. 327–396.
- SOMMERFELD, M.; ZIVKOVIC, G. Recent advances in the numerical simulation of pneumatic conveying through pipe systems. *Computational methods in applied sciences*, Elsevier Amsterdam, v. 201, p. 201–212, 1992.
- STIVAL, L. J. L. *Large eddy simulation of the atmospheric flow around wind turbines with the use of immersed boundary method*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2022.
- STROH, A. et al. Coarse grain 3d cfd-dem simulation and validation with capacitance probe measurements in a circulating fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 196, p. 37–53, 2019.
- SYED, Z.; TEKESTE, M.; WHITE, D. A coupled sliding and rolling friction model for dem calibration. *Journal of Terramechanics*, Elsevier, v. 72, p. 9–20, 2017.
- TANAKA, T. Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a vertical pipe: on the effect of inter particle collision. *Gas-Solid Flows 1991*, v. 123, 1991.
- TSUJI, T.; YABUMOTO, K.; TANAKA, T. Spontaneous structures in three-dimensional bubbling gas-fluidized bed by parallel dem-cfd coupling simulation. *Powder Technology*, Elsevier, v. 184, n. 2, p. 132–140, 2008.
- TSUJI, Y.; MORIKAWA, Y. Ldv measurements of an air—solid two-phase flow in a horizontal pipe. *Journal of fluid mechanics*, Cambridge University Press, v. 120, p. 385–409, 1982.
- TSUJI, Y.; MORIKAWA, Y.; SHIOMI, H. Ldv measurements of an air-solid two-phase flow in a vertical pipe. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 139, p. 417–434, 1984.

- TSUJI, Y. et al. Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a two-dimensional horizontal channel. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 13, n. 5, p. 671–684, 1987.
- TSUJI, Y.; SHEN, N.; MORIKAWA, Y. Numerical simulation of gas-solid flows. i. particle-to-wall collision. *Technol. Rep. Osaka Univ.*, v. 39, n. 1959, p. 233–241, 1989.
- TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. *Powder Technology*, Elsevier, v. 71, n. 3, p. 239–250, 1992. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(92\)88030-L](https://doi.org/10.1016/0032-5910(92)88030-L).
- UHLMANN, M. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 209, n. 2, p. 448–476, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.03.017>.
- VAPNIK, V.; LERNER, A. Y. Recognition of patterns with help of generalized portraits. *Avtomat. i Telemekh.*, v. 24, n. 6, p. 774–780, 1963.
- VARAKSIN, A. Y.; POLEZHAEV, Y. V.; POLYAKOV, A. F. Experimental investigation of the effect of solid particles on turbulent flow of air in a pipe. *Teplofizika vysokikh temperatur*, Russian Academy of Sciences, Branch of Power Industry, Machine Building . . . , v. 36, n. 5, p. 767–775, 1998.
- VARAKSIN, A. Y.; POLEZHAEV, Y. V.; POLYAKOV, A. F. Effect of particle concentration on fluctuating velocity of the disperse phase for turbulent pipe flow. *International journal of heat and fluid flow*, Elsevier, v. 21, n. 5, p. 562–567, 2000.
- VEDOVOTO, J. M. *Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using a hybrid LES/PDF methodology*. Tese (Doutorado) — Chasseneuil-du-Poitou, Ecole nationale supérieure de mécanique et d . . . , 2011.
- VEDOVOTO, J. M.; SERFATY, R.; NETO, A. D. S. Mathematical and numerical modeling of turbulent flows. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, SciELO Brasil, v. 87, p. 1195–1232, 2015.
- VEIGA, L. F. *AVALIAÇÃO DE RISCO ECOLÓGICO DOS DESCARTES DA ATIVIDADE DE PERFURAÇÃO DE POÇOS DE ÓLEO E GÁS EM AMBIENTES MARINHOS*. Tese (Doutorado) — Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2010.
- VILLAR, M. M. et al. Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais. Universidade Federal de Uberlândia, 2007.
- WANG, D.; RUUTH, S. J. Variable step-size implicit-explicit linear multistep methods for time-dependent partial differential equations. *Journal of Computational Mathematics*, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, v. 26, n. 6, p. 838–855, 2008. Disponível em: <https://www.jstor.org/stable/43693484>.
- WANG, Z.; FAN, J.; LUO, K. Combined multi-direct forcing and immersed boundary method for simulating flows with moving particles. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 34, n. 3, p. 283–302, 2008.

WATKINS, C. J. C. H. Learning from delayed rewards. King's College, Cambridge United Kingdom, 1989.

YU, H.; KIM, S. Svm tutorial-classification, regression and ranking. *Handbook of Natural computing*, v. 1, p. 479–506, 2012.

ZHAO, Y. et al. Rans turbulence model development using cfd-driven machine learning. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 411, p. 109413, 2020.

ZHONG, W. et al. Dem simulation of gas–solid flow behaviors in spout-fluid bed. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 61, n. 5, p. 1571–1584, 2006.