

Gabriel Marcos Magalhães

**MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS MULTIFÁSICOS
EM MALHA ADAPTATIVA BLOCO ESTRUTURADA
UTILIZANDO MÉTODO MULTI DIRECT FORCING**

Uberlândia

2022

Gabriel Marcos Magalhães

**Modelagem matemática e computacional de escoamentos
turbulentos multifásicos em malha adaptativa bloco
estruturada utilizando método Multi Direct Forcing.**

Universidade Federal de Uberlândia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Laboratório de Mecânica dos Fluidos

Orientador: Aristeu da Silveira Neto

Uberlândia
2022

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

M188 Magalhães, Gabriel Marcos, 1995-
2022 Modelagem matemática e computacional de escoamentos
turbulentos multifásicos em malha adaptativa bloco
estruturada utilizando método Multi Direct Forcing.
[recurso eletrônico] / Gabriel Marcos Magalhães. - 2022.

Orientador: Aristeu Silveira Neto.

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

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2022.342>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Engenharia mecânica. I. Silveira Neto, Aristeu ,
1955-, (Orient.). II. Universidade Federal de
Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. III.
Título.

CDU: 621

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



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34) 3239-4282 - www.posgrad.mecanica.ufu.br - secposmec@mecanica.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Tese de Doutorado Acadêmico, nº 335, COPEM				
Data:	25/07/2022	Hora de início:	08:00	Hora de encerramento:	10:35
Matrícula do Discente:	11823EMC005				
Nome do Discente:	Gabriel Marcos Magalhães				
Título do Trabalho:	Modelagem matemática e computacional de escoamentos turbulentos multifásicos em malha adaptativa bloco estruturada utilizando o método Multi Direct Forcing				
Área de concentração:	Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos				
Linha de pesquisa:	Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor				
Projeto de Pesquisa de vinculação:					

Reuniu-se, via webconferência, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Francisco José de Souza - FEMEC/UFU; Daniel Dall'Onder dos Santos - FEMEC/UFU; Antônio Castelo Filho - ICMC/USP; Jovani Luiz Fávero - WIKKI Brasil; e Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos, o presidente da mesa, Dr. Aristeu da Silveira Neto, 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). Ultimeada 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 **Aristeu da Silveira Neto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 25/07/2022, às 10:36, 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 **Daniel Dall'Onder dos Santos, Professor(a) do Magistério Superior**, em 25/07/2022, às 10:37, 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 **Francisco José de Souza, Professor(a) do Magistério Superior**, em 25/07/2022, às 10:37, 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 **Antonio Castelo Filho, Usuário Externo**, em 25/07/2022, às 10:38, 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 **Jovani Luiz Favero, Usuário Externo**, em 25/07/2022, às 10:39, 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 **3755537** e o código CRC **FB497A5F**.

"Há muitos planos no coração do homem, mas é a vontade do Senhor que se realiza."

Pr 19,21

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar a Deus, por me capacitar, conduzir e colocar pessoas fantásticas em meu caminho ao longo deste trabalho.

Aos meus pais, Walda e Alexsander, meus primeiros e eternos orientadores, que sempre me apoiaram e incentivaram em todos os momentos de minha caminhada. À minha irmã Aline, pela constante companhia e apoio.

À Barbara Scaramussa, pelo companheirismo, carinho e por ser constante instrumento de Deus em minha vida, acompanhando minhas batalhas diárias há mais de 10 anos e me apoiando em todas as situações.

Ao Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto, meu orientador desde 2014 e fonte de inspiração, por abrir as portas do Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab), pela dedicação e paciência constante na orientação deste trabalho, pelos ricos conselhos e constante exemplo.

À Millena Villar e ao professor João Marcelo por todo o suporte e orientação ao longo do trabalho.

A todos os meus amigos e de forma especial Franco, Hélio, Amanda, Lange, Rodrigo e Abgail pelo constante incentivo.

À Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia e à coordenação do Programa de Pós-graduação pelo suporte e infraestrutura necessários para a realização dos trabalhos.

Aos colegas do laboratório pela troca de conhecimento, colaboração e grande amizade e companheirismo durante o desenvolvimento deste trabalho.

À PETROBRAS pelo apoio a esta pesquisa.

MAGALHÃES, G.M., **Modelagem matemática e computacional de escoamentos turbulentos multifásicos em malha adaptativa bloco estruturada utilizando método Multi Direct Forcing**. 2022. 149f. Tese de doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

Escoamentos em tubulações horizontais onde coexistem uma fase líquida e uma fase gasosa são comuns em diversos seguimentos da indústria. A distribuição de ambas as fases pode assumir diferentes formas, as quais são também conhecidas como padrões de escoamento. A caracterização desses escoamentos pode ajudar a prever, por exemplo, taxas de erosão e corrosão, além das oscilações de pressão ao longo do tempo e do duto, que podem provocar vibrações ou deformações mecânicas no duto. O objetivo do presente trabalho é analisar, por meio de simulações computacionais, a transição entre os padrões estratificado e pistonado em tubulações horizontais. A plataforma numérica utilizada é um código de malha bloco estruturada adaptativa desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia, chamado MFSim. Devido às características do problema físico abordado e da plataforma numérica utilizada, ao longo do trabalho foram desenvolvidas e testadas modelagens relativas a escoamentos turbulentos, escoamentos multifásicos e tratamentos para representação de corpos imersos em malhas estruturadas, os chamados métodos de fronteira imersa. Dentre os desenvolvimentos realizados, cabe destacar um método de multi forçagem direta para k e ϵ utilizado em simulações com modelos de turbulência da classe $k - \epsilon$. São apresentados testes de diversas funcionalidades envolvidas no método de fronteira imersa e no método para tratamento de escoamentos bifásicos utilizado, o *Volume of Fluid* (VOF). Ao final, são apresentados os resultados e as análises de simulações computacionais da transição entre os padrões estratificado e pistonado em tubulações horizontais com seções retangulares e circulares. Os resultados foram comparados com valores de referência da literatura obtidos via experimentos materiais e simulações computacionais. Quando comparado com outros códigos, observou-se que o desempenho do MFSim na predição de parâmetros como tempo e localização de formação do primeiro pistão e *holdup* médio esteve acima do obtido por meio de outros códigos. Em síntese, o método implementado e os demais desenvolvimentos realizados neste trabalho representam um importante avanço envolvendo a plataforma MFSim para a simulação de um novo problema que contempla uma série de mecanismos físicos complexos.

Palavras chave: Escoamentos multifásicos; padrões de escoamentos bifásicos; escoamentos pistonados; fronteira imersa; modelos de turbulência URANS.

MAGALHÃES, G. M., **Mathematical and computational modeling of multi-phase turbulent flows in a structured block adaptive grid using the Multi Direct Forcing method.** 2022. 149f. PhD Thesis, Federal University of Uberlândia, Uberlândia.

Flows in horizontal pipes where a liquid phase and a gas phase coexist are common in many fields of the industry. The distribution of phases can take different forms, known as flow patterns. The characterization of these flows can help to predict, for example, erosion and corrosion rates, in addition to pressure fluctuations over time and in the duct, which can cause vibrations or mechanical deformations. The objective of the present work is to analyze, through computer simulations, the transition between the stratified flow and slug flow patterns in horizontal pipes. The numerical platform used is an adaptive structured block mesh code developed at the Fluid Mechanics Laboratory of the Federal University of Uberlândia, called MFSim. Due to the characteristics of the physical problem addressed and the numerical platform used, throughout the work, modeling related to turbulent flows, multi-phase flows, and treatments for the representation of immersed bodies in structured meshes, the so-called immersed boundary methods, were developed, and tested. Among the developments, it is worth highlighting a multi-direct forcing method for k and ϵ used in simulations with turbulence models of the $k - \epsilon$ class. Are presented tests of several functionalities involved in the immersed boundary method and in the methodology for treating two-phase flows used, the *Volume of Fluid* (VOF). At the end are presented the results and analysis of computer simulations of the transition between the stratified and slug patterns in horizontal pipes with rectangular and circular sections. The results and reference values from the literature obtained with experiments and computer simulations were compared. It was observed that, compared with other codes, the MFSim performance in the prediction of parameters such as time and location of first slug formation and average holdup was above that obtained through other codes. In summary, the method implemented and the developments in this work represent an expressive advance involving the MFSim platform for the simulation of a new problem that includes a series of complex physical mechanisms.

Keywords: Multi-phase flow; two-phase flow patterns; slug flow; immersed boundary model; URANS turbulence models.

Lista de Figuras

2.1	Representação da diferença entre (a) uma malha conforme e (b) uma malha para modelagem via IBM.	10
2.2	Esquema da representação de uma interface em um sistema bidimensional com uma função de uma variável.	13
2.3	Representação de uma interface, em cenário bidimensional, por meio de pontos marcadores.	15
2.4	Representação de três métodos de modelagem para escoamentos bifásicos, (a) <i>front-tracking</i> ; (b) VOF; (c) <i>level-set</i> ; (A linha azul representa a interface entre fluidos, a região cinza representa a fase 1, os pontos azuis em (a) representam os pontos marcadores, os números em (b) representam a fração volumétrica da fase 1 em cada célula e a função em (c) representa a função ϕ do <i>level-set</i>).	16
2.5	Padrões de escoamentos em tubulações horizontais.	18
2.6	Regiões de ocorrência para cada padrão de escoamento gás-líquido em tubulações horizontais.	21
2.7	Mapa de padrões de escoamento em tubulações horizontais gerado pela correlação de Beggs and Brill.	23
2.8	Gráfico de padrões construído com dados experimentais de um escoamento ar-água a 25° em um tubo vertical de 5 cm de diâmetro.	24
2.9	Representação da transição entre os padrões estratificado e <i>slug</i>	25
2.10	Esquematização das propriedades e caracterização de um pistão no padrão de escoamento pistonado.	26
3.1	Representação de uma malha computacional cartesiana bidimensional	32
3.2	Malha adaptativa do MFSim. (a) Representação do esquema de níveis e (b) exemplo de uma malha multinível com corpo imerso (representado pela malha lagrangiana vermelha).	34
3.3	Exemplo do refinamento de malha bloco estruturada adaptativa. O desprendimento de vórtices atrás de uma bolha em ascensão foi usado como critério de refinamento baseado no gradiente de vorticidade.	34
3.4	Algoritmo do modelo de tratamento próximo a parede dentro do MFSim.	48
3.5	Algoritmo do MDF para a propriedade k	51
3.6	Discretização de ∇C_{ij} nos planos i e j	59
3.7	Discretização de ∇C_{ik} nos planos i e k	60
3.8	Representação das células utilizadas para estimativa da curvatura pelo método de Shirani. Cubo 3 x 3 (cinza) em um cubo 5 x 5.	61

3.9	Zoom em diferentes partes do cubo 3 x 3 da Fig. 3.8.	61
3.10	Exemplo bidimensional do estêncil 7×3 utilizado para construir as funções altura.	63
3.11	Reconstrução da solução VOF para uma advecção em duas dimensões. (a) Interface original. (b) Reconstrução SLIC original. (c) Reconstrução de Hirt e Nichols (1981). (d) Reconstrução PLIC.	65
3.12	Representação esquemática da advecção bidimensional de uma interface.	67
3.13	Campo original da função indicadora. A linha rosa é o cilindro modelado com fronteira imersa.	72
3.14	Campo da função indicadora limitada com LIM1.	72
3.15	Campo da função indicadora limitada com LIM2.	73
4.1	Perfil de velocidade normalizado obtido por meio de simulações sem fronteira imersa, utilizando diferentes condições de contorno para ϵ	76
4.2	Perfil de ϵ normalizado obtido por meio de simulações sem fronteira imersa, utilizando diferentes condições de contorno para ϵ	77
4.3	Perfil de velocidade média adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13\,750$	78
4.4	Perfil de velocidade média de parede (u_τ) adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13\,750$	78
4.5	Perfil de energia cinética turbulenta (k) adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13.750$	79
4.6	Perfil da potência de transformação viscosa (ϵ) adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13.750$	79
4.7	Malhas euleriana (Ω) e lagrangiana (Γ) no instante inicial.	80
4.8	Campo instantâneo de magnitude da vorticidade junto a malha no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão.	81
4.9	Campo instantâneo de energia cinética turbulenta (k) no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão.	82
4.10	Campo instantâneo de ϵ no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão.	82
4.11	Interface elíptica utilizada nos testes para avaliação de ordem dos métodos de avaliação do vetor normal à interface.	86
4.12	Comparação entre os valores das normas L_2 e L_∞ obtidos utilizando os métodos MYCS (Tab. 4.4) e ELVIRA (Tab. 4.5) para avaliação dos vetores normais a uma interface elíptica (Fig. 4.11).	89
4.13	Representação esquemática das formas inicial (-) e de equilíbrio (- -) de uma gota em uma superfície plana com ângulo de contato estático sem gravidade ($Eo = 0$).	94
4.14	Inicialização da fração volumétrica na simulação realizada.	95
4.15	Isocontorno $\alpha = 0.5$ no instante em que a gota atinge a posição de equilíbrio para o caso em que $\theta_s = 90^\circ$ e $Eo = 0$	96

4.16	Comparação entre a solução analítica (linha preta) e o resultado numérico (pontos vermelhos) para o caso em que $\theta_s = 90^\circ$ e $EO = 0$, sem a utilização de modelagem para ponto de contato triplo.	96
4.17	Formas de gota de equilíbrio e altura de gota adimensional h^* em uma superfície plana com número de Eötvös: resultados numéricos de Patel et al. (2017) (\square), soluções assintóticas da Eq. (4.17) (-) e Eq. (4.20) (-).	98
4.18	Comparação da altura obtida via simulação computacional com o valor analítico para casos em que $\theta_s = 90^\circ$ e $EO > 0$	99
4.19	Interface obtida para a gota em posição de equilíbrio em um sistema caracterizado por $EO = 50$ simulado com o MFSim.	99
4.20	Interface obtida para a gota em posição de equilíbrio em um sistema caracterizado por $EO = 5$ simulado com o MFSim.	100
4.21	Interface obtida para a gota em posição de equilíbrio em um sistema caracterizado por $EO = 3$ simulado com o MFSim.	100
4.22	Modelo diagramático do experimento material realizado no FZD.	102
4.23	Representação das seções onde foram avaliados os níveis de água no experimento material.	102
4.24	Nível de água ao longo do tempo nos primeiros 2,5 segundos de escoamento nas seções apresentadas na Fig. 4.23. Comparação entre o sinal experimental (azul) e os resultados com as configurações de malha C1 (laranja), C2 (verde) e C3 (vermelha).	109
4.25	Comparação dos resultados do nível médio de água obtidos nas simulações com configuração de malha C1, C2 e C3 com os valores experimentais.	110
4.26	Comparação dos resultados do nível médio de água obtidos nas simulações com configuração de malha C3 e C6 com os valores experimentais.	110
4.27	Visualização da interface (colorida pela cor azul) entre $x = 0,4$ m e $x = 3,6$ m na configuração de malha C1.	111
4.28	Vista do plano Y-Z do domínio simulado. Domínio complementar (região marron), domínio de interesse (região cinza) e superfície imersa (linha verde).	114
4.29	Vista do plano X-Z do domínio simulado.	115
4.30	Visualização do campo de fração volumétrica em diferentes tempos.	117
4.31	Visualização do campo de fração volumétrica em $t = 2,358$ s no intervalo $x = 1,0-2,5$ m.	117
4.32	Visualizações do campo de fração volumétrica no tempo aproximado de formação do primeiro slug.	120
4.33	Visualização do campo de (a)pressão e (b)velocidade no tempo aproximado de formação do primeiro slug.	121
4.34	Visualização do campo de fração volumétrica em diferentes tempos.	121

Lista de Tabelas

2.1	Cr�terios utilizados para a caracteriza�o de regime na correla�o de Beggs e Brill.	23
3.1	Valores dos par�metros envolvidos na Eq. (3.15) para utiliza�o de diferentes esquemas de integra�o temporal atrav�s da metodologia VSIMEX.	36
3.2	Algumas express�es para a fun�o δ propostas na literatura.	53
4.1	Compara�o dos valores para o coeficiente de arrasto no escoamento sobre um cilindro com diferentes n�meros de Reynolds.	83
4.2	Tabela comparativa do erro relativo e custo computacional para inicializa�o de uma esfera com raio 0.1 em um dom�nio unit�rio com diferentes malhas.	85
4.3	Tabela comparativa do erro relativo e custo computacional para inicializa�o de uma esfera com raio da ordem do espa�amento da malha em um dom�nio unit�rio.	86
4.4	Avalia�o da ordem do m�todo MYCS (YOUNGS, 1982) implementado no MFSim de acordo com os valores das normas L_2 e L_∞ no caso de uma interface el�ptica.	88
4.5	Avalia�o da ordem do m�todo ELVIRA (PILLIOD, 1992 apud JR; PUCKETT, 2004) implementado no MFSim via IRL de acordo com os valores das normas L_2 e L_∞ no caso de uma interface el�ptica.	88
4.6	Resultados dos diferentes m�todos de reconstru�o da IRL em um teste de deforma�o de uma esfera 2D. Tempo de reconstru�o avaliado na �ltima itera�o.	91
4.7	Resultados dos diferentes m�todos de advec�o da IRL em um teste de deforma�o de uma esfera 2D. Tempo de advec�o avaliado na �ltima itera�o.	91
4.8	Resultados dos diferentes m�todos de reconstru�o da IRL em um teste de deforma�o de uma esfera 3D comparados com o resultado do MFSim utilizando um passo de tempo $\Delta t = 1e - 2$. Tempo de reconstru�o e advec�o avaliados na �ltima itera�o.	92
4.9	Resultados dos diferentes m�todos de reconstru�o da IRL em um teste de deforma�o de uma esfera 3D comparados com o resultado do MFSim utilizando um passo de tempo $\Delta t = 1e - 3$. Tempo de reconstru�o e advec�o avaliados na �ltima itera�o.	93
4.10	Par�metros utilizados nas simula�es do teste 1 sem fronteira imersa	95

4.11	Erros relativos para h_f e r_f no caso da gota em equilíbrio para $\theta_s = 90^\circ$ e $EO = 0$, sem a utilização de modelagem para ponto de contato triplo.	97
4.12	Condições de contorno utilizadas na simulação do <i>slug</i> retangular. . .	104
4.13	Configurações de malha para as simulações realizadas no MFSim. . .	105
4.14	Tabela comparativa da distância e do tempo de formação do primeiro slug utilizando os códigos computacionais MFSim, CFX, STAR-CCM+ e Fluent.	106
4.15	Máxima frequência identificada na FFT do nível médio de água na seção que dista 3,18 m da entrada de fluido. Comparação entre o valor do experimento material e os obtidos nas simulações computacionais com configuração C1, C2 e C3.	110
4.16	Tabela informativa das simulações realizadas por Frank (2005).	112
4.17	Tabela com as condições de contorno (CC) utilizadas em cada face do domínio para velocidades e pressão na simulação da transição estratificado-slug em uma tubulação circular, sem a consideração de periodicidade.	115
4.18	Tabela com as condições de contorno (CC) utilizadas em cada face do domínio para velocidades e pressão na simulação da transição estratificado-slug em uma tubulação circular considerando-se periodicidade.	118
4.19	Tabela comparativa da localidade e do tempo de formação do primeiro slug nas simulações computacionais com domínio periódico.	120

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	10
LISTA DE TABELAS	12
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 O código MFSim	2
1.2 Contextualização do trabalho	3
1.3 Estrutura da tese	5
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
2.1 Metodologia RANS/URANS	8
2.2 Métodos de fronteira imersa	10
2.3 Métodos de fronteira imersa para modelos do tipo RANS/URANS	11
2.4 Modelagem numérica de escoamentos bifásicos	13
2.5 Transição entre padrões de escoamentos gás-líquido	17
2.5.1 Mapas de regimes para escoamentos bifásicos	19
2.5.2 Transição entre os padrões estratificado e pistonado (<i>stratified-slug</i>)	25
3 METODOLOGIA	28
3.1 Modelagem matemática diferencial	28
3.1.1 Conceito de viscosidade turbulenta	30
3.2 Modelagem matemática numérica	32
3.2.1 Esquema de integração temporal	35
3.2.2 Tratamento do termo advectivo	36
3.2.3 Acoplamento pressão-velocidade	37
3.2.4 Solução dos sistemas lineares	38
3.3 Modelo sub-malha de Smagorinsky	39
3.4 Modelo de fechamento $k - \epsilon$ padrão	40
3.4.1 Modelo matemático diferencial	42
3.4.2 Modelo matemático numérico	42
3.4.3 Modelo a duas camadas	46
3.5 Modelagem para a simulação de escoamentos com a presença de corpos imersos utilizando modelos de turbulência da classe $k-\epsilon$	48
3.5.1 Metodologia de forçagem para k e ϵ	49
3.5.2 Condições de contorno para ϵ em paredes	51
3.6 Força interfacial	52

3.7	Inicialização do campo da função marcadora de fases para o método VOF	54
3.7.1	Inicialização por sub células	54
3.7.2	Inicialização por pontos	55
3.7.3	Inicialização pela biblioteca VOFI	55
3.8	Estimativa de curvatura e normais no método VOF	57
3.8.1	Estimativa dos vetores normais à superfície	57
3.8.2	Cálculo da curvatura através do método de Shirani, Ashgriz e Mostaghimi (2005)	58
3.8.3	Cálculo da curvatura através do método função altura	62
3.9	Reconstrução e advecção da interface no método VOF	64
3.9.1	O método PLIC - <i>Piecewise Linear Interface Calculation</i>	66
3.9.2	Propagação da interface	67
3.10	A biblioteca externa <i>Interface Reconstruction Library</i> - IRL	68
3.11	Função indicadora de domínios aplicada à advecção da interface entre fluidos	70
4	RESULTADOS	75
4.1	Simulação de escoamentos monofásicos com a presença de corpos imersos utilizando modelos de turbulência da classe k- ϵ	75
4.1.1	Caso 1: escoamento em um canal plano	75
4.1.2	Caso 2: escoamento sobre um cilindro	80
4.2	Simulações de casos simplificados utilizando a modelagem VOF	84
4.2.1	Testes de verificação da inicialização do campo de fração volumétrica	84
4.2.2	Teste de verificação do cálculo de normais	86
4.2.3	Teste de verificação do método de reconstrução - Deformação de uma esfera	89
4.2.4	Simulação de uma gota apoiada	93
4.3	Aplicação: estudo da transição de escoamentos estratificados para pistonados em um canal plano	101
4.3.1	Detalhamento do experimento material	101
4.3.2	Detalhamento da simulação computacional utilizando o código MFSim	102
4.3.3	Resultados das simulações computacionais	105
4.4	Aplicação: estudo da transição de escoamentos estratificados para pistonados em tubulações de seção circular	111
4.4.1	Detalhes do trabalho de Frank (2005)	111
4.4.2	Simulações no código computacional MFSim	113
5	CONCLUSÕES	123

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Escoamentos bifásicos envolvendo gás, água e óleo são muito comuns em diversos segmentos industriais como, por exemplo, em operações realizadas durante o processo de extração e refino do petróleo. Nesse tipo de escoamento a mistura bifásica de líquido e gás pode assumir diferentes formas e distribuições no interior da tubulação. Os padrões do escoamento estão diretamente relacionados com fatores como, por exemplo, vazões das fases do escoamento, propriedades físicas dos fluidos, orientação da tubulação e geometria do duto.

O entendimento e a predição de características dos escoamentos bifásicos em tubulações auxilia a definição de parâmetros de projetos das linhas de transporte onde esse tipo de escoamento ocorre. A caracterização pode ajudar a prever, por exemplo, taxas de erosão e corrosão, além de pontos onde devem ser inseridos tratamentos especiais de fixação, pois a tubulação pode estar sujeita a vibrações ou deformações mecânicas.

Nesse sentido, a experimentação computacional de tais tipos de escoamento é uma ferramenta com alto potencial. Para a experimentação computacional são necessárias as modelagens física e matemática do problema de interesse. A modelagem matemática consiste na obtenção de equações diferenciais, integrais e/ou integro-diferenciais que representam a física do problema e, posteriormente, utilizar métodos numéricos apropriados para a discretização das equações.

A experimentação computacional de escoamentos bifásicos em tubulações horizontais é de grande valia pois possibilita a análise do impacto que diversos parâmetros envolvidos geram no escoamento. É possível analisar, por exemplo, como as vazões ou as propriedades do fluido influenciam na transição entre regimes de escoamento ou como as características do escoamento mudam ao se variar o diâmetro da tubulação.

Conforme apresentado anteriormente, as simulações computacionais são uma alternativa viável para a análise de problemas complexos. Porém, é preciso que o código computacional que será utilizado possua modelos adequados para a representação dos fenômenos físicos envolvidos. No caso da transição entre padrões de escoamentos bifásicos em tubulações horizontais, aplicação que é o foco da tese, são necessários modelos para a representação de escoamentos bifásicos, além de modelos de turbulência e de interação entre fluido e parede. O nível de complexidade pode aumentar de acordo com o tipo de malha computacional que o código exige, com a forma de processamento (serial ou paralelo), dentre outras características.

A pesquisa em desenvolvimento apresentada neste trabalho é resultado de cooperação entre o Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab) da Universidade Federal de Uberlândia (UFU) com a empresa Petróleo Brasileiro S.A. (Petrobras). Em toda a parte computacional do trabalho utilizou-se como base o código computacional MFSim, que está sendo desenvolvido no MFLab há mais de 18 anos. Utilizando o MFSim é possível a simulação computacional de problemas com diferentes níveis de complexidade, envolvendo diversos fenômenos físicos. No desenvolvimento do presente trabalho foram implementados novos métodos no código, como um método de multi-forçagem direta para k e ϵ no modelo URANS $k - \epsilon$ e a inicialização do campo de fração volumétrica por integral, por meio de uma biblioteca externa. Além disso, a base da modelagem implementada para escoamentos bifásicos foi submetida a testes de verificação e processos de otimização. Na seção seguinte é apresentada uma breve introdução sobre o MFSim, que terá suas metodologias abordadas de forma mais detalhada no capítulo 3.

1.1 O código MFSim

O código computacional MFSim iniciou-se com o trabalho de Villar et al. (2007) sobre escoamentos multifásicos, e vem sendo desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia (UFU), em parceria com a PETROBRAS. O código está sendo escrito, em sua maior parte, na linguagem Fortran90, apresentando algumas partes onde a linguagem C é utilizada. Atualmente, o conjunto de metodologias presentes permite aos usuários simular, utilizando processamento paralelo, uma diversidade de problemas pseudo bidimensionais e tridimensionais que envolvem escoamentos turbulentos. Entre as possibilidades oferecidas pelo código MFSim estão a simulação de escoamentos reativos (VEDOVOTO et al., 2011; DAMASCENO et al., 2018), escoamentos na presença de corpos imersos (MELO, 2017; MARTINI et al., 2021; NETO et al., 2021), bifásicos (BARBI, 2016; SANTOS, 2017), particulados (SANTOS et al., 2019), não isotérmicos (DUARTE et al., 2018) e fluido estrutura (NETO et al., 2016; ÁVILA et al., 2021).

No MFSim, a discretização espacial das equações de balanço relativas ao domínio euleriano, onde o fluido é resolvido, emprega o método dos volumes finitos (MVF) com um arranjo deslocado para as componentes da velocidade. Para isso, uma malha adaptativa bloco-estruturada é utilizada. A utilização dessa metodologia de malha possibilita o uso de refinamento fixo local ou a utilização de critérios baseados em propriedades do escoamento para definir o posicionamento dos níveis de refinamento dinamicamente.

Para a discretização temporal das equações de balanço estão disponíveis desde métodos explícitos de primeira ordem até métodos semi-implícitos de segunda ordem. Nesse sentido, o passo de tempo varia ao decorrer das simulações para atender a restrição temporal desses métodos. As equações de balanço de quantidade de movimento linear estão discretizadas tanto na forma divergente como na forma não divergente, de modo que a escolha por uma dessas formas fica a critério do 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). Além disso,

os sistemas lineares resultantes, correspondentes às equações de balanço, podem ser solucionados através do método multigrid-multinível (VILLAR et al., 2007) ou utilizando a biblioteca PETSc (BALAY et al., 2022a; BALAY et al., 2022b).

A metodologia utilizada ao longo do presente trabalho para a simulação de corpos imersos é baseada no trabalho de Wang, Fan e Luo (2008a) e, portanto, um método de fronteira imersa de interface difusa. Este método já estava implementado no código MFSim para as equações de balanço de quantidade de movimento linear (NETO et al., 2016) e de energia (MELO, 2017).

Inicialmente o código foi desenvolvido para trabalhar com a metodologia LES mas, com o trabalho de Melo (2017), começaram a ser inseridos modelos de fechamento da classe URANS. As implementações dos modelos de fechamento $k - \epsilon$ padrão e $k - \epsilon$ realizável, os quais também são modelos de fechamento pertencentes à classe URANS, foram adicionadas ao código como parte do trabalho de Magalhães et al. (2018).

Para a modelagem de escoamentos bifásicos, foi implementado o método VOF (em inglês, *Volume of Fluid*) como parte dos trabalhos de Ribera et al. (2015) e Barbi (2016). Para a reconstrução da interface entre fluidos, é utilizado o método PLIC (em inglês, *Piecewise Linear Interface Calculation*) (DEBAR, 1974; YOUNGS, 1982). A base da metodologia presente no MFSim para o método VOF é o trabalho de Popinet (2009).

No capítulo 3 os métodos do código utilizados como parte do presente trabalho serão detalhados tanto em termos de formulação matemática quanto em termos de formulação numérica e detalhes da implementação.

1.2 Contextualização do trabalho

O objetivo geral almejado com o trabalho é o desenvolvimento e a implementação de modelos para a simulação computacional de escoamentos gás-líquido em regime turbulento. Pretende-se abranger escoamentos confinados ou não, adequando os modelos à possibilidade do uso de malhas adaptativas e processamento paralelo.

Diferentes tópicos podem ser descritos para melhor caracterizar o objetivo da tese:

- Desenvolver uma modelagem para o uso do método de multi forçagem direta (em inglês, *Multi-Direct Forcing* - MDF) com modelos de turbulência do tipo $k-\epsilon$, algo que não foi encontrado na literatura estudada;
- Avaliar resultados e custos do modelo desenvolvido em escoamentos internos e externos monofásicos;
- Desenvolver modelagens que possibilitem o uso do método *Multi-Direct Forcing* com modelos de turbulência do tipo $k-\epsilon$ em escoamentos multifásicos;
- Realizar a simulação computacional de escoamentos pistonados (*slug flow*) em tubulações horizontais utilizando modelos de turbulência LES (*Large Eddy Simulation*) e URANS (Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes);

Escoamentos bifásicos envolvendo gás, água e óleo são muito comuns em operações realizadas durante o processo de extração e refino do petróleo. Nesse tipo de escoamento a mistura bifásica de líquido e gás pode assumir diferentes formas e distribuições no interior da tubulação. Os padrões do escoamento estão diretamente relacionados com fatores como, por exemplo, vazões das fases do escoamento, propriedades físicas dos fluidos, orientação e geometria do duto. O conhecimento do padrão de um escoamento multifásico pode ser muito útil para a determinação de diversas propriedades que são de grande interesse no contexto de projetos ou análise de sistemas.

O foco do trabalho é desenvolver e implementar modelos que possibilitem a simulação de escoamentos estratificados ondulados, escoamentos intermitentes, mais especificamente do escoamento em golfadas, do inglês *slug flow* e escoamentos anulares.

Na classe dos escoamentos intermitentes, o principal objetivo é viabilizar a simulação de escoamentos em golfadas. Segundo o Dicionário do Petróleo em Língua Portuguesa (FERNANDEZ; JUNIOR; PINHO, 2009), *slug é um padrão de escoamento que se caracteriza pelo escoamento alternado de líquido e gás. Esse tipo de escoamento é um dos mais comuns nos processos de produção de petróleo e seu conhecimento e predição são fundamentais para o sucesso das operações de produção e de processamento primário de petróleo. No caso de escoamento horizontal, pistões ou golfadas de líquido que preenchem a seção do duto são separados por bolsas de gás contendo uma camada estratificada de líquido, que escoam na parte inferior do duto.*

Os slugs horizontais podem ser classificados como: *slugs* fluidodinâmicos, induzidos por terreno e induzidos por operação. O foco do trabalho e das simulações computacionais realizadas é o *slug* fluidodinâmico.

Os *slugs* fluidodinâmicos são causados por ondas provenientes de perturbações na interface entre os dois fluidos de um escoamento que se encontra inicialmente estratificado. A onda cresce na interface até tocar a parte superior da tubulação. Inicialmente as golfadas são pequenas, mas podem coalescer, dando origem a golfadas maiores. Quando a onda toca a parede superior do duto, o escoamento de gás é bloqueado, causando um aumento de pressão à montante da golfada que se formou, acelerando o escoamento à jusante. A golfada, de movimento rápido, captura o líquido, de movimento lento, à sua frente e o lança para a cauda da golfada, levando a uma região de filme líquido que é capturada pela próxima golfada. As golfadas podem ser chamadas também de pistões.

É interessante esclarecer um ponto relativo à nomenclatura utilizada ao longo do texto: o processo de transição abordado é a mudança entre padrões do escoamento multifásico como, por exemplo, um escoamento iniciado no padrão estratificado que, pela ação de diferentes efeitos físicos é levado ao padrão pistonado. Tal processo não deve ser confundido com a transição entre os regimes laminar e turbulento, já que tal modelagem requer simulações de alto custo computacional. Portanto, a transição à turbulência não será abordada na presente tese, somente a transição entre padrões de escoamentos multifásicos do tipo fluido-fluido. Os escoamentos estudados serão modelados partindo do princípio de que são completamente turbulentos.

A simulação da transição entre padrões de escoamentos bifásicos constitui o

objetivo principal da presente tese porém, para que seja possível simular e obter bons resultados através do código MFSim, verificou-se a necessidade da inclusão de modelagem para alguns fenômenos físicos no contexto de um código paralelo e com malha adaptativa.

Além da necessidade de se modelar um escoamento bifásico estes escoamentos apresentam outros desafios no que diz respeito à modelagem computacional. Entre esses desafios a serem abordados na presente tese pode-se citar:

- Razão de aspecto das tubulações envolvidas, onde, geralmente, a razão entre o comprimento da tubulação (L) e seu diâmetro hidráulico (D_h) é maior que 100. Em problemas com tal razão de aspecto alguns solucionadores de sistemas lineares apresentam dificuldades para trabalhar com equações elípticas, como a equação de Poisson, utilizada para resolver a pressão;
- Preservar a estabilidade das simulações quando ocorrem aumentos abruptos de pressão relacionados ao padrão do escoamento. As golfadas formadas em escoamentos multifásicos intermitentes, por exemplo, promovem um aumento abrupto de pressão à montante da golfada;

Alcançando-se todos os objetivos em termos de modelagens que possibilitem a realização de simulações computacionais de escoamentos multifásicos turbulentos usando o código computacional MFSim, os resultados obtidos serão aplicados à previsão de transição entre diferentes padrões de escoamentos multifásicos turbulentos.

Nas seções seguintes serão abordados os principais tópicos envolvidos na metodologia teórica e numérica necessária para a modelagem dos fenômenos físicos citados anteriormente. Como pode ser observado, a simulação da transição entre dois padrões de escoamento utilizando um código de malha estruturada adaptativa envolve diferentes áreas como escoamentos bifásicos, turbulência e representação de corpos imersos, os quais serão detalhados de forma separada.

1.3 Estrutura da tese

Nos capítulos seguintes serão apresentados de forma detalhada os tópicos mencionados ao longo deste capítulo introdutório, em uma linha de desenvolvimentos até que os resultados sejam apresentados.

No capítulo 2, é apresentada uma revisão bibliográfica sobre o estado da arte de alguns tópicos que constituem a base dos desenvolvimentos realizados ao longo da tese. O capítulo começa com a abordagem da metodologia RANS/URANS, a classe dos modelos de fechamento da turbulência utilizados. A seguir, é apresentada uma breve revisão sobre os diferentes métodos de fronteira imersa existentes para modelar corpos imersos complexos em malhas cartesianas. Na seção seguinte, é apresentado o estado da arte para métodos de fronteira imersa aplicados a modelos de turbulência, tendo foco especial nos modelos RANS/URANS. O capítulo é finalizado com a abordagem das modelagens desenvolvidas para representação de escoamentos bifásicos e da transição entre padrões de escoamentos bifásicos do tipo gás-líquido em tubulações horizontais.

As metodologias matemáticas e computacionais utilizadas ao longo do desenvolvimento deste trabalho são apresentadas no capítulo 3. São abordadas as formulações matemáticas que já se encontravam implementadas no código utilizado, o MFSim, bem como as novas formulações, adicionadas como parte do presente trabalho. No capítulo também são apresentados os detalhes numéricos relacionados às implementações das formulações matemáticas, detalhando os principais pontos e desafios relacionados a cada tópico abordado.

Os resultados obtidos ao longo do trabalho por meio de simulações computacionais que utilizam os métodos abordados no capítulo 3, são apresentados no capítulo 4. As seções iniciais são utilizadas para apresentar resultados de casos com menor complexidade, utilizados no contexto de verificação e validação dos métodos numéricos presentes no MFSim. Já as seções finais do capítulo são dedicadas a casos com maior nível de complexidade, os chamados casos de aplicações. Os resultados apresentados são acompanhados de análises, discussões e comparações com trabalhos similares que foram encontrados na literatura, possibilitando que o leitor analise os resultados da tese em relação a trabalhos de referência.

Por fim, no capítulo 5 é apresentada uma análise conclusiva a respeito das metodologias e resultados que foram obtidos ao longo do presente trabalho.

Tendo apresentado uma breve introdução a respeito de tópicos importantes como o objetivo do presente trabalho e uma breve descrição do código computacional que será utilizado nos desenvolvimentos, uma revisão bibliográfica a respeito dos principais tópicos envolvidos na tese é apresentada a seguir, trazendo ao leitor uma visão do estado da arte em tais temas.

Capítulo 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Muitas aplicações científicas e suas aplicações envolvem escoamentos turbulentos. Alguns exemplos são os escoamentos internos em tubulações (ECKHARDT et al., 2007), escoamentos sobre geometrias complexas (SCHNEIDER, 2015) e problemas multifísicos, como escoamentos multifásicos (BALACHANDAR; EATON, 2010) e reativos (FOX, 2003). Esse tipo de escoamento é caracterizado por tempo e comprimento característicos. Sendo assim, a modelagem do problema de fechamento da turbulência é um tópico relevante para estudo e entendimento desses escoamentos.

As simulações computacionais de problemas físicos são uma importante ferramenta para facilitar o entendimento de fenômenos naturais, bem como de problemas identificados na indústria em diferentes áreas. Ao longo do texto, as simulações computacionais são tratadas também como experimentos computacionais. Esse tratamento não é muito comum nos trabalhos sobre o tema encontrados na literatura. Porém, as análises materiais e computacionais possuem características muito similares, o que não justifica o tratamento apenas da primeira como experimento. Tanto os experimentos materiais quanto os experimentos computacionais são fundamentais para o avanço no entendimento dos fenômenos físicos envolvidos nos problemas estudados.

Por meio das simulações computacionais é possível obter boa representação do problema completo ou de detalhes específicos de escoamentos turbulentos. As simulações computacionais de escoamentos turbulentos são utilizadas por diversos autores para a análise de diferentes problemas (MATOS; PINHO; SILVEIRA-NETO, 1999; MARIANO et al., 2010; REN et al., 2013; ILIE, 2019; VEDOVOTO; SERFATY; NETO, 2015).

O modelo matemático diferencial composto pela equação do balanço de massa, equação do balanço de quantidade de movimento linear (equações de Navier-Stokes) e equações do balanço de energia é suficiente para modelar e resolver problemas de escoamentos turbulentos de fluidos newtonianos.

Essa metodologia, denominada Simulação Numérica Direta (em inglês, *Direct Numerical Simulation* - DNS), é amplamente aceita como a alternativa mais acurada para simular escoamentos turbulentos pois resolve todas as estruturas presentes. No entanto, quando o escoamento é caracterizado por elevado valor do número de Reynolds, a utilização de DNS pode se tornar inviável devido ao alto custo computacional. Isto acontece pois o número de graus de liberdade que caracterizam um

escoamento turbulento é proporcional a $Re^{9/4}$. O sistema linear resultante contém o número de equações algébricas a serem resolvidas diretamente proporcional ao número de graus de liberdade que caracterizam o escoamento turbulento.

Uma possível solução para este problema vem da filtragem das equações de balanço, processo pelo qual se chega ao problema de fechamento de turbulência, o qual pode ser tratado usando modelos de fechamento de turbulência (NICHOLS, 2010). Além de DNS, podem ser citadas duas metodologias também usuais para modelagem e simulação de escoamentos turbulentos, são elas URANS (*Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations*) e LES (*Large Eddy Simulation*) (LÜBCKE et al., 2001; BOUDIER et al., 2007). Na metodologia LES, parte do espectro de estruturas turbulentas que compõem todo o escoamento é resolvida e a transferência de energia entre estruturas resolvidas e as estruturas turbulentas abaixo da resolução de malha computacional utilizada é modelada. Na metodologia URANS, foco do presente trabalho, um campo filtrado não permanente é utilizado para a modelagem de escoamentos turbulentos.

Além da modelagem de turbulência, outro desafio na área de experimentação computacional é a eficiência das ferramentas computacionais. O uso de uma malha adaptativa dinâmica para discretização do problema é uma alternativa apontada pela literatura para se economizar recurso computacional ao se realizar uma simulação (BERGER; OLIGER, 1984; VILLAR et al., 2007). Nessa metodologia, a malha computacional se adapta dinamicamente aos requisitos físicos ou geométricos de um determinado problema. Por exemplo, uma malha mais refinada próxima a uma parede ou em uma esteira turbulenta, enquanto outras partes do domínio, são resolvidas com uma malha mais grossa. Vários trabalhos foram desenvolvidos empregando malha adaptativa, com malha estruturada em blocos (BERGER; COLELLA, 1989; BELL et al., 1994; BERGER; LEVEQUE, 1998; BAEZA; MULET, 2006; GEORGE; LEVEQUE, 2006; DENNER et al., 2014; MELO et al., 2018; NETO et al., 2019). Essa estratégia está disponível no código utilizado como base no presente trabalho. É importante ressaltar que o desenvolvimento em um ambiente que utiliza malha dinamicamente adaptável traz desafios adicionais, principalmente no contexto dos métodos URANS, os quais serão abordados ao longo do texto.

A utilização de uma malha computacional cartesiana limita a aplicação do código computacional à solução de problemas simples. Aplicações que envolvem geometrias não cartesianas necessitam de tratamentos especiais. Uma possível solução para essa limitação é a implementação dos chamados Métodos de Fronteira Imersa (em inglês, *Immersed Boundary Methods* - IBM). Na seção 2.2 será apresentada uma revisão da literatura sobre os tipos de IBM e suas peculiaridades.

Uma revisão da literatura sobre os métodos de *Reynolds-Average Navier-Stokes* (RANS), *Unsteady* RANS (URANS) e sobre os modelos de fechamento de turbulência com os métodos de fronteira será apresentada a seguir.

2.1 Metodologia RANS/URANS

O primeiro modelo da classe RANS proposto para o problema de fechamento da turbulência é conhecido por modelo do comprimento de mistura de Prandtl (*Prandtl Mixing Length*), proposta por Prandtl (1925). A proposta consiste em um modelo

que não requer a solução de novas equações de balanço, utilizando apenas uma equação algébrica para calcular a viscosidade turbulenta (μ_t). Portanto, ele é classificado como um modelo a zero equação de balanço. A viscosidade turbulenta é calculada a partir de uma velocidade característica e de um comprimento característico do escoamento. O modelo do comprimento de mistura de Prandtl requer a utilização de valores empíricos que mudam conforme o escoamento modelado. Esse modelo, apesar de muito básico, pode ser aplicado à modelagem de escoamentos cisalhantes livres e pode ser utilizado para a obtenção de soluções auto similares de escoamentos canônicos (MAGALHÃES et al., 2018; NETO, 2020).

Existem também os modelos RANS ou URANS classificados como modelos a uma equação de balanço. Nesses modelos, uma equação de balanço para uma propriedade turbulenta é adicionada ao sistema. A avaliação da viscosidade turbulenta envolve a variável adicional transportada e muda de acordo com a proposta utilizada.

Spalart e Allmaras (1992) propuseram um modelo a uma equação de balanço, resolvendo uma equação para a própria viscosidade turbulenta, a qual é suavizada próximo às paredes através de uma função de amortecimento. O modelo de Spalart-Allmaras é considerado robusto, pois não requer o cálculo do comprimento característico relacionado à espessura da camada de cisalhamento local. Esse modelo foi desenvolvido com foco em aplicações aerodinâmicas, sendo indicado para a modelagem de problemas envolvendo escoamentos externos sobre corpos rígidos, fornecendo bons resultados para escoamentos com gradientes adversos de pressão.

Nos modelos chamados a duas equações, são adicionadas ao sistema duas equações de balanço para quantidades relacionadas à turbulência. As propriedades objeto dos balanços variam de acordo com o modelo, e a avaliação da viscosidade turbulenta envolve essas propriedades. Diversos trabalhos e pesquisas aplicam esses modelos na simulação de escoamentos complexos e industriais (SILVEIRA-NETO, 2002; MENTER, 2009; WANG et al., 2017; RAMIREZ; CORTES, 2010). Uma vantagem dos modelos de duas equações é a maior generalidade, em comparação com os modelos de zero ou uma equação. Apesar dessa característica, esses modelos ainda possuem constantes empíricas em suas equações de balanço.

O primeiro modelo de duas equações foi o modelo $k - \epsilon$ apresentado por Kolmogorov (1942). Os modelos $k - \epsilon$ são compostos por uma equação de balanço para energia cinética turbulenta, k , e outra para transformação de energia cinética turbulenta, ϵ . Desta forma, é possível modelar as variações temporais dos escoamentos, bem como a advecção e difusão do transporte turbulento de energia. Ao longo das várias décadas, foram propostas diferentes variações para o modelo $k - \epsilon$, como o modelo de Yakhot et al. (1992), o *Re-Normalization Group* $k - \epsilon$ ($k - \epsilon$ RNG) e o modelo $k - \epsilon$ realizável de Shih et al. (1995). É comum o uso dos modelos $k - \epsilon$ em muitas simulações computacionais de diversos escoamentos turbulentos com diferentes níveis de complexidade.

Existe também o modelo $k - \omega$ de duas equações. O primeiro modelo $k - \omega$ foi apresentado por WILCOX (1988), onde são resolvidas uma equação de balanço para a energia cinética turbulenta, k e outra para a frequência específica de Kolmogorov, ω . Com esse modelo, é possível obter um bom desempenho no escoamento da camada limite com gradiente de pressão adverso ou favorável, apresentando bom comportamento em regiões próximas a corpos sólidos. Wilcox (2008) propôs uma

melhoria no modelo original, onde as constantes foram substituídas por funções de proporcionalidade dinâmicas, tornando o modelo mais robusto e geral.

Os modelos $k - \epsilon$ apresentam bom desempenho em escoamentos caracterizados por um alto número de Reynolds e escoamentos cisalhantes livres. Para escoamentos (ou regiões) caracterizadas por um baixo número de Reynolds, como próximo a paredes, o modelo $k - \omega$ é mais adequado que o modelo $k - \epsilon$. Com o objetivo de agregar as vantagens dos modelos $k - \epsilon$ e $k - \omega$, Menter (1994) sugeriu um modelo combinado, o $k - \omega$ SST. No modelo SST, são utilizadas funções marcadoras e funções dinâmicas para que, com base nas características de determinada região do escoamento, seja utilizada uma ponderação adequada entre o modelo $k - \epsilon$ e o modelo $k - \omega$.

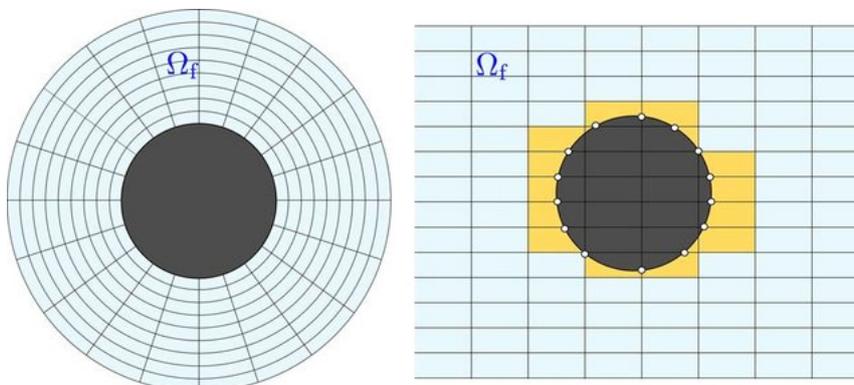
Devido à robustez, o modelo $k - \epsilon$ foi escolhido para ser utilizado ao longo do presente trabalho, porém, conforme descrito anteriormente, esse modelo não é o mais adequado para a simulação de escoamentos em regiões caracterizadas por baixos números de Reynolds. Como o trabalho envolve escoamentos na presença de paredes, os quais contêm regiões caracterizadas por baixo número de Reynolds, é necessário que sejam utilizados tratamentos adicionais, os chamados tratamentos de parede.

2.2 Métodos de fronteira imersa

Experimentar computacionalmente problemas complexos com aplicações industriais, geralmente, envolvem a utilização de geometrias não cartesianas. Portanto, a utilização de uma malha computacional cartesiana limita a aplicação do código computacional à solução de problemas simples. Uma das principais alternativas para eliminar essa restrição são os métodos de fronteira imersa (em inglês, *Immersed Boundary Methods - IBM*).

Ao contrário das malhas conformes, o uso de IBM requer duas malhas computacionais independentes, uma para o fluido (euleriana) e outra para representação dos corpos imersos (lagrangiana), conforme pode ser observado na Fig. 2.1.

Figura 2.1: Representação da diferença entre (a) uma malha conforme e (b) uma malha para modelagem via IBM.



Fonte: (NIKFARJAM, 2018)

Os métodos de fronteira imersa podem ser classificados como de interface difusa ou interface nítida (*sharp*).

Nos IBM de interface difusa, a representação da superfície modelada tem característica difusa em função da distribuição das forças calculadas nos pontos lagrangianos para os volumes eulerianos próximos, utilizando-se funções de interpolação e distribuição. Já os IBM de interface nítida utilizam metodologias mais complexas como cortes de células (*cut-cell*) e alteração das matrizes de coeficientes do sistema de equações com o objetivo de mitigar a difusão na representação da superfície (SOTIROPOULOS; YANG, 2014).

Peskin (1972) foi o pioneiro na proposta dos métodos de fronteira imersa. Em seu trabalho ele introduziu uma proposta da metodologia para resolver escoamentos bidimensionais sobre válvulas cardíacas. Em sua proposta, o autor apresentou o alto potencial e a mesma foi melhorada em trabalhos posteriores (PESKIN, 2002), sendo utilizada por Roma, Peskin e Berger (1999) em simulações envolvendo geometrias não cartesianas junto a malhas adaptativas.

Mohd-Yusof (1997) propôs um modelo em que para determinar a força em cada ponto da fronteira, de forma que o cálculo da força lagrangiana fosse realizado com base na equação de balanço da quantidade de movimento linear do fluido na fronteira, sem o emprego de constantes que necessitem de ajuste. Este método foi chamado de método da forçagem direta.

Wang, Fan e Luo (2008a) propuseram a utilização da imposição direta das forças, conforme proposto anteriormente por Mohd-Yusof (1997), porém de maneira iterativa, denominando multi forçagem direta (em inglês, *Multi Direct Forcing* - MDF). No caso do MDF, uma nuvem de pontos é utilizada para descrever a superfície do corpo imerso. A comunicação entre as duas malhas (Fig. 2.1) ocorre através de um processo de interpolação da malha euleriana para a malha lagrangiana. Em seguida, usando métodos de distribuição, os chamados termos forçantes da malha lagrangiana são transferidos para a malha euleriana.

Existem diversas propostas para métodos de fronteira imersa com diferentes características e aplicações. Mittal e Iaccarino (2005), Sotiropoulos e Yang (2014) e Kim e Choi (2019) apresentam revisões bibliográficas completas a respeito do tema, buscando discutir o estado da arte desses métodos.

A metodologia utilizada ao longo do presente trabalho é baseada no trabalho de Wang, Fan e Luo (2008a) e, portanto, um IBM de interface difusa. Este método já estava implementado no código utilizado, o MFSim, para as equações de quantidade de movimento linear (NETO et al., 2021; CARVALHO et al., 2021) e de energia (MELO, 2017). A contribuição da tese consistiu em uma proposta de extensão do MDF para o tratamento das variáveis equacionadas no modelo de turbulência $k - \epsilon$.

2.3 Métodos de fronteira imersa para modelos do tipo RANS/URANS

Alguns trabalhos foram publicados apresentando o uso de métodos de fronteira imersa e modelagem de fechamento da turbulência do tipo RANS/URANS em diferentes contextos.

Roman, Armenio e Frohlich (2009) apresentaram a proposta para uma lei de parede em simulações de grandes estruturas (LES) envolvendo corpos modelados por meio de um método de fronteira imersa de forçagem direta (ROMAN et al., 2009). O modelo proposto é baseado em duas etapas principais: a reconstrução do campo de velocidade nos pontos da malha euleriana (utilizada para representar o domínio de fluido) adjacentes ao corpo imerso e a modelagem da tensão de cisalhamento da parede real no limite imerso através da imposição de uma viscosidade turbulenta obtida por meio de relações analíticas. O autor apresenta resultados de um escoamento turbulento em canal plano com paredes reproduzidas por fronteiras imersas considerando malhas cartesianas e curvilíneas.

Capizzano (2010) apresenta o desenvolvimento de um modelo de parede para estender a aplicabilidade de métodos de fronteira imersa para escoamentos caracterizados por altos números de Reynolds. Uma modelagem do tipo duas camadas, baseada na decomposição da região próxima à parede, foi adotada. Uma região externa é modelada com as equações balanço para escoamentos compressíveis com média de Reynolds, que foram resolvidas numericamente usando um método clássico de volumes finitos. Na proximidade da parede, uma zona interna é estabelecida e modelada por uma versão simplificada das equações da camada limite. O modelo RANS utilizado nos desenvolvimentos apresentados é um modelo $k - \omega$ modificado.

Tay et al. (2015) apresentaram uma metodologia para simulações de escoamentos turbulentos utilizando o método de fronteira imersa proposto por Wang, Fan e Luo (2008b), e o modelo RANS de Spalart-Allmaras aplicado para simular escoamentos sobre corpos esbeltos. Foram apresentadas comparações entre resultados de experimentos computacionais e materiais de aerofólios/asas em movimento, além de serem incluídos, como base de comparação, resultados obtidos em simulações com malhas conformes. A partir de comparações qualitativas, os padrões de campos do escoamento representados por isovalores de vorticidade obtidos por meio de simulações com IBM apresentaram boa concordância em comparação com os resultados de referência.

Pu e Zhou (2018) apresentaram um método de fronteira imersa desenvolvido para simular escoamentos turbulentos compressíveis utilizando modelos URANS. Uma função de parede adaptativa e um modelo de parede a duas camadas (*two-layer*) foram utilizados para reduzir a exigência de refinamento da malha nas regiões próximas a paredes, exigida pela alta resolução das camadas limite turbulentas. Os modelos de turbulência $k - \omega$ SST e Spalart-Allmaras (SA) foram adotados pelos autores. Para o modelo $k - \omega$ SST, soluções analíticas na região próxima à parede foram utilizadas para impor as condições de contorno das equações que modelam o fechamento da turbulência e avaliar as variáveis de turbulência nos nós do corpo imerso. Para o modelo SA, a variável de turbulência em um nó da fronteira imersa foi calculada usando o perfil de viscosidade turbulento próximo à parede.

No presente trabalho, é apresentada uma proposta para a utilização de um método de multi-forçagem direta, baseado no trabalho de Wang, Fan e Luo (2008b), na simulação de escoamentos turbulentos com presença de paredes. O modelo URANS utilizado ao longo dos desenvolvimentos é o $k - \epsilon$ padrão junto a uma modelagem a duas camadas (*two-layer wall treatment*). Na revisão bibliográfica realizada não foram encontrados trabalhos aplicando um método de fronteira imersa

difusa para imposição das variáveis k e ϵ nas paredes. São mais comuns na literatura trabalhos que utilizam os modelos SA e $k - \omega$ SST junto a métodos de fronteira imersa.

2.4 Modelagem numérica de escoamentos bifásicos

A modelagem numérica de escoamentos multifásicos pode ser realizada utilizando-se diferentes abordagens apresentadas na literatura. Os diversos modelos propostos possuem vantagens e limitações, sendo alguns mais gerais e outros direcionados para determinadas aplicações.

Modelar um escoamento multifásico pode ser encarado, em um primeiro momento, como um problema de transporte advectivo de uma função coloração. Essa função coloração é a responsável por marcar com diferentes valores as diferentes fases presentes no sistema físico que se deseja representar.

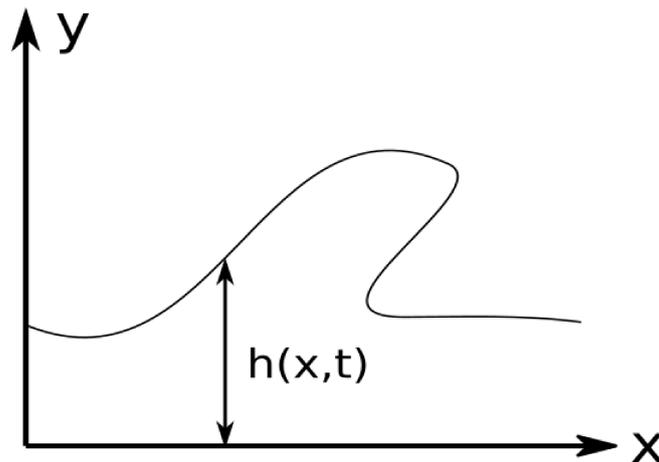
A determinação de como uma interface que separa dois fluidos se movimenta ao longo de um escoamento é um dos pontos centrais para a obtenção de predições acuradas em sistemas multifásicos. A descrição da localização de uma interface e de como ela está se movendo pode ser realizada de diferentes maneiras.

A metodologia mais simples consiste em descrever a posição da interface por meio de uma função de duas variáveis (para um sistema tridimensional).

$$z = h(x, y). \quad (2.1)$$

Esta abordagem é esquematizada abaixo para um sistema bidimensional, utilizando uma função de uma variável.

Figura 2.2: Esquema da representação de uma interface em um sistema bidimensional com uma função de uma variável.



Fonte: elaborada pelo autor.

Observando a Fig. 2.2 pode-se perceber que esta metodologia não pode ser aplicada em alguns cenários. Na representação apresentada, por exemplo, existem coordenadas na direção X que possuem mais de um ponto alinhados, ou seja, pontos em que a função $h(x)$ possui mais de um valor.

Existem contextos onde esta abordagem é adequada, como, por exemplo, a representação de filmes finos de fluido escoando rentes a uma superfície sólida. Porém, esta abordagem possui grandes limitações em cenários mais complexos de escoamentos multifásicos.

Uma das possibilidades para se modelar escoamentos bifásicos foi apresentada nos trabalhos de (NICHOLS; HIRT; HOTCHKISS, 1981) e Hirt e Nichols (1981), a metodologia chamada *Volume of Fluid* (VOF). A proposta consiste em um método euleriano que marca as células de acordo com o fluido contido e é amplamente utilizada para a simulação de escoamentos multifásicos interfaciais.

O conceito básico do método VOF é realizar um balanço de massa de um escalar C dentro dos volumes de controle do domínio, onde C representa a fração volumétrica de uma determinada fase contida dentro de uma célula computacional. Caso a célula esteja completamente preenchida pela fase, tem-se que $C = 1$, já para uma célula onde a fase não está presente, $C = 0$. Em células onde as duas fases do sistema coexistem, $0 < C < 1$. O aspecto semi descontínuo da função marcadora facilita o cálculo das propriedades de cada uma das fases e possibilita apresentar um esquema numérico preciso para resolver a equação de balanço de C (WACHEM; SCHOUTEN, 2002).

Os métodos VOF possuem propriedades que mantêm a conservação de massa do sistema, porém, a representação discreta e abrupta das frações volumétricas na região de interface apresenta desafios para uma estimativa precisa da curvatura interfacial, a qual é utilizada nos cálculos (CUMMINS; FRANCOIS; KOTHE, 2005). Uma estimativa de curvatura com pouca precisão pode produzir velocidades não físicas (correntes espúrias ou parasitas) na interface do fluido, bem como queda de pressão errônea sobre a interface, afetando a precisão das simulações (LOPEZ et al., 2009).

Outro aspecto importante ao se utilizar essa metodologia é a aproximação utilizada para os vetores normais à interface entre fluidos. A qualidade da solução dos métodos VOF e *Continuum Surface Force* (CSF) é sensível ao nível de precisão do cálculo dessas normais. Sua estimativa precisa geralmente determina a precisão e o desempenho geral desses métodos (KOTHE et al., 1996).

Os métodos do tipo VOF, abordados acima, podem apresentar problemas relacionados à difusão da interface entre fluidos. Essa característica dificulta a representação de interfaces esbeltas (em inglês, *sharp*) durante simulações de escoamentos bifásicos.

Buscando mitigar esse problema, Osher e Sethian (1988) apresentaram um método alternativo de marcação para a interface, a metodologia proposta pelos autores é conhecida como *level-set*. No método proposto, as diferentes regiões de fluido são identificadas por uma função marcadora suave $\phi(x, t)$, a qual possui valores positivos em uma fase e negativos na outra. A interface entre os fluidos é identificada pela curva de nível $\phi(x, t) = 0$. A função ϕ se move com o fluido e, portanto, evolui de acordo com

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (2.2)$$

Ao contrário da função marcadora C utilizada no método VOF, a função marcadora ϕ é suave e pode, portanto (pelo menos a princípio), ser advectada usando qualquer método padrão empregado na solução de equações hiperbólicas. Alguns

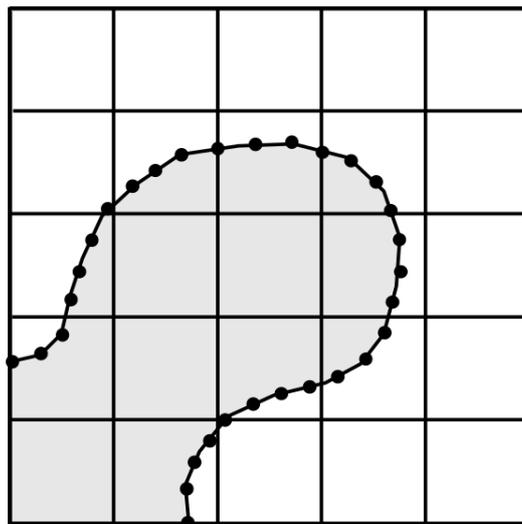
autores, como Osher e Shu (1991), apresentaram propostas e resultados utilizando esquemas de alta ordem.

O método *level-set*, pelo menos em sua modalidade original (OSHER; SETHIAN, 1988), traz como ponto principal a simplicidade. Em sistemas bifásicos, basta resolver uma equação de balanço adicional e, essencialmente, não são necessárias etapas complexas adicionais, como a reconstrução de uma interface, a qual deve ser realizada ao se utilizar o método VOF. O menor nível de complexidade, no entanto, traz consequências, e as primeiras implementações tiveram problemas consideráveis com a conservação de massa (TRYGGVASON; SCARDOVELLI; ZALESKI, 2011).

Ao longo do tempo foram propostas muitas melhorias relacionadas ao método *level-set*. Sussman et al. (1998) propuseram uma forma de melhorar a conservação de massa, Sussman e Puckett (2000) introduziram um método híbrido VOF/*level-set*, também conhecido pela sigla CLSVOF. Fedkiw et al. (1999) desenvolveram um método de “fluido fantasma” (em inglês, *Ghost Fluid Method* - GFM) baseado na atribuição de valores fictícios a pontos da malha no lado oposto de uma interface entre fluidos. Uma revisão geral do método *level-set* pode ser encontrada no trabalho de Gibou, Fedkiw e Osher (2018).

Uma possível alternativa ao método de advectar uma função marcadora para reconstruir a localização da interface em uma célula parcialmente cheia, é a utilização de pontos marcadores movidos com uma velocidade imposta. Em problemas unidimensionais, ambas as abordagens são igualmente diretas. Para problemas bidimensionais e tridimensionais, são necessários diversos pontos marcadores conectados para representar uma curva (em duas dimensões) ou uma superfície (em três dimensões). Na Fig. 2.3 é representada esquematicamente uma interface bidimensional utilizando pontos marcadores conectados.

Figura 2.3: Representação de uma interface, em cenário bidimensional, por meio de pontos marcadores.



Fonte: (TRYGGVASON; SCARDOVELLI; ZALESKI, 2011)

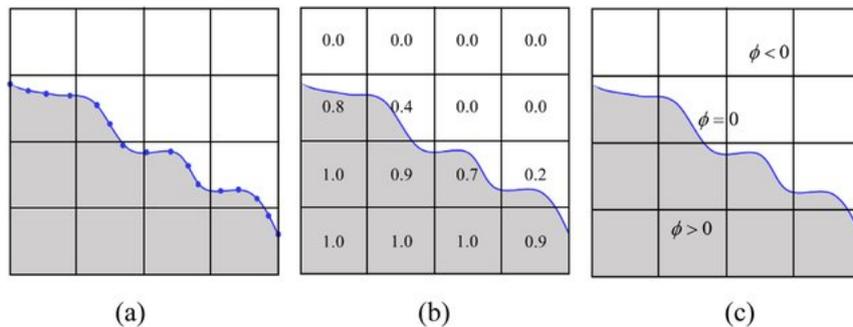
O uso de pontos marcadores conectados para a modelagem do movimento de uma interface fluida em fluidos viscosos remonta a Daly (1969), que utilizou pontos

para calcular a tensão superficial em simulações computacionais da instabilidade Rayleigh-Taylor. Segundo Tryggvason, Scardovelli e Zaleski (2011), o uso de pontos marcadores para rastrear choques foi discutido por Richtmyer e Morton (1994), que parecem ter introduzido o termo *front tracking*, porém, os autores não apresentam nem referenciam nenhuma implementação.

Unverdi e Tryggvason (1992) apresentaram uma metodologia na qual a fase contínua do escoamento é representada por meio de uma malha euleriana estacionária e a interface é modelada utilizando-se uma malha não estruturada lagrangiana que se move através da malha estacionária. Devido às deformações que geralmente ocorrem na interface durante um escoamento, é necessário que a malha lagrangiana seja alterada de forma dinâmica, por meio de inserção ou deleção de pontos. Uma abordagem detalhada a respeito da formulação matemática e numérica do método podem ser encontrados nos trabalhos de Tryggvason et al. (2001) e Tryggvason, Scardovelli e Zaleski (2011).

Na Fig. 2.4 é apresentada uma comparação entre as metodologias *front-tracking* (Fig. 2.4 (a)), VOF (Fig. 2.4 (b)) e *level-set* (Fig. 2.4 (c)). As três metodologias foram discutidas ao longo da presente seção e sugerem abordagens diferentes para o tratamento de interfaces entre fluidos.

Figura 2.4: Representação de três métodos de modelagem para escoamentos bifásicos, (a) *front-tracking*; (b) VOF; (c) *level-set*; (A linha azul representa a interface entre fluidos, a região cinza representa a fase 1, os pontos azuis em (a) representam os pontos marcadores, os números em (b) representam a fração volumétrica da fase 1 em cada célula e a função em (c) representa a função ϕ do *level-set*).



Fonte: (LUO et al., 2019)

Ao longo dos desenvolvimentos do trabalho, a metodologia utilizada foi a *Volume of Fluid*. Esse método já estava implementado no código MFSim, funcionando inclusive em cenários contendo malhas adaptativas. O foco ao longo da tese foi uma validação mais extensa do método e a implementação de melhorias relacionadas às diversas etapas do método VOF (normais, curvatura, reconstrução). No capítulo 3 serão apresentados detalhes a respeito da implementação do método no código computacional utilizado.

2.5 Transição entre padrões de escoamentos gás-líquido

No presente capítulo será apresentado o referencial teórico relativo à teoria e modelagem da transição entre padrões de escoamentos bifásicos. A transição entre dois padrões de escoamento gás-líquido é a aplicação escolhida para ser modelada e simulada na presente tese. Serão apresentados ao longo do trabalho casos em dutos retangulares e em dutos circulares, os quais envolvem o uso da metodologia de fronteira imersa apresentada anteriormente.

Os escoamentos bifásicos podem ser definidos como escoamentos simultâneos de duas fases com diferentes propriedades físicas. Esses escoamentos podem acontecer de forma livre (em inglês, *free surface flow*) ou confinada, como, por exemplo, os escoamentos em dutos e tubulações. Portanto, as fases referidas podem ser:

- O mesmo fluido em estados diferentes como, por exemplo, água e vapor de água. Esse escoamento pode ser chamado de gás-líquido, em uma referência ao estado termodinâmico de cada fase;
- Fluidos imiscíveis com diferentes propriedades físicas em uma mesma fase como, por exemplo, um escoamento onde coexistem água e óleo. Esse escoamento pode ser chamado de líquido-líquido;
- Partículas sólidas em meio a um escoamento de gás ou líquido. Esse tipo de escoamento é chamado de gás-sólido ou líquido sólido.

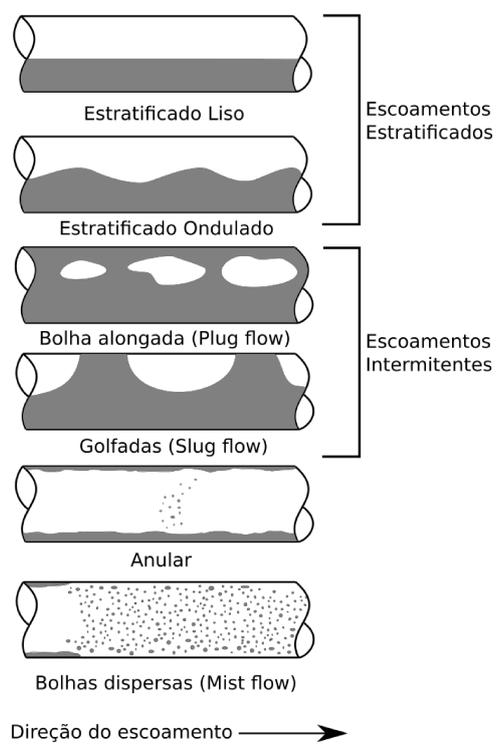
Os escoamentos do tipo gás-líquido são o foco das aplicações simuladas no presente trabalho e, portanto, serão discutidos de forma mais detalhada tanto na presente seção quanto em seções posteriores do texto.

Escoamentos bifásicos envolvendo gás, água e óleo são muito comuns em operações realizadas durante o processo de extração e refino do petróleo. Nesse tipo de escoamento a mistura bifásica de líquido e gás pode assumir diferentes formas e distribuições no interior da tubulação, que são conhecidas como padrões de escoamento (*flow patterns*) ou regimes de escoamento (*flow regimes*). Os padrões do escoamento estão diretamente relacionados com fatores como, por exemplo, vazões das fases do escoamento, propriedades físicas dos fluidos, orientação da tubulação e geometria do duto. Na Fig. 2.5 são representados os padrões de escoamento que podem ocorrer para escoamentos bifásicos em tubulações horizontais.

Conforme representado na Fig. 2.5, uma tubulação horizontal onde está ocorrendo um escoamento do tipo gás-líquido podem ser encontrados basicamente os seguintes padrões:

- Estratificado estável: as fases líquida e gasosa escoam simultaneamente a baixas velocidades sem desencadear fenômenos físicos capazes de desestabilizar a interface.
- Estratificado ondulado: aumentando a velocidade do gás no escoamento estratificado estável, instabilidades são geradas na interface, levando à formação de ondas que viajam na direção do escoamento. A amplitude das ondas formadas

Figura 2.5: Padrões de escoamentos em tubulações horizontais.



Fonte: elaborada pelo autor. Baseada em (SHOHAM, 2006)

é dependente da velocidade relativa das duas fases, porém, as cristas das ondas formadas não atingem o topo da tubulação. As ondas sobem pelas laterais do tubo, podendo deixar para trás finos filmes de líquido na parede.

- Escoamentos intermitentes: aumentando ainda mais a velocidade do gás, as ondas interfaciais crescem em amplitude, tocando o topo da tubulação. Esse regime é caracterizado por ondas de grande amplitude molhando de forma intermitente a parte superior do tubo com ondas de amplitude menores entre elas. As ondas de grande amplitude podem conter pequenas bolhas de gás em seu interior. A parede superior é quase continuamente molhada pelas ondas de grande amplitude e pelos finos filmes líquidos deixados para trás. Os escoamentos intermitentes podem ser subdivididos em duas categorias:
 - Bolha alongada (*plug flow*): nesse regime, a maior parte do gás se move como grandes bolhas dispersas em um líquido contínuo, com as bolhas podendo se espalhar por grande parte da tubulação. Podem existir também pequenas bolhas dentro do líquido, mas muitas delas coalescem para formar as bolhas maiores.
 - Golfadas (*slug flow*): Em velocidades de gás mais altas, os diâmetros das bolhas alongadas tornam-se semelhantes em tamanho à altura do canal. Os blocos de líquido que separam essas bolhas alongadas também podem ser descritos como ondas de grande amplitude.
- Anular: a vazões de gás ainda maiores, o líquido forma uma película contínua ao redor do perímetro da tubulação. Para altas frações de gás, o topo do tubo, onde o filme possui espessura menor, fica seco inicialmente, de modo que o filme cobre apenas uma parte do perímetro da tubulação. A interface entre o anel de líquido formado na parede e o núcleo de vapor é perturbada por ondas de pequena amplitude e as gotículas podem ser dispersas no núcleo de gás.
- Bolhas dispersas (*mist flow*): em velocidades muito altas, grande parte do líquido que formava o filme na parede é arrastada em forma de gotas pelo gás. Ou seja, o mecanismo de formação do spray consiste em um gás escoando em alta velocidade rasgando o filme líquido anular que havia se formado na parede.

Segundo Shoham (2006) todas as variáveis de interesse em projetos envolvendo escoamentos multifásicos em tubulações são influenciadas pelos regimes de escoamento, tais como a perda de carga, o *holdup* de líquido, as taxas de transferência de energia térmica e massa, entre outras. Daí a importância de se estudar os fenômenos físicos envolvidos no desenvolvimento de um determinado padrão de escoamento ou na transição entre diferentes padrões.

2.5.1 Mapas de regimes para escoamentos bifásicos

Identificar o regime previsto em determinadas condições de operação é importante em diversas situações. Visando facilitar a predição do padrão de escoamento

em uma tubulação com condições conhecidas, por meio de resultados experimentais obtidos ao longo do tempo, começaram a ser elaborados os chamados mapas de regimes para escoamentos bifásicos (SHOHAM, 2006). Conforme colocado, esses mapas consistem em gráficos por meio dos quais, conhecendo determinadas características do escoamento pode-se determinar o regime em que o mesmo ocorre na tubulação. Foram desenvolvidos também gráficos de padrões baseados em relações teóricas.

O trabalho de Quiben (2005) descreve diversos mapas de regimes bifásicos em tubulações horizontais, tanto baseados em relações experimentais quanto teóricas. Andreolli (2016) aborda diferentes mapas de padrões citando o mapa de Baker (BAKER et al., 1953), que é um dos mais antigos e conhecidos mapas de padrões. São citados ainda os mapas de regimes obtidos nos trabalhos de Mandhane, Gregory e Aziz (1974) e também de Taitel e Dukler (1976).

Em códigos computacionais utilizados para a simulação de escoamentos multifásicos em tubulações, os mapas de Taitel (TAITEL; DUKLER, 1976; TAITEL; BORNEA; DUKLER, 1980) são comumente utilizados. Porém, em alguns contextos é possível também escolher nestes códigos por meio de qual mapa o escoamento será caracterizado.

Como o presente trabalho está sendo desenvolvido para escoamentos do tipo gás-líquido em tubulações horizontais, podendo ser abordado eventualmente algum caso do tipo líquido-líquido, esse será o foco principal do referencial apresentado, já que os mapas podem mudar de acordo com o estado termodinâmico das fases e com a orientação da tubulação.

2.5.1.1 Mapa de regimes de Backer

Um dos primeiros trabalhos reconhecendo a importância do padrão de escoamento como ponto de partida para o cálculo da queda de pressão, fração de vazio e transferência de energia térmica e massa foi o de Baker et al. (1953). Ele publicou o mapa de padrão de escoamento mais antigo para tubulações horizontais, o qual é apresentado na Fig. 2.6.

Em seu trabalho ele relatou a realização de diversos experimentos e o uso de resultados coletados anteriormente por outros autores para compor o mapa de padrões apresentado. Esse mapa é construído com as quantidades no sistema inglês de unidades e, portanto, as quantidades dimensionais foram submetidas a um fator de conversão para o sistema internacional de medidas.

O mapa apresentado é construído em função da vazão mássica do gás, \dot{m}_G , calculada como:

$$\dot{m}_G = \rho_G \cdot U_{SG}, \quad (2.3)$$

sendo ρ_G a massa específica do gás e U_{SG} a velocidade superficial do gás. Além delas, é utilizada a vazão mássica de líquido, \dot{m}_L :

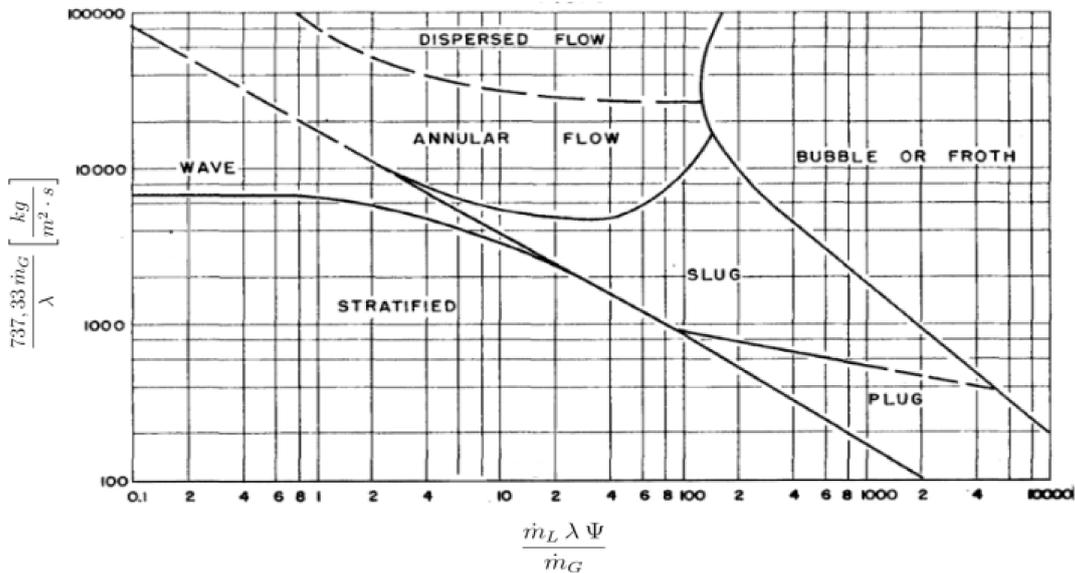
$$\dot{m}_L = \rho_L \cdot U_{SL}, \quad (2.4)$$

sendo ρ_L a massa específica do líquido e U_{SL} a velocidade superficial do líquido.

O parâmetro λ é calculado como:

$$\lambda = \sqrt{\left(\frac{\rho_G}{\rho_{GB}}\right) \left(\frac{\rho_{LB}}{\rho_L}\right)} \quad (2.5)$$

Figura 2.6: Regiões de ocorrência para cada padrão de escoamento gás-líquido em tubulações horizontais.



Fonte: Extraída de (BAKER et al., 1953).

onde ρ_{GB} e ρ_{LB} são as massas específicas de referência para o gás e para o líquido, respectivamente. Baker et al. (1953) utilizou as propriedades do ar como base para os gases e da água como base para os líquidos. Portanto, em um escoamento envolvendo ar e água $\lambda = 1$.

O outro parâmetro utilizado é chamado de Ψ e, no trabalho de Baker, foi definido como:

$$\Psi = \frac{\sigma_B}{\sigma} \left[\mu_L + \left(\frac{\rho_{LB}}{\rho_L} \right)^2 \right]^{1/3}, \quad (2.6)$$

porém, na descrição dos parâmetros, Ψ foi descrito como um adimensional, levando a crer que essa não é a definição correta. Lu (2015) apresenta a definição de Ψ como:

$$\Psi = \frac{\sigma_B}{\sigma} \left[\left(\frac{\mu_L}{\mu_{LB}} \right) \left(\frac{\rho_{LB}}{\rho_L} \right)^2 \right]^{1/3}, \quad (2.7)$$

onde σ é a tensão interfacial do par de fluidos, σ_B é a tensão interfacial entre ar e água e μ_L é a viscosidade dinâmica do líquido.

2.5.1.2 Mapa de regimes de Beggs & Brill

A consideração do padrão de escoamento pode levar a melhorias na estimativa do coeficiente de fricção em escoamentos multifásicos quando se trata de correlações unidimensionais para perda de carga em tubulações. Beggs, Brill et al. (1973) propuseram uma correlação para cálculo do fator de fricção que leva em conta a inclinação da tubulação, bem como o regime de escoamento, por meio de um mapa gerado pelos próprios autores. Uma modelagem que leva em consideração a angulação da tubulação e o padrão de escoamento apresenta boa generalidade e essa é uma das

principais características da correlação de Beggs and Brill, graças ao mapa de regimes desenvolvido.

Os autores realizaram um estudo considerando diversas variáveis relacionadas ao escoamento com o objetivo de selecionar as mais representativas para construção do mapa de padrões. A conclusão foi de que o *holdup* de líquido (λ_l) e o número de Froud (N_{Fr}) eram as variáveis mais relevantes.

O *holdup* de líquido é calculado com base nas vazões volumétricas de líquido (Q_l) e gás (Q_g) por meio da expressão

$$\lambda_l = \frac{Q_l}{Q_l + Q_g}, \quad (2.8)$$

já o número de Froude é calculado como

$$N_{Fr} = \frac{\langle \vec{u}_m \rangle^2}{g D}, \quad (2.9)$$

onde g é a magnitude do campo gravitacional, D é o diâmetro da tubulação e \vec{u}_m a velocidade de mistura, calculada como

$$\vec{u}_m = \sum_{i=1}^N (\alpha_i \vec{u}_i), \quad (2.10)$$

onde \vec{u}_i é a velocidade de uma dada fase i em um sistema composto por N fases e α_i é a fração volumétrica, calculada como a razão entre o volume da fase (V_i) e o volume total (V_T) de um dado volume de controle, ou seja,

$$\alpha_i = \frac{V_i}{V_T}. \quad (2.11)$$

Utilizando essas duas variáveis os autores propuseram o mapa de regimes apresentado na Fig. 2.7. Este mapa divide os regimes em três grupos, conforme explicado na seção 2.5.

A parte do gráfico, apresentado na Fig. 2.7, caracterizada como transição corresponde a uma região onde os autores constataram comportamentos peculiares com o padrão transicionando de segregado para intermitente. Mediante tal observação algumas correlações foram ajustadas para escoamentos contidos nesta região.

Conforme pode ser observado na Fig. 2.7, nas linhas que limitam os regimes estão indicadas as variáveis L_1 , L_2 , L_3 , e L_4 . Os valores destes parâmetros são calculados por meio das Eqs. (2.12):

$$L_1 = 316 \lambda_l^{0,302}, \quad (2.12a)$$

$$L_2 = 0,0009252 \lambda_l^{2,4684}, \quad (2.12b)$$

$$L_3 = 0,1 \lambda_l^{-1,4516}, \quad (2.12c)$$

$$L_4 = 0,5 \lambda_l^{-6,738}. \quad (2.12d)$$

Tendo calculado o valor dos parâmetros L , os regimes são caracterizados seguindo a Tab. 2.1:

A determinação do padrão de escoamento por meio do mapa é muito importante ao se utilizar essa correlação, pois muitos coeficientes dos cálculos são definidos de acordo com o regime.

Figura 2.7: Mapa de padrões de escoamento em tubulações horizontais gerado pela correlação de Beggs and Brill.

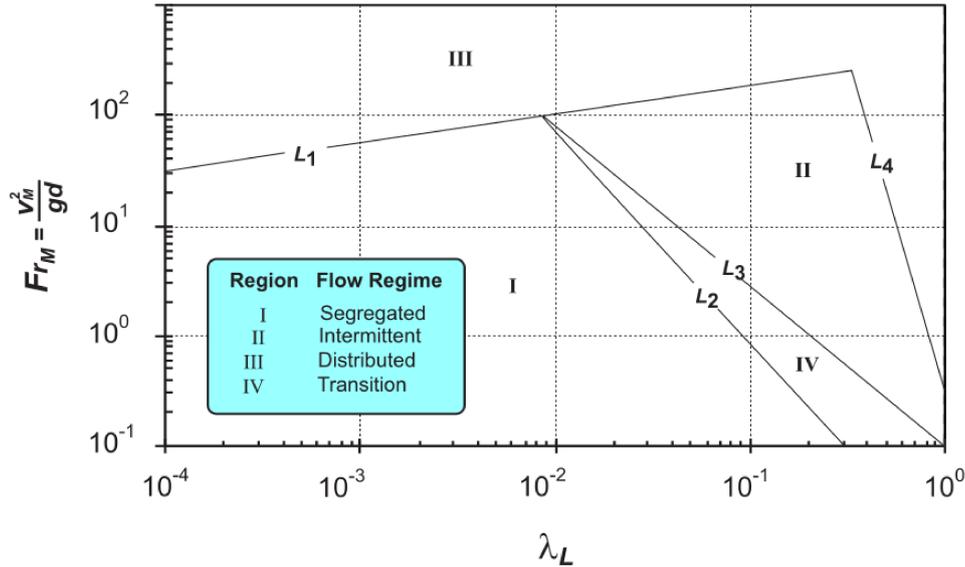


Tabela 2.1: Critérios utilizados para a caracterização de regime na correlação de Beggs e Brill.

Regime	Caracterização
Segregado	$(\lambda_l < 0,01 \text{ e } N_{Fr} < L_1)$ ou $(\lambda_l \geq 0,01 \text{ e } N_{Fr} < L_2)$
Transição	$\lambda_l \geq 0,01 \text{ e } L_2 \leq N_{Fr} \leq L_3$
Intermitente	$(0,01 \leq \lambda_l < 0,4 \text{ e } L_3 < N_{Fr} \leq L_1)$ ou $(\lambda_l \geq 0,4 \text{ e } L_3 < N_{Fr} \leq L_4)$
Distribuído	$(\lambda_l < 0,4 \text{ e } N_{Fr} \geq L_1)$ ou $(\lambda_l \geq 0,4 \text{ e } N_{Fr} > L_4)$

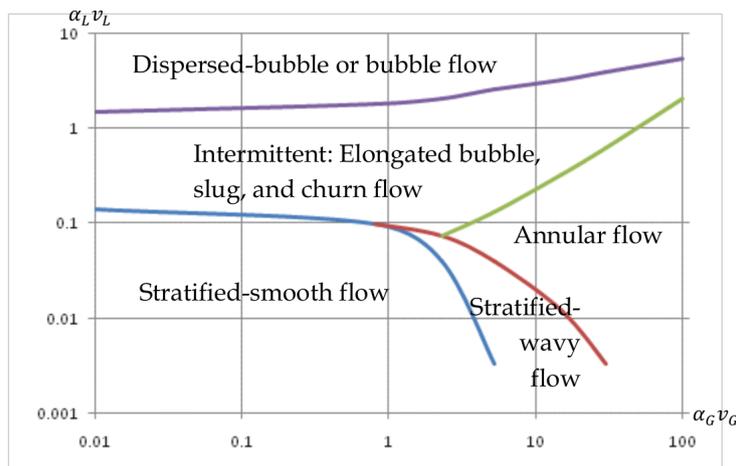
2.5.1.3 Mapa de regimes de Taitel

Em uma linha semelhante à apresentada no trabalho de Beggs, Brill et al. (1973), Taitel e Dukler (1976) desenvolveram um modelo para escoamentos bifásicos, do tipo gás-líquido, em tubulações aproximadamente horizontais. As considerações teóricas dos autores partiram do entendimento e análise de um escoamento gás-líquido estratificado permanente em uma tubulação horizontal.

Na Fig. 2.8 é apresentado um gráfico de padrões extraído do trabalho de Taitel e Dukler (1976) para análises realizadas considerando tubulações horizontais com inclinação inferior a 10° . No gráfico, U_{SL} e U_{SG} são, respectivamente, as velocidades superficiais do líquido e do gás, calculadas multiplicando a fração de fase (α) pela velocidade média nominal (u) da fase, ou seja,

$$U_{SL} = \alpha_l u_l. \quad (2.13)$$

Figura 2.8: Gráfico de padrões construído com dados experimentais de um escoamento ar-água a 25° em um tubo vertical de 5 cm de diâmetro.



Fonte: (BRATLAND, 2010)

Além das limitações na faixa de inclinação ($< 10^\circ$), existem outros pontos de consideração em relação ao mapa de regimes de Taitel (Fig. 2.8). Nele, não é estabelecido nenhum critério para diferenciar os diferentes tipos de escoamentos intermitentes ou anulares. Os escoamentos intermitentes podem ser subdivididos em: bolha alongada, *slug* e *churn*, enquanto os anulares podem ser classificados como com (*mist flow*) ou sem gotículas na corrente de gás.

A proposta apresenta boa concordância quando aplicada à análise de escoamentos transientes apesar dos autores considerarem um escoamento permanente em seus desenvolvimentos. Ou seja, é possível realizar a predição do padrão de escoamento ao longo de cada ponto tanto no tempo quanto no espaço utilizando essa ideia para a determinação de regimes.

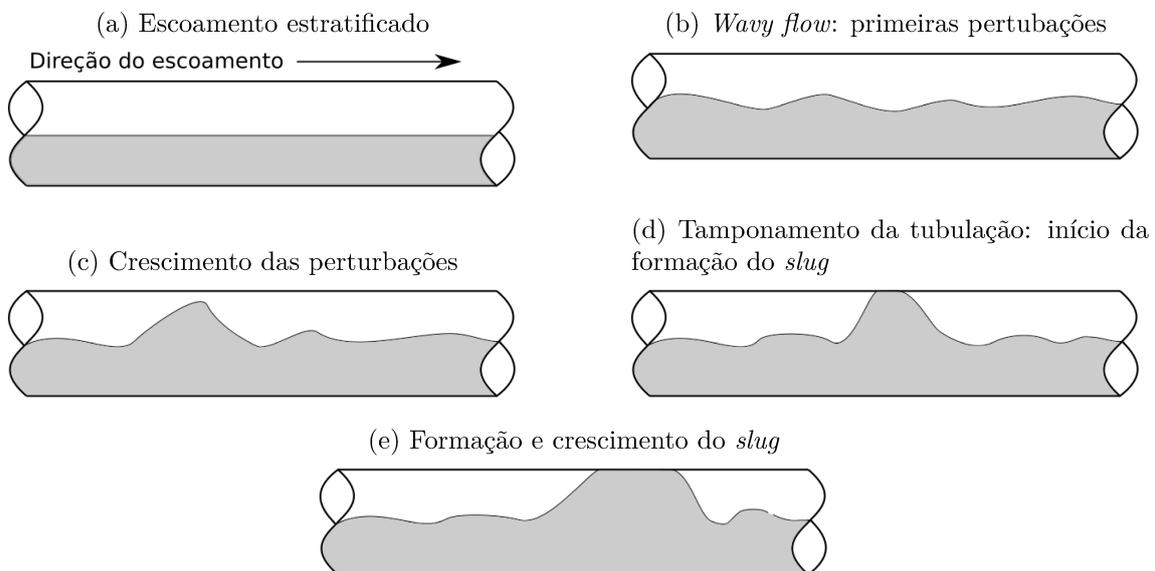
O modelo e o mapa de regimes de Taitel e Dukler (1976) demonstrou boa concordância com medições realizadas em escoamentos bifásicos acontecendo em tubulações de pequeno diâmetro horizontais e levemente inclinadas. Em análises realizadas, foi possível observar que mesmo pequenas mudanças de inclinação têm

grandes consequências nos padrões de escoamento, refletindo o fato de que conhecer e também representar com precisão o perfil de elevação da tubulação é essencial para a obtenção de resultados significativos.

2.5.2 Transição entre os padrões estratificado e pistonado (*stratified-slug*)

Diversas aplicações na indústria de óleo e gás apresentam escoamentos onde a identificação da transição é importante. Esse é um dos motivos que torna importante o estudo da transição entre tais regimes bem como o entendimento dos fenômenos físicos que levam a tal transição. A Fig. 2.9 mostra uma representação de algumas etapas na transição de um escoamento multifásico regime em estratificado para o escoamento pistonado.

Figura 2.9: Representação da transição entre os padrões estratificado e *slug*.



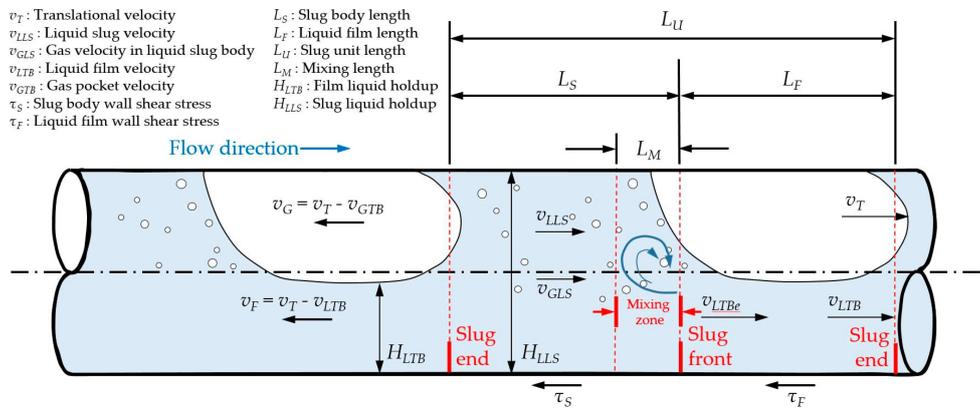
Fonte: elaboradas pelo autor.

Inicialmente, no escoamento estratificado, uma parcela de líquido escoava na tubulação abaixo de uma parcela de gás, sem grandes perturbações na interface (Fig. 2.9a); a camada de líquido começa a ser submetida a uma força cisalhante viscosa na parede, desacelerando. Com a sobreposição dos efeitos de desaceleração na parede e de um arrastamento promovido pela força interfacial na região de contato com o gás, começam a surgir instabilidades na interface entre os dois fluidos (Fig. 2.9b). Devido às características fluidodinâmicas e cinemáticas do escoamento essas instabilidades, na forma de ondas, começam a crescer (Fig. 2.9c). A amplitude de certas ondas podem crescer de tal forma que o líquido toca as paredes da tubulação, gerando um tamponamento, promovido pela estrutura chamada de "pistão precursor" (*slug precursor*) dentro da tubulação (Fig. 2.9d). Esse pistão formado bloqueia o fluxo de gás, aumentando a pressão a montante e desacelerando o escoamento a jusante. A rápida movimentação do pistão precursor captura a parcela de líquido que se movimenta com uma velocidade menor a sua frente, jogando-o para a cauda, formando

a região de filme líquido, encerrada pelo próximo pistão. Com esse comportamento físico o pistão precursor aumenta seu volume, formando de fato o *slug* (Fig. 2.9e).

A energia cinética do pistão é maior que a energia cinética do filme líquido, levando à formação de uma região turbulenta na parte frontal do pistão, conforme ilustrado na Fig. 2.10, extraída do trabalho de Kim et al. (2020). Como uma das características da turbulência é intensificar processos de mistura, bolhas de ar começam a entrar nessa parte. Algumas dessas bolhas permanecem suspensas na parte frontal do *slug* e outras são liberadas na região da cauda, tanto para o gás quanto para o filme líquido.

Figura 2.10: Esquematização das propriedades e caracterização de um pistão no padrão de escoamento pistonado.



Fonte: (KIM et al., 2020)

A breve descrição do mecanismo de formação do *slug* evidencia que a transição estudada envolve vários fenômenos físicos complexos. Sendo assim, nem todos os códigos de simulações fluidodinâmicas (em inglês, *Computer Fluid Dynamics* - CFD) disponíveis são capazes de simular de forma precisa e estável a transição de um escoamento estratificado para um escoamento em golfadas ocorrendo em dutos horizontais. Existem diversos trabalhos na literatura que analisam o desempenho de conhecidos códigos de CFD na simulação e comparam os resultados obtidos com resultados de experimentos materiais. Os estudos realizados ao longo da tese envolvendo tal transição terão como base o trabalho de Lu (2015) para tubulações de seção retangular e circular e, também, o trabalho de Frank (2005) para tubulações de seção circular.

Lu (2015) apresentou uma vasta revisão bibliográfica a respeito do problema físico da transição de um escoamento estratificado para o padrão de golfadas ou pistonado, tratando das diferentes abordagens e modelagens possíveis. Em seu trabalho foi apresentada uma coletânea de simulações realizadas com diferentes códigos de CFD que são amplamente utilizados, tanto comerciais quanto livres. São apresentados resultados de simulações de *slugs* tanto em dutos de seção circular quanto de seção retangular. Além disso, os resultados obtidos são comparados com experimentos materiais a fim de verificar se os dados obtidos são coerentes e precisos.

A transição entre os padrões estratificado e pistonado em tubulações retangulares horizontais é um dos focos do presente trabalho, já que eliminam a necessidade

de utilização da metodologia de fronteira imersa. Sendo assim, tais casos são mais adequados para identificar o desempenho da modelagem de escoamentos multifásicos de forma isolada. Höhne e Vallée (2010) e Vallée et al. (2010) desenvolveram trabalhos envolvendo experimentos numéricos e materiais que serão utilizados para comparação com os resultados obtidos.

Frank (2005) abordou somente *slugs* em dutos horizontais de seção circular e utilizou o código computacional CFX-5.7. O enfoque principal é na modelagem de perturbações a serem injetadas na interface entre os fluidos, que inicialmente encontra-se estratificado. As perturbações apresentadas neste trabalho serão utilizadas como uma primeira tentativa de modelagem tanto nas simulações de dutos de seção circular quanto de seção retangular.

Cabe ressaltar que tanto no trabalho de Lu (2015), quanto no de Frank (2005), são utilizados modelos URANS para a simulação da transição entre os padrões estratificado e pistonado. Além dos trabalhos citados, grande parte dos trabalhos encontrados na literatura utilizam a metodologia URANS ou simulações DNS. Como a utilização da metodologia DNS envolve um alto custo computacional e conforme os recursos computacionais disponíveis, o foco dos autores da tese é a utilização de modelos URANS.

Na literatura estudada não foram encontrados trabalhos que fazem uso da metodologia LES, sendo assim, um dos objetivos na presente tese é estudar as dificuldades referentes ao uso de modelos LES. Pretende-se também realizar simulações computacionais com tal modelagem, caracterizando a exploração de um campo ainda pouco abordado na literatura.

A transição entre padrões de um escoamento estratificado para o padrão de golfadas é um processo complexo e pode necessitar de modelagens adicionais visando modelar efeitos físicos importantes. Miao, Hendrickson e Liu (2019) abordaram a modelagem dos fenômenos físicos presentes nessa transição ressaltando a presença de fortes não-linearidades e debatendo a possibilidade de se utilizar modelos lineares.

Höhne e Hänsch (2015) abordaram a necessidade de se acoplar modelagens para o processo de arrastamento de gotas, relatado na descrição do mecanismo de formação de um *slug*. Neste trabalho também foi abordado o efeito de tratamentos específicos para a turbulência na interface. Um ponto positivo desse trabalho é a utilização do mesmo experimento em duto retangular que serviu como base para o trabalho de Lu (2015).

A proposta da presente tese é a utilização dos modelos lineares presentes no código MFSim para simulações preliminares e, a partir de análises dos resultados obtidos, verificar a necessidade de se desenvolver e implementar novos modelos matemáticos.

Capítulo 3

METODOLOGIA

Neste capítulo serão apresentados detalhes de partes relacionadas a modelagem matemática, implementação e abordagens presente no código utilizado para os desenvolvimentos realizados ao longo do trabalho, o MFSim.

3.1 Modelagem matemática diferencial

A formulação matemática diferencial utilizada é a chamada *one fluid*, em inglês. Nessa abordagem, um escoamento bifásico sem mudança de fase é modelado como um escoamento monofásico com massa específica e viscosidade variáveis. De acordo com os objetivos do trabalho, o escoamento também é considerado incompressível. Esta formulação permite tratar um escoamento multifásico de forma semelhante à consideração um fluido homogêneo. Sendo assim, as metodologias e algoritmos padrões, aplicados a modelagem de escoamentos monofásicos podem, em princípio, serem utilizados para integrar temporal e espacialmente as equações de balanço discretizadas.

A equação que modela o balanço de massa em um escoamento qualquer é escrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (3.1)$$

onde ρ é a massa específica do fluido e \vec{u} é o campo de velocidades.

Além da equação do balanço de massa, o sistema também é composto pelas equações de balanço da quantidade de movimento linear, que podem ser escritas como

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)] + \vec{f}, \quad (3.2)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido, p é o campo escalar de pressão estática, \vec{g} é a aceleração gravitacional que age sobre o escoamento, \vec{f} representa os termos de transformação adicionais presentes no escoamento e o superíndice T representa o gradiente transposto.

As equações de Navier-Stokes e a equação da continuidade são suficientes para modelar escoamentos isotérmicos de fluidos tanto em regime laminar quanto em regime turbulento, caracterizados por qualquer número de Reynolds. Porém, quanto maior o número de Reynolds, mais largo torna-se o espectro de energia associado

ao escoamento. A geometria do problema limita a formação das maiores estruturas, isto significa que altas frequências e altos números de onda são características de escoamentos que ocorrem a elevados números de Reynolds. O cálculo de todas as estruturas turbilhonares requer o uso de malhas computacionais muito finas, implicando em custos elevados para as simulações. Logo, a prática de Simulação Numérica Direta (DNS), onde todas as estruturas são resolvidas, é limitada a escoamentos pouco complexos e depende do *hardware* disponível.

A equação da continuidade na forma indicial para escoamentos incompressíveis pode ser escrita como:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.3)$$

As equações de Navier Stokes na forma indicial para escoamentos incompressíveis e sem variação de massa específica são dadas por:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i u_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{f_i}{\rho}, \quad (3.4)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido e f_i pode ser tratado como um termo de transformação de alguma informação em quantidade de movimento linear, por exemplo, efeitos gravitacionais, de tensão superficial (f_σ) ou obtidos no processo de modelagem de corpos imersos, podendo ser positivo ou negativo.

É importante ressaltar que a abertura da Eq. (3.4) resultará em três equações, sendo uma para cada componente de velocidade.

O avanço em termos de métodos computacionais e a evolução dos *hardwares* vem possibilitando o uso de DNS para escoamentos caracterizados por maiores números de Reynolds a cada ano. No entanto, esses valores ainda são modestos quando comparados com os valores que caracterizam as aplicações industriais.

Uma das alternativas à utilização de DNS nas simulações é a decomposição do espectro de estruturas do escoamento em duas bandas, utilizando o conceito de filtragem. Reynolds e Boussinesq propuseram aplicar o operador média temporal às equações de balanço (3.3) e (3.4). Esse operador será aqui representado pelo símbolo barra ($\bar{\quad}$). Sabendo-se que os operadores média temporal e derivadas parciais são lineares, então eles podem ser comutados, resultando, ao final do processo de dedução em:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.5)$$

e

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u_i u_j}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\bar{f}_i}{\rho}. \quad (3.6)$$

Essas equações estariam prontas para serem resolvidas, se não fosse o termo não linear $\overline{u_i u_j}$ que aparece na Eq. (3.6). As variáveis objeto dos balanços são as componentes do campo de velocidade \bar{u}_i , as quais são as incógnitas das equações, juntamente com o campo de pressão, \bar{p} . Assim, essas equações não podem ser resolvidas, uma vez que para determinar a sua solução seria necessário conhecer as componentes u_i , o que só seria possível via DNS. Essas equações poderiam ser resolvidas diretamente caso o termo $\overline{u_i u_j}$ fosse substituído pelo termo $\bar{u}_i \bar{u}_j$. Para tanto, é aplicada a decomposição proposta por Reynolds-Boussinesq, ou seja, decompõem-se

os campos totais de velocidade nas suas partes médias e flutuantes. Matematicamente, essa decomposição se faz como segue:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad (3.7)$$

sendo u'_i a flutuação no campo de velocidade com média \bar{u}_i .

Substituindo a Eq. (3.7) em (3.6), realizando manipulações e aplicando as propriedades referentes ao operador de média temporal chega-se a:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \overline{u'_i u'_j} \right] + \frac{\bar{f}_i}{\rho}. \quad (3.8)$$

O termo $\overline{u'_i u'_j}$ é conhecido como tensor de Boussinesq-Reynolds. Ele é simétrico uma vez que a ordem das componentes das flutuações de velocidade não afeta os momentos estatísticos de segunda ordem que o compõem. Assim, esse tensor abriga seis incógnitas adicionais, que vêm das correlações entre as flutuações das três componentes do campo de velocidades. Esse tensor representa toda a troca de quantidade de movimento linear entre a parte média e a parte flutuante do escoamento turbulento.

A Eq. (3.8) para as componentes da velocidade, é conhecida como equação média transiente de Reynolds (em inglês, *Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes Equation* - URANS). Essas equações para as componentes de velocidade junto à equação do balanço de massa compõem o modelo para o comportamento médio de um escoamento turbulento isotérmico. Esse é um modelo matemático aberto, tendo seis incógnitas que compõem o tensor de Reynolds adicionais às velocidades e pressão médias. Esse é o famoso problema de fechamento da turbulência que requer modelos adicionais de fechamento.

Além das metodologias DNS e URANS para simulação computacional de escoamentos turbulentos existe ainda uma terceira metodologia também amplamente utilizada, com a qual se modela o comportamento instantâneo do escoamento e que possui menor custo computacional que DNS: a chamada simulação de grandes estruturas (em inglês, *Large Eddy Simulation* - LES).

Nas simulações de grandes estruturas, o espectro de energia cinética turbulenta é dividido em duas bandas, resolvendo-se a primeira banda, dos menores números de onda e modelando-se a interação entre a primeira e a segunda banda. Como uma parte do espectro é resolvida, o resultado não é um comportamento médio do escoamento, como o que se tem utilizando a metodologia URANS. Por outro lado, como se tem também uma parte do espectro que não é resolvida, não se obtém a acurácia fornecida quando se utiliza DNS. O processo de obtenção das equações utilizadas na metodologia LES também passa pela aplicação de um operador de filtragem na Eq. (3.4). Pode-se dizer que as equações para as três metodologias podem ser derivadas das equações de Navier Stokes filtradas, sendo utilizado na metodologia URANS um filtro passa-nada, correspondente a média temporal, em DNS um filtro passa-tudo e em LES um filtro intermediário, dependente da malha utilizada.

3.1.1 Conceito de viscosidade turbulenta

Boussinesq (1877) apresentou uma analogia com o modelo de Stokes para as tensões viscosas moleculares. Através dessa analogia ele propôs que o fechamento

para o tensor de Boussinesq-Reynolds, também fosse realizado com o seguinte modelo:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (3.9)$$

onde μ_t é a chamada viscosidade dinâmica turbulenta e k é a energia cinética turbulenta, dada por:

$$k \equiv \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} \left(\overline{u' u'} + \overline{v' v'} + \overline{w' w'} \right). \quad (3.10)$$

A viscosidade dinâmica turbulenta, $\mu_t(\vec{x}, t)$, apresenta maior dificuldade em sua avaliação, uma vez que ela depende da natureza do escoamento, e não do fluido como a viscosidade dinâmica molecular, constituindo-se numa forte não-linearidade na solução das equações.

A energia cinética turbulenta k também aparece na proposta de Boussinesq, dada pela Eq. (3.9). No entanto, como ela depende apenas do traço do tensor de Boussinesq-Reynolds, a sua natureza é semelhante à da pressão e pode ser incorporada no termo do gradiente de pressão, conforme será apresentado adiante.

Substituindo a Eq. (3.9) em (3.8), tem-se a equação de Navier-Stokes filtrada em notação indicial, utilizando o modelo proposto por Boussinesq:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \nu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right], \quad (3.11)$$

onde $\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho}$.

O divergente do termo envolvendo a energia cinética turbulenta resulta no gradiente da mesma:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{2}{3} k \delta_{ij} \right) = \frac{2}{3} \frac{\partial k}{\partial x_i}, \quad (3.12)$$

o que permite incorporá-lo ao gradiente de pressão na Eq. (3.11), gerando uma pressão modificada na equação modelada

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\bar{f}_i}{\rho}, \quad (3.13)$$

onde a pressão modificada \bar{p}^* é dada por:

$$\bar{p}^* = \bar{p} + \frac{2}{3} \rho k. \quad (3.14)$$

Para recuperar o campo real de pressão estática do escoamento, a energia cinética também deve ser modelada, e isso deve ser feito de maneira simultânea ao cálculo da viscosidade turbulenta.

Essas equações de balanço para as componentes filtradas da velocidade estariam fechadas se não fosse a presença da viscosidade turbulenta, ν_t . O cálculo desta propriedade constitui o principal problema a ser resolvido para a modelagem do fechamento das equações filtradas. Existem vários tipos de modelos de fechamento, que podem ser a zero, a uma ou a duas equações de balanço, podendo ser algébricos ou ainda para as componentes do tensor de Boussinesq-Reynolds. Cada tipo de modelo tem suas particularidades.

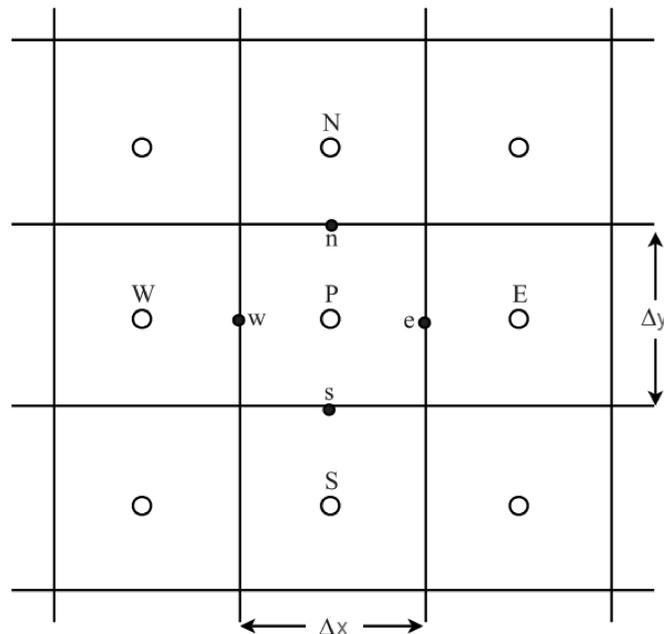
No presente trabalho, foram realizadas algumas simulações computacionais utilizando a metodologia LES, porém, na maior parte dos casos, o modelo de fechamento da turbulência utilizado foi o modelo $k - \epsilon$ padrão, o qual é classificado como pertencente à classe URANS. Esse modelo será apresentado de forma detalhada na seção 3.4.

3.2 Modelagem matemática numérica

Nesta seção serão descritas as metodologias envolvidas no tratamento numérico das equações apresentadas na seção 3.1. O objetivo é abordar prioritariamente os modelos utilizados ao longo do presente trabalho, ressaltando que o MFSim possui uma extensa quantidade de modelos e tratamentos implementados que não serão detalhados aqui pois não foram utilizados nas simulações computacionais realizadas.

Na Fig. 3.1 é apresentada uma representação de uma malha computacional cartesiana bidimensional com o objetivo de se facilitar o entendimento da localização das variáveis na malha ao se aplicar o procedimento de discretização.

Figura 3.1: Representação de uma malha computacional cartesiana bidimensional



Fonte: elaborada pelo autor

A discretização das equações utilizada no MFSim segue um esquema chamado de variáveis ou arranjo deslocado. O conceito de arranjo deslocado para coordenadas cartesianas remonta ao trabalho de Harlow e Welch (1965). Nessa abordagem, as variáveis relacionadas ao campo de velocidade são armazenadas nas faces dos elementos de malha (pontos n , s , w e e da Fig. 3.1) e as variáveis escalares são resolvidas nos centros das células da malha. Para o arranjo co localizado todas as variáveis são calculadas utilizando valores de centro das células (pontos P , N , S , W e E da Fig. 3.1)

Existem três fortes razões que podem ser citadas para a maior utilização do arranjo deslocado. A primeira é a precisão. Como o gradiente de pressão é calculado como a diferença entre pontos adjacentes - ao se usar o arranjo localizado, pontos separados por dois Δx ou Δy - a malha é, na verdade, mais fina. No entanto, como outras derivadas são avaliadas usando pontos mais distantes da malha, os resultados não são tão precisos quanto se uma malha duas vezes mais fina fosse usada com o arranjo localizado. A segunda razão é que é relativamente simples produzir métodos conservativos quando se trabalha com malhas deslocadas. A terceira, e talvez a vantagem mais importante da abordagem deslocada, é que ela resulta em um acoplamento mais estreito entre as variáveis do que se todas elas estivessem localizadas no mesmo nó da malha (TRYGGVASON; SCARDOVELLI; ZALESKI, 2011).

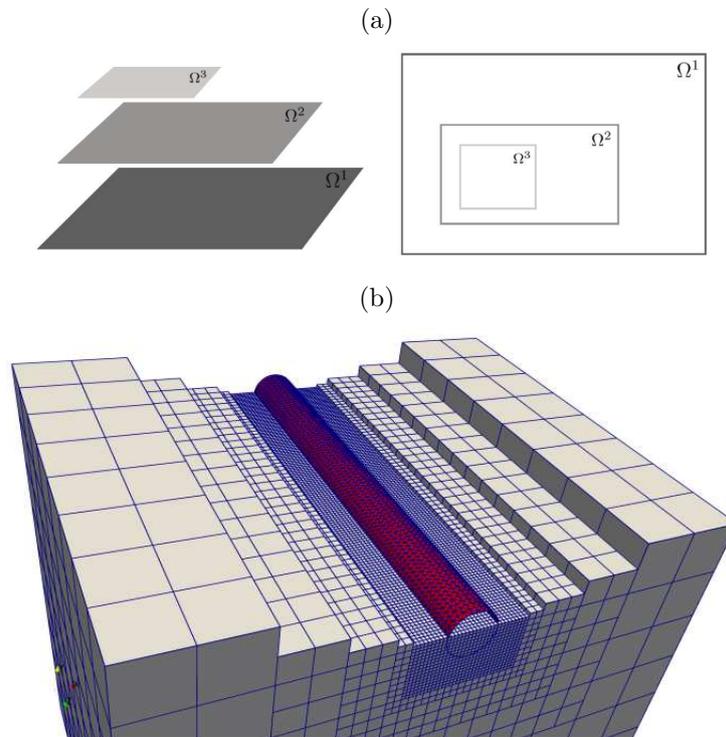
Apesar das vantagens enumeradas para o arranjo deslocado ou desencontrado, essa abordagem traz também alguns pontos de dificuldade, dentre os quais pode-se citar a dificuldade de tratamento das informações em contornos. Surge a necessidade de uma estrutura maior e mais complexa em comparação ao que seria necessário para o arranjo localizado. Levando em conta o fato da malha utilizada no MFSim ser bloco estruturada e multi nível, os tratamentos das informações entre níveis e entre processos se tornam grandes desafios em termos de custo, estabilidade e acurácia.

No MFSim, existe a possibilidade de se utilizar uma malha adaptativa, utilizando a abordagem proposta por Berger e Olinger (1984). Nessa estratégia, a malha computacional utilizada para discretizar o domínio de fluido é formada por blocos em uma sequência de níveis de refinamento, sendo que dois níveis sequenciais obedecem sempre a uma razão de refinamento constante, fixada como 2 no presente trabalho. Cada nível é formado pela união de um ou mais blocos com o mesmo espaçamento de malha, onde o nível base (lbot) é o de menor refinamento, e cobre todo o domínio de cálculo. Os blocos de malha de diferentes níveis devem ser aninhados em sequência até o de menor espaçamento (ltop). Na Fig. 3.2 é apresentada a representação do esquema de níveis (Fig. 3.2a) e um exemplo da malha multinível do MFSim (Fig. 3.2b).

No exemplo apresentado na Fig. 3.2b, é possível observar a configuração de malha para um caso multinível com a presença de um corpo imerso. É possível observar que o domínio do fluido é discretizado utilizando uma malha bloco estruturada com múltiplos níveis de refinamento, essa é a chamada malha euleriana. Já o corpo imerso, nesse caso um cilindro, é representado por uma malha não estruturada triangular (malha vermelha). A malha da superfície imersa é chamada malha lagrangiana. Também é possível observar no exemplo que a superfície imersa é coberta pelo nível mais refinado de malha. Esse é o cenário mais comum nas simulações realizadas com o MFSim e, em todo caso, deve-se garantir que a malha lagrangiana está totalmente contida no mesmo nível de malha. Essa é uma restrição atual do MFSim que pode ser melhorada em trabalhos futuros.

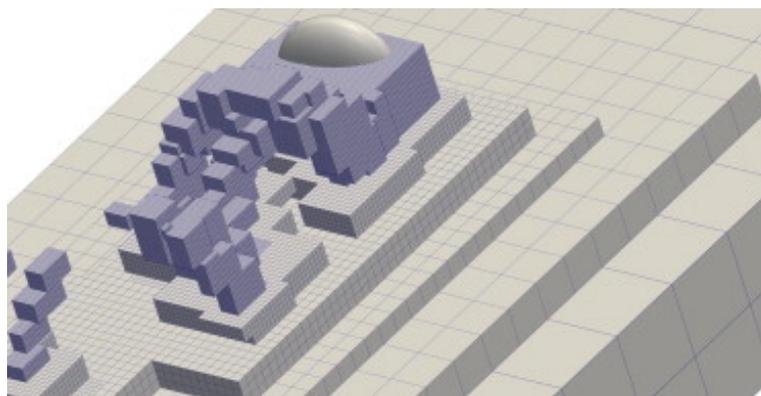
Na Fig. 3.3 é apresentado um exemplo do refinamento de malha bloco estruturada adaptativa. O desprendimento de vórtices atrás de uma bolha em ascensão foi usado como critério de refinamento baseado no gradiente de vorticidade. Esta é uma das opções disponíveis no código, além de opções como remalhagem baseada na interface entre fluidos, no gradiente de viscosidade turbulenta, quantidade de

Figura 3.2: Malha adaptativa do MFSim. (a) Representação do esquema de níveis e (b) exemplo de uma malha multinível com corpo imerso (representado pela malha lagrangiana vermelha).



Fonte: (SANTOS et al., 2019)

Figura 3.3: Exemplo do refinamento de malha bloco estruturada adaptativa. O desprendimento de vórtices atrás de uma bolha em ascensão foi usado como critério de refinamento baseado no gradiente de vorticidade.



Fonte: (PIVELLO et al., 2014)

partículas, gradiente de uma quantidade escalar, entre outras opções.

Mais detalhes a respeito do esquema de malhas implementado no MFSim podem ser encontrados nos trabalhos de Villar et al. (2007), Barbi et al. (2018) e Santos

et al. (2019). O assunto foi abordado de forma bem breve na presente seção com o objetivo de apresentar os principais conceitos, porém, possui diversas particularidades e detalhes de complexidade que foram abordados de forma mais detalhada nos trabalhos supracitados.

Nas subseções seguintes serão apresentados detalhes de outras metodologias numéricas presentes no MFSim e utilizadas ao longo do presente trabalho. Apesar das diversas metodologias presentes no código, o foco será no detalhamento das que foram utilizadas nas simulações computacionais presentes no capítulo 4.

3.2.1 Esquema de integração temporal

Para a integração do termo temporal das equações de balanço no MFSim, foi implementada a proposta de Wang e Ruuth (2008), denominada de métodos de passo de tempo variáveis implícitos-explicitos (em inglês, *Variable Step-size IMPLICIT-EXPLICIT* - VSIMEX). Esta metodologia é uma evolução da apresentada no trabalho de (ASCHER; RUUTH; WETTON, 1995), é adequada à utilização de passos de tempo variáveis e foi descrita de forma detalhada no trabalho de Damasceno et al. (2018).

A discretização das equações de balanço devem ser implementadas da seguinte forma para que seja possível utilizar essa abordagem:

$$\frac{\alpha_2 \Phi^{n+1} + \alpha_1 \Phi^n + \alpha_0 \Phi^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 f(\Phi)^{n+1} + \theta_1 f(\Phi)^n + \theta_0 f(\Phi)^{n-1} + \beta_1 g(\Phi)^n + \beta_0 g(\Phi)^{n-1} \quad (3.15)$$

onde α_i , θ_i e β_i são os coeficientes do método, Δt é o passo de tempo, os superíndices $n + 1$, n e $n - 1$ representam o tempo onde a quantidade é avaliada, sendo $n + 1$ o tempo atual e Φ pode representar uma componente do campo de velocidades, o campo de energia cinética turbulenta (k), ou um campo escalar qualquer. Na Eq. (3.15), $g(\Phi)$ e $f(\Phi)$ representam, respectivamente, os termos advectivo e difusivo das equações de balanço.

As expressões utilizadas para obter os coeficientes são as seguintes

$$\alpha_0 = \frac{(2\gamma - 1)\omega_{n+1}^2}{1 + \omega_{n+1}} \quad (3.16a)$$

$$\alpha_1 = (1 - 2\gamma)\omega_{n+1} - 1 \quad (3.16b)$$

$$\alpha_2 = \frac{1 + 2\gamma\omega_{n+1}}{1 + \omega_{n+1}} \quad (3.16c)$$

$$\beta_0 = -\gamma\omega_{n+1} \quad (3.17a)$$

$$\beta_1 = 1 + \gamma\omega_{n+1} \quad (3.17b)$$

$$\theta_0 = \frac{c}{2} \quad (3.18a)$$

$$\theta_1 = 1 - \gamma - \left(1 + \frac{1}{\omega_{n+1}}\right) \frac{c}{2} \quad (3.18b)$$

$$\theta_2 = \gamma + \frac{c}{2\omega_{n+1}} \quad (3.18c)$$

Nas Eqs. (3.16), (3.17) e (3.18), ω_{n+1} é a relação entre dois passos de tempo consecutivos ($\omega_{n+1} = \Delta t^{n+1}/\Delta t^n$) e γ e c são constantes dependentes do método (DAMASCENO et al., 2018).

Utilizando essa abordagem é possível aplicar métodos diferentes de discretização alterando apenas os coeficientes α_i , θ_i e β_i , conforme a tabela abaixo

Tabela 3.1: Valores dos parâmetros envolvidos na Eq. (3.15) para utilização de diferentes esquemas de integração temporal através da metodologia VSIMEX.

Parâmetros	MCNAB	CNAB	SBDF	Euler	CNLF
α_2	1	1	1,5	1	0,5
α_1	-1	-1	-2	0	0
α_0	0	0	0,5	-1	-0,5
β_1	1,5	1,5	2	0	1
β_0	-0,5	-0,5	-1	1	0
θ_2	0,5625	0,5	1	1	0,5
θ_1	0,375	0,5	0	0	0
θ_0	0,0625	0	0	0	0,5

Conforme pode ser observado, é possível utilizar os métodos (*Modified Crank-Nicolson Adams-Bashforth*), CNAB (*Crank-Nicolson Adams-Bashforth*), SBDF (*Semi-implicit Backward Differentiation Formula*), CNLF (*Crank-Nicolson Leap-Frog*) e Euler. Esse último, que corresponde ao uso dos coeficientes da penúltima coluna na Tab. 3.1, foi o esquema de integração temporal utilizado nas simulações apresentadas no capítulo 4.

3.2.2 Tratamento do termo advectivo

Para o detalhamento da modelagem aplicada à discretização dos termos advectivos das equações, vamos partir da representação deste termo na forma divergente, geralmente tratada na literatura de forma inconsistente como, conservativa. Este termo, na forma divergente, para o transporte de um campo qualquer, Φ , é escrito como

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \Phi) = \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x \Phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_y \Phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z \Phi), \quad (3.19)$$

onde Φ pode representar uma componente do campo de velocidades, o campo de energia cinética turbulenta (k), ou um campo escalar qualquer, sendo x , y e z as direções cartesianas.

O esquema utilizado nas simulações para a discretização deste termo foi o *upwind* de primeira ordem (em inglês, *First Order Upwind* - FOU) (FERZIGER; PERIĆ;

STREET, 2002). Nesse modelo, os valores de Φ nas faces do volume de controle são definidos da seguinte forma:

$$\Phi_i = \max(\rho u_i, 0)\Phi_P + \min(\rho u_i, 0)\Phi_I, \quad (3.20)$$

onde i representa a variável de face analisada (e, w, n ou s da Fig. 3.1), ρu_i denota o fluxo avaliado ($\rho u_i = \rho u_x, \rho u_y$ ou ρu_z), P denota o centro do volume de controle que está sendo tratado (Fig. 3.1) e o sub índice I representa os centros dos volumes vizinhos ao volume de controle P .

O MFSim possui diversos esquemas implementados para o tratamento do termo advectivo das equações de balanço, inclusive esquemas do tipo TVD (em inglês, *Total Variation Diminishing*). Esses esquemas são abordados com maior riqueza de detalhes no trabalho de Damasceno et al. (2018). O FOU é um esquema de primeira ordem e, geralmente, a sua utilização promove maior robustez e estabilidade à simulação. O contraponto desse esquema é a sua acurácia, já que esquemas mais elaborados e complexos podem fornecer resultados mais acurados.

3.2.3 Acoplamento pressão-velocidade

No presente trabalho foi utilizado para o acoplamento entre os campos de pressão e velocidade, o método do passo fracionado (também conhecido como método da projeção) proposto por Chorin (1967) em uma malha cartesiana uniforme e deslocada. Esse é um método não iterativo e pode não ser robusto o suficiente para a simulação de alguns tipos de problemas complexos. O MFSim também possui implementado um método iterativo para acoplamento pressão-velocidade, o SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*), porém, nas simulações realizadas ao longo do desenvolvimento da tese foi utilizado apenas o método da projeção.

O método do passo fracionado pode ser dividido em diferentes etapas. Primeiro, um campo de velocidade auxiliar \vec{u}^* , é transportado, usando a pressão do passo de tempo anterior (p^n). Em seguida, a exigência de que a nova velocidade satisfaça a equação de continuidade leva a uma equação de Poisson para a nova pressão. Após a solução da equação de pressão, obtém-se o novo campo de velocidade, que satisfaz as equações de continuidade e quantidade de movimento. De forma breve, o procedimento consiste em:

- Particularização da Eq. (3.15) para a quantidade de movimento linear

$$\rho^n \frac{\alpha_2 \vec{u}^* + \alpha_1 \vec{u}^n + \alpha_0 \vec{u}^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 f(\vec{u}^*) + \theta_1 f(\vec{u})^n + \theta_0 f(\vec{u})^{n-1} + \beta_1 g(\vec{u})^n + \beta_0 g(\vec{u})^{n-1} - \nabla p^n + \rho^n \vec{g}. \quad (3.21)$$

- A exigência de que a nova velocidade satisfaça a equação de continuidade leva a uma equação de Poisson para a correção de pressão q :

$$\nabla \left[\frac{1}{\rho^n} \nabla q^{n+1} \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t^{n+1}} \nabla \vec{u}^*. \quad (3.22)$$

- Correção do campo de velocidades baseado na correção de pressão q :

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^* - \frac{\Delta t^{n+1}}{\alpha_2 \rho^n} \nabla q^{n+1}. \quad (3.23)$$

- Correção do campo de pressão:

$$p^{n+1} = p^n + q^{n+1} \quad (3.24)$$

- Verificação da equação de balanço de massa utilizando o novo campo de velocidade

$$\nabla \cdot \vec{u}^{n+1} = 0 \quad (3.25)$$

Para maiores detalhes a respeito da implementação do método e da discretização utilizada no MFSim, pode-se consultar o trabalho de Villar et al. (2007), onde o método e as equações envolvidas são discutidas de forma mais detalhada, inclusive para o contexto de escoamentos bifásicos utilizando a metodologia *front-tracking*.

3.2.4 Solução dos sistemas lineares

A primeira metodologia de solução disponível no código MFSim para a solução dos sistemas lineares resultantes é o *Multigrid*-Multinível. Essa técnica de solução foi abordada de forma extensa e detalhada no trabalho de Villar et al. (2007), durante o qual foi realizada a implementação do método já considerando o contexto de malhas adaptativas bloco-estruturadas.

O método Multigrid pode ser dividido em duas idéias (TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHULLER, 2000). A primeira delas é baseada na suavização do erro de métodos iterativos clássicos para a solução de sistemas lineares como, por exemplo, o método de Gauss Siedel. A segunda ideia é que o erro suavizado na malha em um certo nível pode ser aproximado em uma malha mais grosseira.

O método *Multigrid*-Multinível está disponível no código para a solução de todas as equações de balanço presentes (velocidades, pressão, escalares), sendo que, durante o presente trabalho, foi realizada uma extensa refatoração na parte do código onde está implementado o método para os escalares. A refatoração realizada visou, principalmente, eficiência e generalidade.

Outra possibilidade, adicionada recentemente ao MFSim, é o uso da biblioteca *Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation* (PETSc) (BALAY et al., 2022a) para a solução dos sistemas lineares. Na PETSc estão disponíveis diversos pré-condicionadores e solucionadores para sistemas lineares (BALAY et al., 2022b), os quais podem ser combinados para que se encontre o par que mais atende à gama de problemas que se deseja simular. No MFSim inclusive, existe um esquema de troca de pares implementado. Assim, caso o valor de resíduo pré determinado não seja obtido com o primeiro par, é realizada uma troca automática do par pré condicionador/solver na iteração.

Ao se utilizar o método *Multigrid*-Multinível implementado no MFSim, deve-se buscar uma configuração de malha que atenda a determinados requisitos visando extrair maior eficiência do método. Já ao se utilizar a PETSc, não é necessário

que se busque uma configuração de malha ótima já que a abordagem multinível não é utilizada e apenas as células visíveis da malha são levadas em consideração. No MFSim é possível utilizar uma composição entre as duas abordagens, resolvendo, por exemplo, a equação da pressão utilizando PETSc e as demais equações utilizando *Multigrid*-Multinível. No presente trabalho, a solução de sistemas lineares com a PETSc foi bastante utilizada nas simulações computacionais com o objetivo de se aplicar esquemas mais robustos de solução em cenários mais complexos.

3.3 Modelo sub-malha de Smagorinsky

Os modelos utilizados em simulações LES são também conhecidos como modelos sub-malhas, justamente pela característica de modelar os efeitos no escoamento de estruturas que não são bem representadas pela malha computacional utilizada. Uma das possíveis abordagens dessa classe é o chamado modelo sub-malha de Smagorinsky ou modelo clássico de Smagorinsky.

A modelagem de Smagorinsky é baseada na hipótese de equilíbrio para o qual a energia injetada nas estruturas turbilhonares é igual a energia transformada nas estruturas de Kolmogorov. A viscosidade turbulenta pode ser expressa em função do tensor taxa de deformação S_{ij} , da escala de comprimento l e de uma constante C_s , conhecida como constante de Smagorinsky:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 |S_{ij}|. \quad (3.26)$$

A norma do tensor taxa de deformação é calculada utilizando as componentes do campo de velocidade como:

$$|S_{ij}| = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.27)$$

já o comprimento característico utilizado na (3.26), é calculado com base no espaçamento da malha nas três direções, por meio da equação

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z}. \quad (3.28)$$

Em escoamentos onde pode-se assumir a hipótese de turbulência homogênea e isotrópica, a constante de Smagorinsky do modelo foi determinada analiticamente por Lilly (1992) como $C_s = 0,18$. Porém, na prática esta constante pode ser calibrada de acordo com o escoamento, assumindo valores entre 0,05 e 0,30. Um tratamento especial deve ser aplicado em zonas do escoamento próximas a paredes, regiões onde os efeitos viscosos sobre a turbulência são significativos, e a hipótese de turbulência homogênea e isotrópica se torna menos aplicável. Como consequência, a constante de Smagorinsky deve assumir valores menores. Uma forma de tratamento desse problema é a utilização de uma função que amortece o valor da viscosidade turbulenta em regiões próximas a paredes.

Driest (1956), apresentou uma proposta que consiste em aplicar uma função de amortecimento à constante de Smagorinsky para que, através dessa função, C_s

assuma valores adequados em regiões do escoamento próximas às paredes. A função proposta é dada por:

$$C_s = C_{s0} \left(1 - \exp(d^+/A^+)\right)^2, \quad (3.29)$$

onde d^+ é a distância relativa, calculada como

$$d^+ = \frac{u_\tau d}{\nu}, \quad (3.30)$$

sendo d a distância entre o volume de controle e a parede mais próxima, u_τ é a velocidade de cisalhamento calculada com base na tensão de cisalhamento na parede τ_w , por meio da expressão

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}. \quad (3.31)$$

Na Eq. (3.29), $A^+ = 25$ é uma constante apresentada por Ferziger, Perić e Street (2002) e C_{s0} é a constante de Smagorinsky, geralmente limitada em $0,05 < C_{s0} < 0,3$.

Um tratamento especial deve ser aplicado para amortecer a viscosidade em regiões próximas às paredes modeladas por métodos de fronteira imersa. Nesse cenário, d é a distância do centro do volume euleriano (representação do domínio fluido) ao centro do volume lagrangiano (representação da superfície imersa) mais próximo, e a tensão τ_w é calculada a partir campo de velocidades no volume euleriano onde o centro do volume lagrangiano está contido, sendo esse volume lagrangiano o mais próximo do volume euleriano analisado. Nesse cálculo de τ_w é necessário projetar o vetor velocidade (u, v, w) na direção tangencial à fronteira imersa.

A modelagem sub-malha empregada em simulações LES realizadas ao longo do presente trabalho foi a apresentada ao longo da atual seção, porém, no código MFSim também está implementada a chamada modelagem dinâmica sub-malha proposta por Germano et al. (1991).

3.4 Modelo de fechamento $k - \epsilon$ padrão

Os modelos a zero ou a uma equação de balanço apresentam como característica a necessidade de informações sobre o escoamento além das condições iniciais e de contorno. Dois exemplos são o modelo do comprimento de mistura de Prandtl, o qual requer que se conheça um comprimento característico do escoamento, que varia caso a caso, para a utilização do mesmo e o modelo de Prandtl-Reichardt, que tem como parâmetro χ , que é uma constante empírica. Buscando contornar tal necessidade Kolmogorov (1941) propôs, em adição à equação de balanço para a energia cinética turbulenta k proposta por Prandtl (1945), uma equação de balanço para a frequência de Kolmogorov, denotada por ω . Seguindo as ideias de Kolmogorov, Chou (1945), Davydov (1961) e Harlow e Nakayama (1968), trabalharam na dedução de uma equação de balanço, adicional à equação da energia cinética turbulenta, $k \left[\frac{m^2}{s^2} \right]$, para a potência específica de transformação viscosa, $\epsilon \left[\frac{W}{m^3} \right]$, possibilitando o surgimento dos modelos $k - \epsilon$.

De forma geral as equações de balanço para k e ϵ podem ser escritas como

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + f_k, \quad (3.32)$$

e

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j \epsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + f_\epsilon, \quad (3.33)$$

onde f_k é o conjunto de termos referentes a transformações relativas a energia cinética turbulenta e f_ϵ é o conjunto de termos correspondentes a transformações relativas a ϵ . As expressões para σ , f_k e f_ϵ dependem dos diferentes modelos propostos e apresentados na literatura.

O cálculo da viscosidade dinâmica turbulenta como uma função da energia cinética turbulenta, k , e da potência específica de transformação viscosa, ϵ , é dado por

$$\mu_t = \rho \frac{C_\mu k^2}{\epsilon}, \quad (3.34)$$

onde C_μ é um parâmetro que pode ser constante ou dinâmico de acordo com o modelo $k - \epsilon$ utilizado.

A seguir as equações de transporte e os parâmetros envolvidos nas mesmas serão particularizados para o modelo $k - \epsilon$ implementado no presente trabalho, o $k - \epsilon$ padrão.

O modelo $k - \epsilon$ padrão foi inicialmente proposto por Launder e Spalding (1972). Com o decorrer do tempo foram sugeridas modificações a esse modelo. Algumas alterações não apresentaram mudanças significativas nos processos de dedução das equações de balanço, e por esse motivo foi mantida a mesma nomenclatura. No entanto, surgiram novas propostas na dedução das equações de k e ϵ , e assim surgiram novas variações do modelo original.

O modelo $k - \epsilon$ padrão consiste em um modelo semi-empírico, muito popular na simulação de problemas industriais devido a sua robustez, ao seu baixo custo computacional e a sua acurácia razoável. A obtenção das equações de balanço para k e ϵ é dada através de considerações físicas e empíricas. As hipóteses necessárias para a demonstração das equações são apresentadas por Mohammadi e Pironneau (1994).

Dentre as vantagens do modelo $k - \epsilon$ padrão, são citadas na literatura a implementação relativamente simples, um baixo custo computacional, previsões razoáveis para diversos escoamentos e cálculos estáveis que convergem com relativa facilidade.

Contudo, o modelo também apresenta desvantagens. Algumas das citadas na literatura são que o modelo é adequado apenas para escoamentos caracterizados por altos valores do número Reynolds, fornece previsões ruins para escoamentos rotativos, jatos, escoamentos rapidamente deformados, e escoamentos totalmente desenvolvidos em dutos não circulares. Além disso ele necessita da implementação de modelos adicionais para tratamento de escoamentos próximos a paredes, quando tem-se como objetivo a simulação de escoamentos parietais (as equações para k e ϵ não são válidas na subcamada viscosa) e a dificuldade na atribuição de condições de contorno para k e ϵ , em particular para condições de entrada, porque são quantidades dependentes de dados experimentais ou estatísticos.

3.4.1 Modelo matemático diferencial

As duas equações de balanço para o modelo $k - \epsilon$ padrão podem ser escritas como

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t S^2 - \rho \epsilon, \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j \epsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \mu_t S^2 - \rho C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k}. \quad (3.36)$$

onde ρ é a massa específica do fluido, μ e μ_t são as viscosidades dinâmicas molecular e turbulenta, respectivamente, $\sigma_k = 1.0$ é uma constante do modelo e

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad (3.37)$$

sendo S_{ij} o tensor taxa de deformação dado por

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.38)$$

As Eqs. (3.35) e (3.36) são então utilizadas para calcular o viscosidade dinâmica turbulenta dada por

$$\mu_t = \frac{\rho C_\mu k^2}{\epsilon}. \quad (3.39)$$

onde os coeficientes do modelo são: $\sigma_k = 1,0$, $\sigma_\epsilon = 1,3$, $C_\mu = 0,09$, $C_{\epsilon 1} = 1,44$ e $C_{\epsilon 2} = 1,92$.

3.4.2 Modelo matemático numérico

Nesta parte do trabalho, serão apresentadas as equações do modelo matemático em suas formas discretizadas, através do método de volumes finitos utilizando malha deslocada. Utilizou-se o esquema de diferenças centradas (CDS) como exemplo para a discretização do termo advectivo, e para descrever as derivadas primeiras utilizou-se aproximação de primeira ordem.

3.4.2.1 Equação da energia cinética turbulenta

- Termo transiente:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \left(\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} \right) dx dy dz dt = \rho_{i,j,k} \left(k_{i,j,k}^{n+1} - k_{i,j,k}^n \right) \Delta x \Delta y \Delta z$$

- Termo advectivo:

$$\begin{aligned}
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \left(\frac{\partial(\rho \bar{u}_j k)}{\partial x_j} \right) dx dy dz dt \\
&= \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \left(\frac{\partial(\rho \bar{u} k)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \bar{v} k)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \bar{w} k)}{\partial z} \right) dx dy dz dt \\
&= \rho_{i,j,k} \frac{\Delta y \Delta z \Delta t}{2} \left[\bar{u}_{i+1,j,k}^n (k_{i+1,j,k}^n + k_{i,j,k}^n) - \bar{u}_{i,j,k}^n (k_{i-1,j,k}^n + k_{i,j,k}^n) \right] \\
&+ \rho_{i,j,k} \frac{\Delta x \Delta z \Delta t}{2} \left[\bar{v}_{i,j+1,k}^n (k_{i,j+1,k}^n + k_{i,j,k}^n) - \bar{v}_{i,j,k}^n (k_{i,j-1,k}^n + k_{i,j,k}^n) \right] \\
&+ \rho_{i,j,k} \frac{\Delta x \Delta y \Delta t}{2} \left[\bar{w}_{i,j,k+1}^n (k_{i+1,j,k+1}^n + k_{i,j,k}^n) - \bar{w}_{i,j,k}^n (k_{i,j,k-1}^n + k_{i,j,k}^n) \right]
\end{aligned}$$

- Termo difusivo:

$$\begin{aligned}
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] dx dy dz dt \\
&= \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] dx dy dz dt \\
&+ \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] dx dy dz dt \\
&+ \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right] dx dy dz dt \\
&= \frac{\Delta y \Delta z \Delta t}{2\Delta x} \left[\left(\mu_{i+1,j,k} + \mu_{i,j,k} + \frac{\mu_{t,i+1,j,k}^n + \mu_{t,i,j,k}^n}{\sigma_k} \right) (k_{i+1,j,k}^n - k_{i,j,k}^n) \right. \\
&\quad \left. - \left(\mu_{i,j,k} + \mu_{i-1,j,k} + \frac{\mu_{t,i,j,k}^n + \mu_{t,i-1,j,k}^n}{\sigma_k} \right) (k_{i,j,k}^n - k_{i-1,j,k}^n) \right] \\
&+ \frac{\Delta x \Delta z \Delta t}{2\Delta y} \left[\left(\mu_{i,j+1,k} + \mu_{i,j,k} + \frac{\mu_{t,i,j+1,k}^n + \mu_{t,i,j,k}^n}{\sigma_k} \right) (k_{i,j+1,k}^n - k_{i,j,k}^n) \right. \\
&\quad \left. - \left(\mu_{i,j,k} + \mu_{i,j-1,k} + \frac{\mu_{t,i,j,k}^n + \mu_{t,i,j-1,k}^n}{\sigma_k} \right) (k_{i,j,k}^n - k_{i,j-1,k}^n) \right] \\
&+ \frac{\Delta x \Delta y \Delta t}{2\Delta z} \left[\left(\mu_{i,j,k+1} + \mu_{i,j,k} + \frac{\mu_{t,i,j,k+1}^n + \mu_{t,i,j,k}^n}{\sigma_k} \right) (k_{i,j,k+1}^n - k_{i,j,k}^n) \right. \\
&\quad \left. - \left(\mu_{i,j,k} + \mu_{i,j,k-1} + \frac{\mu_{t,i,j,k}^n + \mu_{t,i,j,k-1}^n}{\sigma_k} \right) (k_{i,j,k}^n - k_{i,j,k-1}^n) \right]
\end{aligned}$$

- Termo de transformação:

$$\begin{aligned}
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \mu_t (2S_{ij} S_{ij}) dx dy dz dt = \\
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e 2 \mu_t (S_{ij} S_{ij}) dx dy dz dt = \\
& \quad 2 \mu_{t,i,j,k}^n (S_{ij} S_{ij}) \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t
\end{aligned}$$

- Termo de destruição:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e -\rho\epsilon \, dx \, dy \, dz \, dt = -\rho_{i,j,k} \epsilon_{i,j,k}^n \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$$

3.4.2.2 Equação da potência específica de transformação viscosa, ϵ

- Termo transiente:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \left(\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} \right) dx \, dy \, dz \, dt = \rho_{i,j,k} (\epsilon_{i,j,k}^{n+1} - \epsilon_{i,j,k}^n) \Delta x \Delta y \Delta z$$

- Termo advectivo:

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \left(\frac{\partial(\rho\bar{u}_j\epsilon)}{\partial x_j} \right) dx \, dy \, dz \, dt \\ = & \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \left(\frac{\partial(\rho\bar{u}\epsilon)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v}\epsilon)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\epsilon)}{\partial z} \right) dx \, dy \, dz \, dt \\ = & \rho_{i,j,k} \frac{\Delta y \Delta z \Delta t}{2} \left[\bar{u}_{i+1,j,k}^n (\epsilon_{i+1,j,k}^n + \epsilon_{i,j,k}^n) - \bar{u}_{i,j,k}^n (\epsilon_{i-1,j,k}^n + \epsilon_{i,j,k}^n) \right] \\ + & \rho_{i,j,k} \frac{\Delta x \Delta z \Delta t}{2} \left[\bar{v}_{i,j+1,k}^n (\epsilon_{i,j+1,k}^n + \epsilon_{i,j,k}^n) - \bar{v}_{i,j,k}^n (\epsilon_{i,j-1,k}^n + \epsilon_{i,j,k}^n) \right] \\ + & \rho_{i,j,k} \frac{\Delta x \Delta y \Delta t}{2} \left[\bar{w}_{i,j,k+1}^n (\epsilon_{i+1,j,k+1}^n + \epsilon_{i,j,k}^n) - \bar{w}_{i,j,k}^n (\epsilon_{i,j,k-1}^n + \epsilon_{i,j,k}^n) \right] \end{aligned}$$

- Termo difusivo:

$$\begin{aligned}
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] dx dy dz dt \\
&= \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right] dx dy dz dt \\
&\quad + \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right] dx dy dz dt \\
&\quad + \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \right] dx dy dz dt \\
&= \frac{\Delta y \Delta z \Delta t}{2\Delta x} \left[\left(\mu_{i+1,j,k} + \mu_{i,j,k} + \frac{\mu_{t_{i+1,j,k}}^n + \mu_{t_{i,j,k}}^n}{\sigma_\epsilon} \right) (\epsilon_{i+1,j,k}^n - \epsilon_{i,j,k}^n) \right. \\
&\quad \left. - \left(\mu_{i,j,k} + \mu_{i-1,j,k} + \frac{\mu_{t_{i,j,k}}^n + \mu_{t_{i-1,j,k}}^n}{\sigma_\epsilon} \right) (\epsilon_{i,j,k}^n - \epsilon_{i-1,j,k}^n) \right] \\
&\quad + \frac{\Delta x \Delta z \Delta t}{2\Delta y} \left[\left(\mu_{i,j+1,k} + \mu_{i,j,k} + \frac{\mu_{t_{i,j+1,k}}^n + \mu_{t_{i,j,k}}^n}{\sigma_\epsilon} \right) (\epsilon_{i,j+1,k}^n - \epsilon_{i,j,k}^n) \right. \\
&\quad \left. - \left(\mu_{i,j,k} + \mu_{i,j-1,k} + \frac{\mu_{t_{i,j,k}}^n + \mu_{t_{i,j-1,k}}^n}{\sigma_\epsilon} \right) (\epsilon_{i,j,k}^n - \epsilon_{i,j-1,k}^n) \right] \\
&\quad + \frac{\Delta x \Delta y \Delta t}{2\Delta z} \left[\left(\mu_{i,j,k+1} + \mu_{i,j,k} + \frac{\mu_{t_{i,j,k+1}}^n + \mu_{t_{i,j,k}}^n}{\sigma_\epsilon} \right) (\epsilon_{i,j,k+1}^n - \epsilon_{i,j,k}^n) \right. \\
&\quad \left. - \left(\mu_{i,j,k} + \mu_{i,j,k-1} + \frac{\mu_{t_{i,j,k}}^n + \mu_{t_{i,j,k-1}}^n}{\sigma_\epsilon} \right) (\epsilon_{i,j,k}^n - \epsilon_{i,j,k-1}^n) \right]
\end{aligned}$$

- Termo de produção:

$$\begin{aligned}
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e C_{\epsilon 1} \rho \frac{\epsilon}{k} \mu_t (2S_{ij} S_{ij}) dx dy dz dt \\
&= \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e 2 C_{\epsilon 1} \rho \frac{\epsilon}{k} \mu_t (S_{ij} S_{ij}) dx dy dz dt \\
&= 2 C_{\epsilon 1} \rho_{i,j,k} \frac{\epsilon_{i,j,k}^n}{k_{i,j,k}^n} \mu_{t_{i,j,k}}^n (S_{ij} S_{ij}) \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t
\end{aligned}$$

- Termo de destruição:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e -C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} dx dy dz dt = -C_{\epsilon 2} \rho_{i,j,k} \frac{\epsilon_{i,j,k}^n{}^2}{k_{i,j,k}^n} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$$

3.4.2.3 Tensor taxa de deformação

$$\begin{aligned}
S_{ij}S_{ij} &= \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial z}\right)^2 + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial y}\right)^2 \right] \\
&= \left[\left(\frac{\bar{u}_{i+1,j,k}^n - \bar{u}_{i,j,k}^n}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{\bar{v}_{i,j+1,k}^n - \bar{v}_{i,j,k}^n}{\Delta y}\right)^2 + \left(\frac{\bar{w}_{i,j,k+1}^n - \bar{w}_{i,j,k}^n}{\Delta z}\right)^2 \right] \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[\frac{\left(\bar{u}_{i+1,j+1,k}^n + \bar{u}_{i,j+1,k}^n\right) - \left(\bar{u}_{i+1,j-1,k}^n + \bar{u}_{i,j-1,k}^n\right)}{\Delta y} \right. \\
&\quad \quad \left. + \frac{\left(\bar{v}_{i+1,j+1,k}^n + \bar{v}_{i+1,j,k}^n\right) - \left(\bar{v}_{i-1,j+1,k}^n + \bar{v}_{i-1,j,k}^n\right)}{\Delta x} \right]^2 \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[\frac{\left(\bar{w}_{i+1,j,k+1}^n + \bar{w}_{i+1,j,k}^n\right) - \left(\bar{w}_{i-1,j,k+1}^n + \bar{w}_{i-1,j,k}^n\right)}{\Delta x} \right. \\
&\quad \quad \left. + \frac{\left(\bar{u}_{i+1,j,k+1}^n + \bar{u}_{i,j,k+1}^n\right) - \left(\bar{u}_{i+1,j,k-1}^n + \bar{u}_{i,j,k-1}^n\right)}{\Delta z} \right]^2 \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[\frac{\left(\bar{v}_{i,j+1,k+1}^n + \bar{v}_{i,j,k+1}^n\right) - \left(\bar{v}_{i,j+1,k-1}^n + \bar{v}_{i,j,k-1}^n\right)}{\Delta z} \right. \\
&\quad \quad \left. + \frac{\left(\bar{w}_{i,j+1,k+1}^n + \bar{w}_{i,j+1,k}^n\right) - \left(\bar{w}_{i,j-1,k+1}^n + \bar{w}_{i,j-1,k}^n\right)}{\Delta y} \right]^2
\end{aligned}$$

3.4.3 Modelo a duas camadas

Chen e Patel (1988) introduziram um modelo de duas camadas (em inglês, *two-layer wall treatment*) que integra o modelo de uma equação (energia cinética turbulenta) de Wolfshtein (1969) à parede, e representa o valor de ϵ na região próxima à parede em termos da energia cinética turbulenta (k) e um comprimento característico (l_ϵ). Na região totalmente turbulenta do domínio de escoamento, o modelo $k - \epsilon$ é utilizado de forma normal. Ou seja, o modelo a duas camadas consiste em um tratamento realizado sobre propriedades do escoamento em regiões próximas às paredes. A importância desse tipo de tratamento está associada ao fato dos modelos $k - \epsilon$ serem desenvolvidos para escoamentos caracterizados por altos números de Reynolds.

Assim, o princípio básico do modelo a duas camadas é a divisão do domínio computacional em uma região onde o efeito viscoso se torna relevante em relação aos efeitos inerciais (próxima a parede, caracterizada por baixo número de Reynolds), e uma região completamente turbulenta. Caso o objetivo seja resolução da subcamada viscosa, existe a necessidade de que as primeiras células computacionais próximas à parede tenham o valor de $y^+ \simeq 1$. A identificação dessas duas regiões abordadas depende do número de Reynolds turbulento calculado em cada célula, Re_y , e da menor distância entre cada célula e a parede, y , como:

$$Re_y \equiv \rho y \sqrt{k} / \mu, \quad (3.40)$$

$$y \equiv \min_{\vec{r}_w \in \Gamma_w} \|\vec{r} - \vec{r}_w\|, \quad (3.41)$$

no qual \vec{r} é o vetor posição da célula em questão, \vec{r}_w é o vetor posição de um ponto da parede.

O limite das regiões estabelecidas é definido por $Re_y^* = 200$, de forma que na região completamente desenvolvida $Re_y > Re_y^*$, e na região onde os efeitos viscosos são relevantes, $Re_y < Re_y^*$. Com isso, o modelo será efetivo após uma correção dos valores de ϵ e μ_t na região próxima à parede ($Re_y < Re_y^*$), os quais foram previamente calculados por um modelo $k - \epsilon$.

A viscosidade turbulenta para a formulação a duas camadas é calculada por:

$$\mu_{t,2layer} = \rho C_\mu l_\mu \sqrt{k}, \quad (3.42)$$

onde C_μ é um parâmetro do modelo $k - \epsilon$, sendo $C_\mu = 0,09$ para o modelo padrão, e o comprimento característico da turbulência (l_μ) é dado por:

$$l_\mu = y C_l^* \left(1 - e^{-Re_y/A_\mu}\right), \quad (3.43)$$

com $C_l^* = \kappa C_\mu^{-3/4}$, e $A_\mu = 70$.

Dessa forma, a viscosidade turbulenta após o tratamento é obtida a partir de uma combinação da viscosidade turbulenta calculada no modelo $k - \epsilon$ e a da formulação a duas camadas:

$$\mu_{t,enhanced} = \lambda_\epsilon \mu_t + (1 - \lambda_\epsilon) \mu_{t,2layer}, \quad (3.44)$$

sendo λ_ϵ uma função de combinação resolvida por:

$$\lambda_\epsilon = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{Re_y - Re_y^*}{A} \right) \right], \quad (3.45)$$

onde

$$A = \frac{|\Delta Re_y|}{a \tanh(0,98)}, \quad (3.46)$$

de modo que ΔRe_y corresponde a um valor entre 5% e 20% de Re_y^* .

Da mesma maneira, é obtida a potência de transformação viscosa melhorada:

$$\epsilon_{enhanced} = \lambda_\epsilon \epsilon + (1 - \lambda_\epsilon) \epsilon_{2layer}, \quad (3.47)$$

onde, para formulação a duas camadas, tem-se que:

$$\epsilon_{2layer} = \frac{k^{3/2}}{l_\epsilon}, \quad (3.48)$$

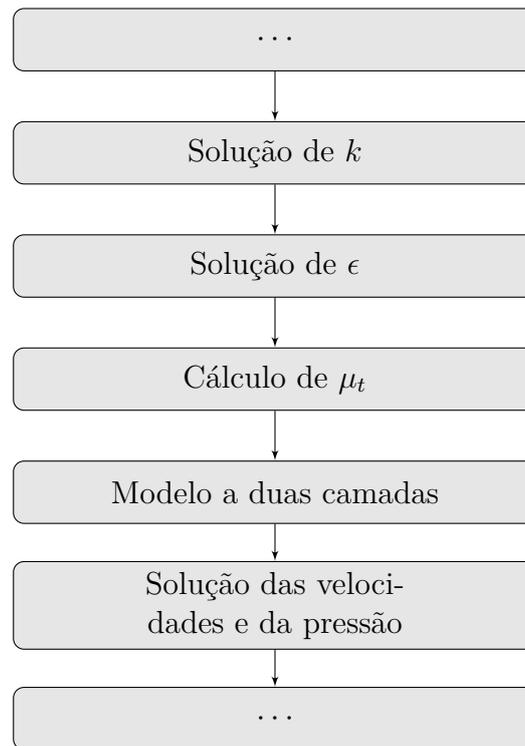
sendo

$$l_\epsilon = y C_l^* \left(1 - e^{-Re_y/A_\epsilon}\right), \quad (3.49)$$

em que $A_\epsilon = 2C_l^*$.

Para melhor compreensão de como foi implementado o modelo a duas camadas para o tratamento das regiões próximas a parede no código MFSim, um algoritmo representando os passos aplicados na utilização do modelo a duas camadas em conjunto a um modelo $k - \epsilon$ é mostrado, na Fig. 3.4.

Figura 3.4: Algoritmo do modelo de tratamento próximo a parede dentro do MFSim.



Fonte: elaborado pelo autor.

3.5 Modelagem para a simulação de escoamentos com a presença de corpos imersos utilizando modelos de turbulência da classe $k-\epsilon$

A simulação de escoamentos na presença de corpos imersos utilizando malhas regulares e cartesianas é objeto de diversos trabalhos na literatura, com diferentes propostas. As diferentes propostas apresentadas têm aspectos positivos e negativos. A dificuldade de implementação, a precisão dos resultados e o custo computacional, por exemplo, diferem entre si.

Uma possibilidade ao se trabalhar com corpos imersos é a utilização de duas malhas distintas, uma malha euleriana e uma malha lagrangiana. A malha euleriana corresponde ao domínio computacional onde são discretizadas as equações de balanço dos fluidos, e a malha lagrangiana é usada para representar a geometria do corpo imerso. O *Multi-Direct Forcing* (MDF) proposto por Wang, Fan e Luo (2008c) é um exemplo de método para fronteira imersa (em inglês, *Immersed Boundary Method* -

IBM). No presente trabalho, o MDF é aplicado.

O objetivo do MDF é impor (forçar) o valor desejado de algumas informações no contorno do corpo. Por exemplo, a velocidade na superfície de uma esfera estacionária imersa em um escoamento é nula, então o valor desejado da velocidade forçada pelo MDF na superfície da esfera é zero. Portanto, o MDF inclui um termo fonte nas equações de Navier-Stokes, o qual está associado ao valor forçado. Esse termo fonte é obtido pela diferença entre o valor estimado da informação durante o novo intervalo de tempo, que é interpolado nos pontos da malha lagrangiana, e o valor a ser imposto. Portanto, como o termo fonte é calculado em cada ponto da malha lagrangiana, ele deve ser distribuído aos pontos da malha euleriana mais próximos. A interpolação e a distribuição são realizadas usando a função chapéu. Finalmente, esse processo é repetido em um *loop* até que se atinja a tolerância desejada ou o máximo número de iterações desejado.

O uso do método MDF para campos de velocidade foi estudado por vários autores, mas existem poucos estudos baseados no uso do método MDF para modelos de turbulência do tipo *Unsteady Reynolds Average Navier-Stokes* (URANS).

Durante o presente trabalho foi desenvolvida uma nova metodologia para o acoplamento do modelo de turbulência $k - \epsilon$ padrão ao MDF.

Para o presente trabalho, foi utilizado o modelo $k - \epsilon$ padrão, proposto por Launder e Spalding (1972) junto ao modelo para tratamento de regiões próximas a parede chamado *two-layer wall treatment* (CHEN; PATEL, 1988). O modelo $k - \epsilon$ padrão requer duas equações de balanço adicionais ao sistema composto pelas equações de Navier-Stokes e equação de continuidade, considerando casos isotérmicos.

A primeira equação de balanço deste modelo é para a energia cinética turbulenta, k [m^2/s^2], a qual é modelada a partir da Eq. (3.35).

Para o método MDF, é necessário forçar um valor para a energia cinética turbulenta na superfície do corpo. Como a velocidade em uma parede é nula, a condição de contorno imposta no corpo imerso para a energia cinética turbulenta também é nula.

A segunda equação é resolvida para a potência específica de transformação da energia cinética turbulenta, ϵ [m^2/s^3], a qual foi apresentada na Eq. (3.36).

3.5.1 Metodologia de forçagem para k e ϵ

Para apresentar a dedução da metodologia, o primeiro passo é considerar duas equações de balanço para a propriedade que será submetida ao método. Como exemplo será apresentada a dedução para a energia cinética turbulenta, k .

A primeira equação utilizada é para a propriedade estimada, neste caso o k estimado é representado por k^* e a equação tem a mesma forma da Eq. (3.35) com a adição do termo f_k , o qual é um termo fonte relativo ao MDF:

$$\frac{\partial(\rho k^*)}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial(\rho k^*)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k^*}{\partial x_j} \right] + S_k + f_k, \quad (3.50)$$

onde $S_k = \mu_t S^2 - \rho \epsilon$.

A segunda equação é a própria Eq. (3.35)

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial(\rho k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + S_k \quad (3.51)$$

Utilizando o método de Euler para a discretização do termo temporal nas Eqs. (3.50) e (3.51), e adicionando uma soma equivalente a zero na (3.51) tem-se:

$$\frac{\rho^{(n+1)} k^{*(n+1)} - \rho^{(n-1)} k^{(n-1)}}{\Delta t} + \bar{u}_j \frac{\partial(\rho k^*)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k^*}{\partial x_j} \right] + S_k + f_k, \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{(n+1)} k^{(n+1)} - \rho^{(n-1)} k^{(n-1)}}{\Delta t} + \frac{\rho^{(n+1)}}{\Delta t} (k^{*(n+1)} - k^{(n+1)}) \\ + \bar{u}_j \frac{\partial(\rho k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + S_k, \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde ρ é a massa específica do fluido.

Rearranjando os termos da Eq. (3.53) e comparando-a com a Eq. (3.52), é possível obter um sistema composto por duas equações. A Eq. (3.54) é a equação de balanço para k e a Eq. (3.55) é a expressão para se calcular o termo fonte do MDF.

$$\frac{\rho^{(n+1)} k^{*(n+1)} - \rho^{(n-1)} k^{(n-1)}}{\Delta t} + \bar{u}_j \frac{\partial(\rho k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + S_k, \quad (3.54)$$

$$f_k = \frac{\rho^{(n+1)}}{\Delta t} (k^{(n+1)} - k^{*(n+1)}). \quad (3.55)$$

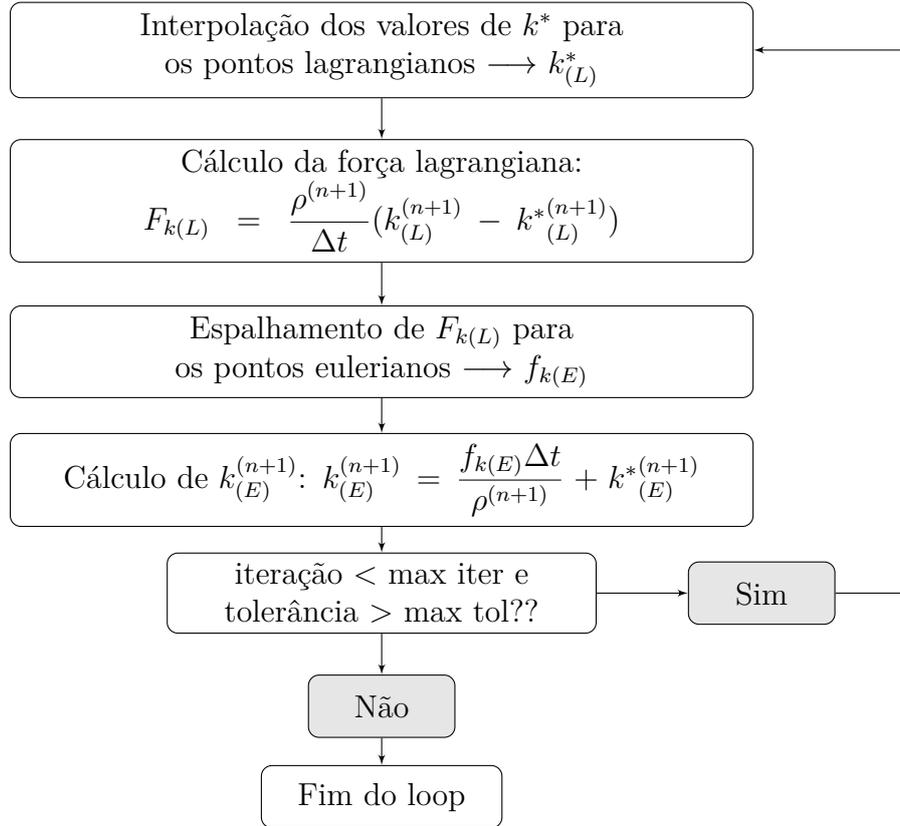
O primeiro passo no MDF é interpolar os valores de k^* do campo euleriano para o ponto lagrangiano, obtendo o valor da propriedade estimada em cada um desses pontos, $k_{(L)}^*$. Após a interpolação, é possível calcular a força lagrangiana $F_{k(L)}$ por meio da equação:

$$F_{k(L)} = \frac{\rho^{(n+1)}}{\Delta t} (k_{(L)}^{(n+1)} - k_{(L)}^{*(n+1)}), \quad (3.56)$$

onde $k_{(L)}^{(n+1)}$ é o valor da propriedade que se deseja forçar na superfície do corpo imerso.

Após calcular $F_{k(L)}$, é necessário distribuir os valores obtidos nos pontos lagrangianos de volta para o campo euleriano. Esse processo foi realizado utilizando o mesmo esquema do processo de interpolação, obtendo $f_{k(E)}$. Esse valor é utilizado para calcular $k_{(E)}^{(n+1)}$ com a equação:

$$k_{(E)}^{(n+1)} = \frac{f_{k(E)} \Delta t}{\rho^{(n+1)}} + k_{(E)}^{*(n+1)}. \quad (3.57)$$

Figura 3.5: Algoritmo do MDF para a propriedade k .

Fonte: elaborado pelo autor.

O valor de $k_{(E)}^{(n+1)}$ é utilizado para atualizar $k^{*(n+1)}$, o qual é usado no próximo passo de tempo.

Na Fig. 3.5 é apresentado um algoritmo do processo relativo ao MDF descrito anteriormente. A metodologia apresentada é válida tanto para a equação de k quanto para a de ϵ , mudando apenas o valor a ser imposto na parede.

3.5.2 Condições de contorno para ϵ em paredes

A utilização do MDF com modelos de turbulência do tipo $k - \epsilon$ apresenta alguns desafios, uma vez que existem diferentes formas de considerar sua condição de contorno para a propriedade ϵ . A primeira maneira é impor uma derivada nula na direção normal à parede (WILCOX et al., 1998):

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial n} = 0. \quad (3.58)$$

Kinoshita et al. (2016) relatou que a imposição do valor para uma derivada usando o MDF não é possível, já que tal processo não permite múltiplos ciclos como na forçagem de um valor para a propriedade diretamente. Em outras palavras, o processo não pode estar contido em um loop conforme mostrado na Fig. 3.5, comprometendo a convergência do mesmo e, conseqüentemente, os resultados obtidos.

Por esse motivo é desejável a imposição de um valor para ϵ diretamente e não para a derivada na direção normal.

Além da condição de contorno do tipo Neumann, apresentada na Eq. (3.58), para ϵ , existem alguns autores que apresentam formas para a utilização da condição de contorno do tipo Dirichlet, conforme apresentado por Wilcox et al. (1998):

$$\epsilon = \nu \frac{\partial^2 k}{\partial n^2}, \quad (3.59)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido e n é a direção normal à parede. Há ainda outra possibilidade apresentada pelo mesmo autor, que consiste na expressão:

$$\epsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k_P^{3/2}}{\kappa \delta_P}, \quad (3.60)$$

onde $C_\mu = 0.09$ para o modelo $k - \epsilon$ padrão, k_P é a energia cinética turbulenta no ponto do domínio computacional que está mais próximo à parede, $\kappa = 0.41$ e δ_P é a distância entre a parede e o ponto do domínio euleriano mais próximo a ela.

Existem alguns trabalhos também que utilizam condição de contorno do tipo Dirichlet, impondo ϵ igual a zero:

$$\epsilon = 0. \quad (3.61)$$

Porém, esta condição de contorno (Eq. (3.61)) não é fisicamente consistente para alguns tipos de escoamento como, por exemplo, escoamentos internos em canais.

A metodologia do MDF é equivalente utilizando as condições de contorno apresentadas nas Eqs. (3.59), (3.60) e (3.61), alterando somente o valor de $k_{(L)}^{(n+1)}$ na Eq. (3.56).

Por fim, cabe ressaltar que a metodologia implementada pode receber qualquer expressão tanto para k quanto para ϵ . Esse é um ponto bastante positivo já que na literatura existem outros trabalhos com propostas para valores dessas propriedades na parede, como o trabalho de Popovac e Hanjalic (2007), por exemplo.

3.6 Força interfacial

As formulações do tipo VOF são também conhecidas como *one fluid*, pois nelas, um único conjunto de equações para todo o domínio fluido é utilizado. Nas chamadas formulações *two-fluid*, que não são utilizadas no presente trabalho, resolve-se uma equação de balanço da quantidade de movimento linear por fase do sistema.

Na formulação implementada no MFSim, o acoplamento dos diferentes fluidos na interface é levado em consideração pelo uso de densidade e viscosidade variáveis e da tensão interfacial. A mudança nas propriedades do fluido na região de interface deve acontecer de forma regular e suave, a fim de evitar oscilações induzidas numericamente nas proximidades dessa região.

Uma força f_σ é aplicada apenas nas células que contêm interface, nas células contendo apenas uma fase, essa força não está presente. A princípio, adotando a hipótese de um escoamento estacionário, a equação de Laplace pode ser utilizada para derivar-se a expressão para a força interfacial (BOGER et al., 2010). Em metodologias de captura de interface, a forma mais difundida de cálculo de força

interfacial foi a proposta por Brackbill, Kothe e Zemach (1992), chamada de força superficial contínua (em inglês, *Continuum Surface Force* - CSF). A expressão utilizada para avaliação da força interfacial é dada por

$$f_\sigma = \sigma \kappa \vec{n}, \quad (3.62)$$

onde σ é a tensão interfacial entre as duas fases do sistema, κ é a curvatura da interface avaliada no volume de controle e \vec{n} é o vetor unitário normal à interface no volume de controle.

No método CSF, a tensão interfacial é interpretada como um efeito tridimensional contínuo através de uma interface e não como uma condição de valor limite na interface. A interface, onde ocorre uma transição de forma descontínua entre os fluidos do sistema é substituída por uma transição contínua e suave. Assim, ao invés de se considerar a interface entre fluidos como uma descontinuidade acentuada, considera-se que a interface possui uma espessura finita de $O(h)$, onde h , corresponde ao menor comprimento característico possível de ser resolvido com a malha computacional utilizada. Consequentemente, a tensão interfacial também é considerada de natureza contínua e atua em toda a região de transição (BRACKBILL; KOTHE; ZEMACH, 1992). A força de corpo equivalente (\vec{f}_σ) é representada como:

$$\vec{f}_\sigma = \sigma \kappa \delta_\Gamma \vec{n}, \quad (3.63)$$

onde δ_Γ é uma função chamada delta utilizada para indicar a superfície de uma interface Γ .

Na literatura existem diferentes expressões propostas para a função δ_Γ . Algumas delas são apresentadas na Tab. 3.2.

Tabela 3.2: Algumas expressões para a função δ propostas na literatura.

Autores	Expressão para δ_Γ
Brackbill, Kothe e Zemach (1992)	$ \nabla C $
Meier, Yadigaroglu e Smith (2002)	$\frac{\nabla \rho(x)}{2\rho(x)}$
Annaland, Deen e Kuipers (2005)	$\frac{\rho_1 - \rho_2}{2C \nabla C }$

No MFSim está implementada a proposta de Brackbill, Kothe e Zemach (1992), a qual consiste em utilizar a norma do gradiente da função marcadora para representar δ

$$\delta_\Gamma = |\nabla C|. \quad (3.64)$$

Os vetores unitários normais à interface Γ podem ser calculados utilizando o campo de função marcadora através da seguinte expressão

$$\vec{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|}. \quad (3.65)$$

Substituindo as Eqs. (3.64) e (3.65) em (3.63), chega-se a

$$\vec{f}_\sigma = \sigma \kappa |\nabla C| \frac{\nabla C}{|\nabla C|}$$

$$\vec{f}_\sigma = \sigma \kappa \nabla C. \quad (3.66)$$

Brackbill destaca em seu trabalho que o uso da Eq. (3.66) no cálculo da força interfacial, para cenários onde existem elevadas razões de massa específica, pode levar a correntes espúrias, ou correntes parasitas, que são erros presentes no campo de velocidades próximo à interface entre fluidos, causados por avaliações de forças interfaciais imprecisas. Então, no mesmo trabalho recomenda o uso das massas específicas das fases para cálculo da força interfacial. Assim, a Eq.(3.66) é reescrita como:

$$f_\sigma = \sigma \kappa \frac{\nabla \rho(x)}{[\rho]} \frac{\rho(x)}{\bar{\rho}}, \quad (3.67)$$

onde $[\rho]$ é o salto de massa específica ($[\rho] = \rho_2 - \rho_1$), $\bar{\rho}$ é a massa específica média ($\bar{\rho} = 0,5(\rho_2 + \rho_1)$) e $\rho(x)$ é a massa específica local, avaliada como

$$\rho = \rho_2 + C(\rho_1 - \rho_2). \quad (3.68)$$

A força interfacial (f_σ) é adicionada à equação de balanço da quantidade de movimento linear através do termo f_i da Eq. (3.8) e, como o gradiente de massa específica, para casos incompressíveis e sem transferência de massa, só existe em volumes de controle contendo interface entre fluidos, esse termo só é aplicado em volumes de controle onde existem as duas fases do sistema.

3.7 Inicialização do campo da função marcadora de fases para o método VOF

Quando se utiliza a metodologia VOF para a modelagem de escoamentos bifásicos, trabalha-se com uma função marcadora para as fases do escoamento. A primeira etapa envolvida no processo é a inicialização do campo desta função e a qualidade desta inicialização pode afetar diretamente a qualidade dos resultados obtidos.

O código MFsim já possuía duas possibilidades no que diz respeito à inicialização do campo de fração volumétrica. O primeiro método foi proposto por Lopez et al. (2009) e é baseado no cálculo da distância entre a interface, definida por uma função implícita, e os vértices de cada célula. O segundo método segue a mesma ideia do primeiro, porém a distância à interface é calculada em pontos posicionados dentro da célula analisada, é chamada de inicialização por pontos. Ambas serão explicadas brevemente abaixo, relatando em seguida o processo de implementação e teste da inicialização por meio de uma biblioteca chamada VOFI (BNÀ et al., 2016).

3.7.1 Inicialização por sub células

O método de inicialização apresentado por Lopez et al. (2009) pode ser chamado de inicialização por sub células. O método utiliza uma equação implícita para a superfície (ϕ), a qual é dada pela forma $\phi(x, y, z) = 0$, conseguindo indicar regiões dentro da superfície ($\phi(x, y, z) < 0$) ou fora ($\phi(x, y, z) > 0$). A ideia do método consiste em avaliar a função $\phi(x, y, z)$ nos vértices de células e, se identificada como uma célula que contenha interface, dividir a mesma em sub células.

Primeiro, calcula-se $\phi(x, y, z)$ em cada vértice da célula $\vec{x}_v = \{x_v, y_v, z_v\}$. Para o caso em que todos os vértices da célula apresentam valores positivos (exteriores à superfície) ou negativos (interiores à superfície), a fração volumétrica F na célula é inicializada como 0 ou 1, respectivamente. No caso em que pelo menos um vértice apresenta sinal diferente para a função ϕ , é identificada a presença de interface, portanto, esta célula será dividida uniformemente em sub células n_{sc}^3 , e o mesmo procedimento será aplicado para identificar quais sub células estão completamente no interior ou no exterior da superfície delimitada pela equação $\phi(x, y, z) = 0$. Para as sub células interfaciais (nem todos os vértices têm o mesmo sinal de ϕ), o volume de um poliedro truncado é calculado para determinar o valor de F .

Este é o método de inicialização mais utilizado no código, pois oferece um bom custo benefício. A função implícita ϕ é definida na sub rotina `selectdist`, localizada no arquivo `src_vof/src_vof_initialization/vof_sussman_initialization.f90`. O número de sub células pode ser controlado através da variável `isub` presente na sub rotina `stack_volume` do mesmo arquivo. O valor padrão para `isub` é 3, porém, para testes de curvatura ou casos que exijam maior acurácia, recomenda-se 7.

3.7.2 Inicialização por pontos

O procedimento na inicialização por pontos é semelhante ao da inicialização por sub células e também requer a definição da função $\phi(x, y, z) = 0$ na sub rotina `selectdist`. Primeiramente, calcula-se $\phi(x, y, z)$ em cada vértice da célula $\vec{x}_v = \{x_v, y_v, z_v\}$, determinando-se se a célula é exterior à superfície, interior à superfície ou se contém interface. Ou seja, o procedimento para determinar o tipo de célula é igual ao realizado no método anterior.

Para as células onde se identifica a presença de interface, é inserida uma população de pontos, cujo número total é dado por N_p^3 . Esses pontos possuem coordenadas definidas $\vec{x}_p = \{x_p, y_p, z_p\}$, onde o valor de $\phi(x, y, z)$ será calculado. O valor da fração volumétrica é então calculado como a razão entre o número de pontos no interior da superfície (n_{pi}) e o número total de pontos:

$$F = \frac{n_{pi}}{N_p^3} \quad (3.69)$$

No MFSim, os pontos são distribuídos de forma equidistante no interior das células que contêm interface. Maiores detalhes e resultados a respeito dessa metodologia podem ser encontrados na tese de doutorado de Ribera et al. (2015).

3.7.3 Inicialização pela biblioteca VOFI

A biblioteca `Vofi` (BNÀ et al., 2016) foi desenvolvida para calcular com precisão o campo de fração volumétrica definido pela função implícita $\phi(x, y, z) = 0$ em malhas cartesianas com células cúbicas. O método lista vários algoritmos para calcular os limites de integração e a função de altura local, que é o integrando de uma integração dupla de Gauss-Legendre com um número variável de nós. Testes em duas e três dimensões são apresentados no trabalho original para demonstrar a precisão do método e são fornecidos na distribuição de software com as interfaces C/C++ e FORTRAN.

A implementação foi realizada buscando se afetar de forma mínima a estrutura já existente no código, sendo assim, a função implícita é definida na mesma sub rotina dos dois métodos anteriores (`selectdist`). A chamada para a inicialização via biblioteca VOFI se encontra na sub rotina `start_vof`, dentro do arquivo `src_vof/vof_tools.f90`, bastando definir a variável `init_model` como 3. Essa variável pode assumir três valores diferentes: 1 - Inicialização por sub células, 2 - Inicialização por pontos ou 3 - Inicialização pela biblioteca VOFI.

Quanto à instalação e uso da biblioteca, foi construído um script, que pode ser melhorado, para instalação. O script se chama `install_vofi.sh` e está localizado na pasta `docs`. Basta executar o script de instalação e a biblioteca estará pronta para uso. Para usar a biblioteca basta compilar o MFSim usando a opção `vofi=1` ao executar o comando `make`.

O uso da biblioteca é simples, exigindo apenas que sejam realizadas as chamadas de duas funções da biblioteca. Toda a programação relativa a este tipo de inicialização está no arquivo `vof_vofi_initialization.f90`, o qual está na pasta `src_vof/src_vof_initialization/`.

As funções da biblioteca recebem como argumento uma função do tipo `real(8)`, que só possui como argumento um vetor de três posições contendo as coordenadas do ponto de avaliação da função ϕ . Para utilizar a definição da função implícita contida na sub rotina `selectdist`, foi criada a função `vofi_lsfunction`, a qual recebe apenas o vetor com as três coordenadas e é passada como argumento para as funções da VOFI.

Na sub rotina `starting_vof_vofi` está contido todo o procedimento de inicialização. A primeira função utilizada possui a seguinte sintaxe

```
fh = vofi_get_fh(impl_func,x0,h0,ndim0,ix0)
```

na qual é calculado o valor de *cutoff* f_h . Os argumentos dessa função são, respectivamente, a função para cálculo de $\phi(x, y, z)$, um vetor com as coordenadas do primeiro ponto de cálculo na malha (nesse caso coordenadas do centro, conforme o código PARIS), o espaçamento da malha (em caso de malhas não uniformes é utilizado o maior espaçamento segundo alguns testes realizados), o número de dimensões do domínio que no caso do MFSim é sempre 3, e um parâmetro que pode ser 0 ou 1. Se `ix0` for 0 o vetor `x0` utilizado será `x0 = {0.5, 0.5, 0.5}`, caso seja 1 será utilizado o vetor `x0` fornecido pelo usuário. Na implementação realizada `ix0` é sempre 1 e as coordenadas do ponto inicial de cálculo são as coordenadas do centro da primeira célula da malha.

A segunda função possui a seguinte sintaxe

```
cc = vofi_get_cc(impl_func,x0,h0,fh,ndim0)
```

e é responsável por fornecer a fração volumétrica em uma dada célula. Os argumentos são os mesmos relatados no parágrafo anterior para obter o valor de *cutoff*, com a diferença de que agora o vetor `x0` contém as coordenadas do vértice mínimo da célula.

Para maiores detalhes a respeito da metodologia de inicialização e das funções utilizadas, o trabalho de (BNÀ et al., 2016) pode ser consultado. O teste de verificação da inicialização da função marcadora de fases é apresentado na seção 4.2.1.

3.8 Estimativa de curvatura e normais no método VOF

Existem diversas metodologias apresentadas na literatura para a estimativa das normais e da curvatura da interface no método VOF. Uma das técnicas mais utilizadas para calcular a normal e posteriormente a curvatura, propõe o uso das derivadas espaciais da função marcadora de fases, C (RAESSI; MOSTAGHIMI; BUSSMANN, 2007). Assim, o vetor normal unitário é calculado como

$$\vec{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|}. \quad (3.70)$$

A curvatura é calculada com base no divergente do vetor normal unitário da interface (a segunda derivada da função marcadora de fases C) (RAESSI; MOSTAGHIMI; BUSSMANN, 2007).

$$\kappa = \nabla \cdot \vec{n}. \quad (3.71)$$

Para contornar o problema de imprecisões devido à diferenciação numérica de uma função descontínua, uma função de coloração suavizada \tilde{C} é sugerida para o cálculo do vetor normal à interface (BRACKBILL; KOTHE; ZEMACH, 1992).

No presente trabalho, o método implementado para a estimação do vetor normal é o chamado método de Parker e Young. Para a estimação da curvatura os métodos implementados no MFSim são:

1. o modelo de Shirani, também conhecido como discretização de 27 células;
2. a discretização de 125 células;
3. o método parabolóide;
4. o método dos Mínimos Quadrados;
5. o método da função Altura (*height function*);

Nas simulações realizadas ao longo do trabalho foram utilizados apenas os modelos de Shirani e função altura. Porém, esses serão os modelos detalhados nas subseções seguintes.

3.8.1 Estimativa dos vetores normais à superfície

A metodologia implementada no MFSim para a avaliação dos vetores unitários normais à interface entre fluidos foi proposta por Parker e Youngs (1992). Nos trabalhos e códigos envolvendo VOF, essa abordagem é comumente referida como método de Young. Esse é um dos métodos mais citados no que diz respeito ao cálculo normais no método VOF. Nele utiliza-se estêncil de 9 pontos em casos bidimensionais e 27 pontos em casos tridimensionais Kothe e Rider (1995).

A implementação no MFSim foi realizada seguindo o trabalho de Aulisa et al. (2007), que é uma extensão às três dimensões da implementação bidimensional apresentada por Scardovelli e Zaleski (2003). O gradiente é calculado empregando um

método de diferenças finitas. A normal é avaliada primeiro nos oito vértices da célula central (i, j, k) . Seguindo Aulisa et al. (2007), os componentes normais n_x , n_y , n_z no vértice de coordenadas $x_{i+1/2}$, $y_{j+1/2}$, $z_{k+1/2}$ são:

$$n_x = \frac{1}{\Delta x}(\tilde{C}_i - \tilde{C}_{i+1}) \quad (3.72a)$$

$$n_y = \frac{1}{\Delta y}(\tilde{C}_j - \tilde{C}_{j+1}) \quad (3.72b)$$

$$n_z = \frac{1}{\Delta z}(\tilde{C}_k - \tilde{C}_{k+1}) \quad (3.72c)$$

onde

$$\tilde{C}_i = \frac{C_{i,j,k} + C_{i,j+1,k} + C_{i,j,k+1} + C_{i,j+1,k+1}}{4}. \quad (3.73)$$

O mesmo esquema é aplicado nos outros vértices da célula euleriana, e o vetor normal no centro da célula é obtido calculando a média dos valores obtidos nos oito vértices.

A estimativa dos vetores normais à interface utilizando o método de Young possui primeira ordem de precisão (KOTHE et al., 1996). Em contrapartida, é uma metodologia de baixo custo computacional e com implementação pouco complexa, o que a torna uma alternativa viável para, pelo menos, obter em um primeiro momento a direção do vetor normal. No MFSim esta é a metodologia padrão utilizada para cálculo de normais à interface.

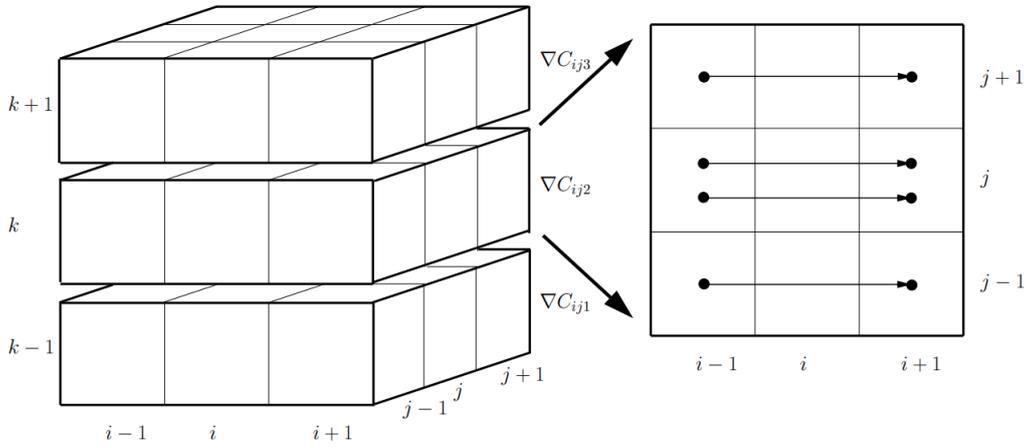
Conforme citado anteriormente, no MFSim existem diferentes modelos implementados para a estimativa da curvatura na simulação de escoamentos bifásicos utilizando o método VOF. Nesta seção foram explicados os modelos empregados nas simulações computacionais realizadas, porém, maiores detalhes sobre os demais modelos podem ser encontrados no trabalho de (RIBERA et al., 2015).

3.8.2 Cálculo da curvatura através do método de Shirani, Ashgriz e Mostaghimi (2005)

A curvatura da interface pode ser estimada através do divergente dos vetores normais à interface entre os fluidos conforme a Eq. (3.71). No método proposto por Shirani, Ashgriz e Mostaghimi (2005), também conhecido como método de Shirani, os vetores normais à interface são calculado por meio de uma estimativa média do vetor gradiente função coloração (Eq. (3.70)). Considerando um cubo tridimensional com 27 células, o vetor gradiente da função coloração é calculado através das expressões que envolvem células de mesmo plano.

Para cada plano na direção Z apresentado na Fig. 3.6, são obtidas componentes por plano $i - j$, calculadas como:

$$\begin{aligned} \nabla C_{ij1} = & \frac{C_{i+1,j-1,k-1} - C_{i-1,j-1,k-1}}{\Delta x} + 2 \frac{C_{i+1,j,k-1} - C_{i-1,j,k-1}}{\Delta x} \\ & + \frac{C_{i+1,j+1,k-1} - C_{i-1,j+1,k-1}}{\Delta x}, \end{aligned} \quad (3.74a)$$

Figura 3.6: Discretização de ∇C_{ij} nos planos i e j .

Fonte: (LAM, 2009)

$$\nabla C_{ij2} = \frac{C_{i+1,j-1,k} - C_{i-1,j-1,k}}{\Delta x} + 2 \frac{C_{i+1,j,k} - C_{i-1,j,k}}{\Delta x} + \frac{C_{i+1,j+1,k} - C_{i-1,j+1,k}}{\Delta x}, \quad (3.74b)$$

$$\begin{aligned} \nabla C_{ij3} = & \frac{C_{i+1,j-1,k+1} - C_{i-1,j-1,k+1}}{\Delta x} + 2 \frac{C_{i+1,j,k+1} - C_{i-1,j,k+1}}{\Delta x} \\ & + \frac{C_{i+1,j+1,k+1} - C_{i-1,j+1,k+1}}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (3.74c)$$

O valor médio para ∇C_{ij} é calculado utilizando os valores obtidos em cada plano por meio das Eqs. (3.74) por meio da expressão

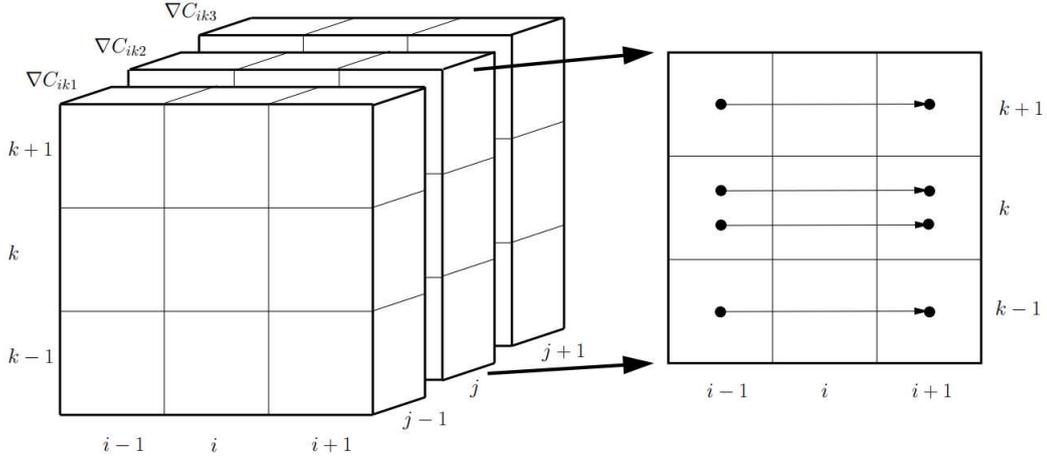
$$\nabla C_{ij} = \nabla C_{ij1} + \nabla C_{ij2} + \nabla C_{ij3}. \quad (3.75)$$

Após a estimativa de ∇C_{ij} , é necessário obter também o valor de ∇C_{ik} , o qual também será utilizado para a obtenção de ∇C_i . Para cada plano na direção Y apresentado na Fig. 3.7, são obtidas componentes por plano $i - j$, calculadas como:

$$\begin{aligned} \nabla C_{ik1} = & \frac{C_{i+1,j-1,k-1} - C_{i-1,j-1,k-1}}{\Delta x} + 2 \frac{C_{i+1,j-1,k} - C_{i-1,j-1,k}}{\Delta x} \\ & + \frac{C_{i+1,j-1,k+1} - C_{i-1,j-1,k+1}}{\Delta x}, \end{aligned} \quad (3.76a)$$

$$\nabla C_{ik2} = \frac{C_{i+1,j,k-1} - C_{i-1,j,k-1}}{\Delta x} + 2 \frac{C_{i+1,j,k} - C_{i-1,j,k}}{\Delta x} + \frac{C_{i+1,j,k+1} - C_{i-1,j,k+1}}{\Delta x}, \quad (3.76b)$$

$$\begin{aligned} \nabla C_{ik3} = & \frac{C_{i+1,j+1,k-1} - C_{i-1,j+1,k-1}}{\Delta x} + 2 \frac{C_{i+1,j+1,k} - C_{i-1,j+1,k}}{\Delta x} \\ & + \frac{C_{i+1,j+1,k+1} - C_{i-1,j+1,k+1}}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (3.76c)$$

Figura 3.7: Discretização de ∇C_{ik} nos planos i e k .

Fonte: (LAM, 2009)

O valor médio para ∇C_{ik} é calculado utilizando os valores obtidos em cada plano por meio das Eqs. (3.76) por meio da expressão

$$\nabla C_{ik} = \nabla C_{ik1} + \nabla C_{ik2} + \nabla C_{ik3}. \quad (3.77)$$

Tendo os valores de ∇C_{ij} e ∇C_{ik} , pode-se calcular o valor de ∇C_i como

$$\nabla C_i = \nabla C_{ij} + \nabla C_{ik}. \quad (3.78)$$

A obtenção dos valores de ∇C_j e ∇C_k é realizada de forma análoga à apresentada anteriormente, sendo determinadas ao final com as expressões

$$\nabla C_j = \nabla C_{ij} + \nabla C_{jk}, \quad (3.79)$$

e

$$\nabla C_k = \nabla C_{ik} + \nabla C_{jk}. \quad (3.80)$$

Por meio das Eqs. (3.78), (3.79) e (3.80), tem-se

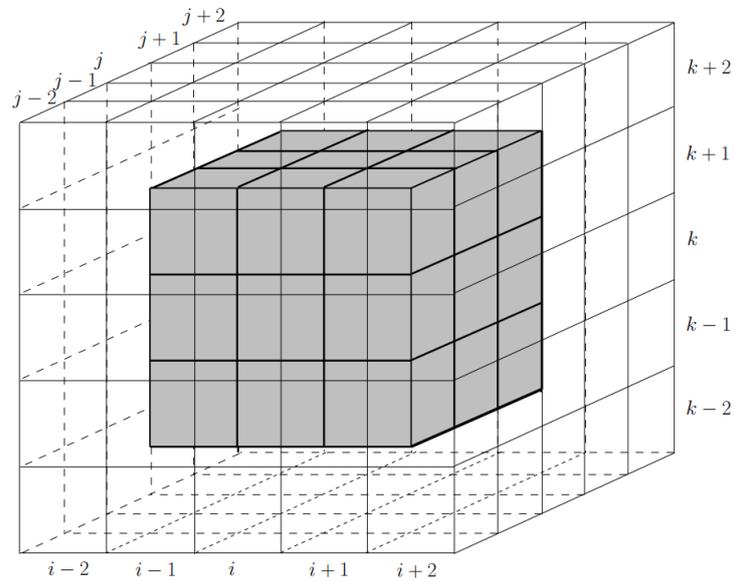
$$\nabla C = (\nabla C_i, \nabla C_j, \nabla C_k). \quad (3.81)$$

O próximo passo para a estimativa da curvatura é o cálculo do divergente do vetor normal à interface já que $\kappa = \nabla \cdot \vec{n}$. Para determinar κ em (i, j, k) , todas as células da Fig. 3.8 serão utilizadas. No cubo 5×5 há um cubo 3×3 inserido, cujo zoom é apresentado na Fig. 3.9 (a).

Primeiramente, em todas as células da Fig. 3.9 (a) será determinado o vetor normal unitário. Assim, serão obtidos 27 vetores unitários normais à interface. Em seguida, serão avaliadas 8 médias das normais (em 8 vértices do cubo na Fig. 3.9 (c)). Na Fig. 3.9 (b) é apresentado o cubo de vértices $i, i+1 \times j, j+1 \times k, k+1$.

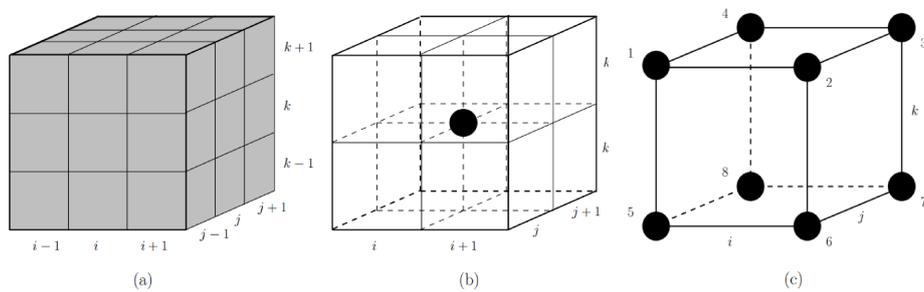
No ponto preto central da Fig. 3.9 (b) está localizada a média. Na Fig. 3.9 (c) podemos ver que os 8 pontos estão nos 8 vértices da célula (i, j, k) . E com

Figura 3.8: Representação das células utilizadas para estimativa da curvatura pelo método de Shirani. Cubo 3 x 3 (cinza) em um cubo 5 x 5.



Fonte: (LAM, 2009)

Figura 3.9: Zoom em diferentes partes do cubo 3 x 3 da Fig. 3.8.



Fonte: (LAM, 2009)

as 8 normais unitárias médias da Fig. 3.9 (c) conhecidas, podemos determinar a curvatura reescrevendo a Eq. (3.71) como

$$\kappa = \frac{\partial}{\partial x}n_x + \frac{\partial}{\partial y}n_y + \frac{\partial}{\partial z}n_z. \quad (3.82)$$

Considerando os vértices numerados da Fig. 3.9 (c), as componentes do vetor normal unitário são avaliadas como

$$\frac{\partial}{\partial x}n_x = (n_{x2} + n_{x3} + n_{x6} + n_{x7}) - (n_{x1} + n_{x4} + n_{x5} + n_{x8}), \quad (3.83a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}n_y = (n_{y2} + n_{y3} + n_{y6} + n_{y7}) - (n_{y1} + n_{y4} + n_{y5} + n_{y8}), \quad (3.83b)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}n_z = (n_{z2} + n_{z3} + n_{z6} + n_{z7}) - (n_{z1} + n_{z4} + n_{z5} + n_{z8}). \quad (3.83c)$$

Sendo assim, a estimativa de curvatura por meio do método Shirani é obtida substituindo as Eqs. (3.83) na Eq. (3.82). Mais detalhes do método podem ser encontrados nos trabalhos de Shirani, Ashgriz e Mostaghimi (2005) e Lam (2009). Como esse é um método de baixa acurácia apesar do baixo custo computacional, existem outros métodos de maior complexidade e acurácia implementados no MF-Sim, como o método de função altura que será abordado na seção seguinte.

3.8.3 Cálculo da curvatura através do método função altura

Um dos métodos bastante usuais para a estimativa de curvatura da interface em simulações computacionais que empregam a metodologia VOF para escoamentos bifásicos é o método da função altura (em inglês, *heighth function*).

O passo inicial para um bom entendimento do método da função de altura é o conceito de *Monge Patch*¹. Um *Monge Patch* é uma superfície local onde $\mathbf{x} : U \rightarrow \mathbb{R}^3$ da forma

$$x(u, v) = (u, v, h(u, v)), \quad (3.84)$$

onde U é um conjunto aberto em \mathbb{R}^2 e h é um função que é diferenciável em \mathbb{R} . Aqui a direção cartesiana X é representada por u e a direção cartesiana Y por v .

Os coeficientes da primeira forma fundamental são dados por

$$E = 1 + h_u^2, \quad (3.85a)$$

$$F = h_u h_v, \quad (3.85b)$$

$$G = 1 + h_v^2, \quad (3.85c)$$

onde h_i é a derivada da função h na direção i .

A segunda forma dos coeficientes é calculada como

$$e = \frac{h_{uu}}{\sqrt{1 + h_u^2 + h_v^2}}, \quad (3.86a)$$

¹<https://mathworld.wolfram.com/MongePatch.html>

$$f = \frac{h_{uv}}{\sqrt{1 + h_u^2 + h_v^2}}, \quad (3.86b)$$

$$g = \frac{h_{vv}}{\sqrt{1 + h_u^2 + h_v^2}}, \quad (3.86c)$$

sendo h_{ij} a derivada de h_i na direção j .

Para uma superfície desse tipo, a curvatura média, baseada na primeira (Eqs. (3.85)) e na segunda (Eqs. (3.86)) forma dos coeficientes, é dada por

$$H = \frac{(1 + h_v^2)h_{uu} - 2h_u h_v h_{uv} + (1 + h_u^2)h_{vv}}{2(1 + h_u^2 + h_v^2)^{3/2}}. \quad (3.87)$$

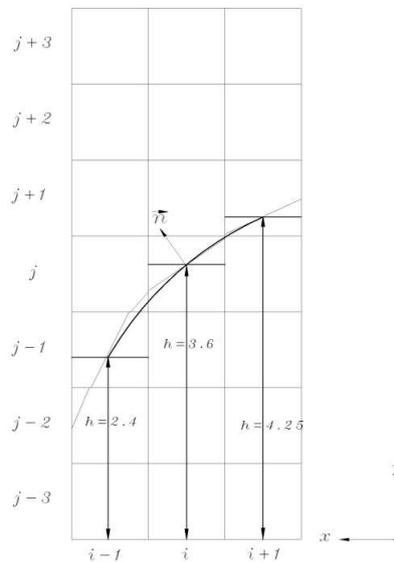
O método da função altura foi proposto pela primeira vez por Torrey et al. (1985 apud POPINET, 2009) e consiste em uma técnica geométrica onde uma altura local é definida baseada na soma das frações de volume na direção de maior componente do vetor normal à interface, ou seja,

$$h_{ij} = \sum_{j-3}^{j+3} C_{i,j} \Delta y_i, \quad (3.88)$$

onde Δy_i representa o tamanho da célula i na direção y .

A Fig. 3.10 ilustra o estêncil bidimensional usado para calcular as alturas envolvidas no cálculo.

Figura 3.10: Exemplo bidimensional do estêncil 7×3 utilizado para construir as funções altura.



Fonte: (AFKHAMI; BUSSMANN, 2004)

A curvatura da interface em uma célula (i, j, k) é determinada por meio das derivadas das funções altura (h), segundo a seguinte expressão

$$\kappa_{i,j,k} = \frac{h_{xx} + h_{yy} + h_{xx}h_y^2 + h_{yy}h_x^2 - 2h_{xy}h_xh_y}{(1 + h_u^2 + h_v^2)^{3/2}}, \quad (3.89)$$

onde as derivadas parciais de h são geralmente discretizadas por meio de um esquema de diferenças finitas de segunda ordem, sendo,

$$h_x = \frac{h_{i+1,j} - h_{i-1,j}}{2\Delta x_i} \quad (3.90)$$

e

$$h_{xx} = \frac{h_{i+1,j} - 2h_{i,j} + h_{i-1,j}}{\Delta x_i^2}. \quad (3.91)$$

Comparando as Eqs. (3.87) e (3.89), tem-se que

$$H = \frac{1}{2} \kappa_{i,j,k}, \quad (3.92)$$

ou seja, a curvatura da interface calculada por meio da função altura corresponde a duas vezes a curvatura média de *Monge Patch*.

Para o volume de integração da função altura foram primeiramente empregados um estêncil 7×3 em casos bidimensionais $7 \times 3 \times 3$ em casos tridimensionais (FRANCOIS et al., 2006). No entanto, quando o raio de curvatura da interface se torna comparável ao tamanho da malha, não serão obtidos valores consistentes para a função altura. Para essas regiões sub-resolvidas, deve-se utilizar um estêncil menor, proporcional ao raio de curvatura (POPINET, 2009; FRANCOIS et al., 2006).

Lopez et al. (2009) propuseram uma suavização na primeira e segunda derivadas parciais de h com o objetivo de melhorar a precisão no cálculo da curvatura, a qual é aplicada quando o ângulo formado entre a direção da função altura e o vetor normal da interface atinge um determinado valor crítico. No entanto, no presente trabalho o método proposto por Popinet (2009) é utilizado tanto para a identificação de alturas consistentes/inconsistentes quanto para o cálculo do tamanho do estêncil variável.

O método apresentado pode levar a configurações onde não é possível a obtenção de alturas consistentes. Essas alturas inconsistentes são um aspecto importante do método *height function*, afirmado por Popinet (2009). Assim, o método é usado em conjunto com outro método de cálculo de curvatura, o qual é utilizado nos pontos de altura inconsistentes. No presente trabalho, o método de Shirani é utilizado junto ao da função altura para tratar tais pontos.

Popinet (2009) apresentou também uma variação do método utilizando um estêncil variável para o cálculo de h . A metodologia proposta está também implementada no MFSim e pode ser utilizada como alternativa à abordagem com o estêncil fixo.

3.9 Reconstrução e advecção da interface no método VOF

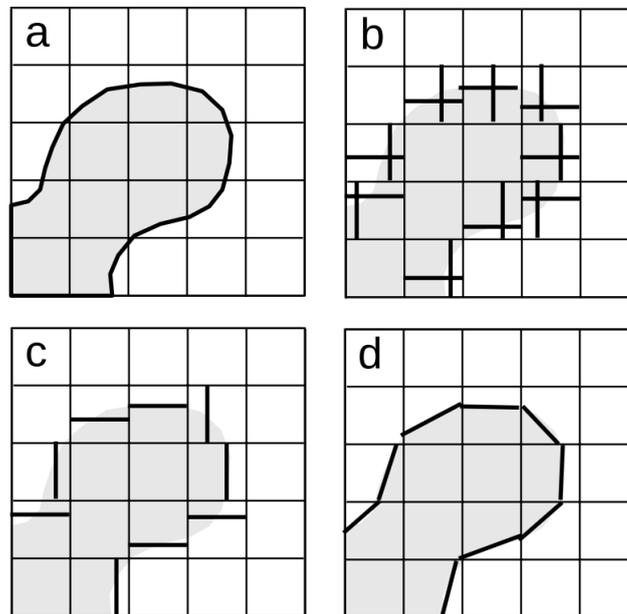
Conforme citado anteriormente, o transporte da interface, ao se utilizar o método VOF consiste em um problema advectivo. O transporte de uma função marcadora C sem a presença de termos fontes, pode ser representado por meio da seguinte equação,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{F}) = 0, \quad (3.93)$$

onde \vec{F} é o fluxo, avaliado como $\vec{F} = \vec{u}C$

Tryggvason, Scardovelli e Zaleski (2011) apresenta uma discussão, utilizando a hipótese de um escoamento unidimensional, a respeito do tratamento do termo que envolve o fluxo na Eq. (3.93). Segundo os autores, a utilização de um método de baixa ordem para o tratamento deste termo pode levar a um comportamento difuso no transporte da função. Por outro lado, a utilização de esquemas de alta ordem utilizados na modelagem de problemas compressíveis envolvendo choque, pode levar a efeitos oscilatórios na interface entre valores da função coloração. Para a advecção de uma função marcadora, métodos avançados de preservação de monotonicidade aplicados à captura de choque funcionam bem para tempos curtos, mas abordagens diferentes são necessárias para tempos mais longos.

Figura 3.11: Reconstrução da solução VOF para uma advecção em duas dimensões. (a) Interface original. (b) Reconstrução SLIC original. (c) Reconstrução de Hirt e Nichols (1981). (d) Reconstrução PLIC.



Fonte: Tryggvason, Scardovelli e Zaleski (2011), adaptada de Rudman (1997).

Uma das primeiras tentativas de se realizar a advecção da função C além do unidimensional foi apresentada por Noh e Woodward (1976). Denominado SLIC (em inglês, *Simple Line Interface Calculation*), o método propõe a advecção da interface separando o processo, ou seja, realizar a advecção separadamente para cada direção. Linhas paralelas aos eixos coordenados são posicionadas considerando a fração volumétrica do volume que contém a interface, conforme esquematizado na Fig. 3.11 (b).

Hirt e Nichols (1981) propuseram um método de reconstrução de interface um pouco diferente, onde a interface é representada por um único segmento de reta paralelo a um dos eixos coordenados, sendo que a definição de qual eixo a linha é paralela dependerá do vetor normal à interface, calculado a partir de avaliações da função C na vizinhança (Fig. 3.11 (c)). A linha é construída então paralela ao eixo onde

o vetor normal possui menor angulação, ou seja, está mais proximamente alinhado. Apesar da aparente melhora na representação da interface, Rudman (1997) observa em seu trabalho que o método de Hirt e Nichols (1981) não apresenta melhorias significativas em termos de precisão.

3.9.1 O método PLIC - *Piecewise Linear Interface Calculation*

Um dos métodos mais usuais e que apresenta boa acurácia é o chamado PLIC (em inglês, *Piecewise Linear Interface Calculation*), introduzido por DeBar (1974) e Youngs (1982). Na metodologia proposta, um segmento de reta em um volume interfacial pode ser representado independentemente da direção dos eixos coordenados. A direção de cada segmento de reta é determinada a partir do cálculo do vetor normal à interface, que é estimado a partir de valores da função C de volumes adjacentes (Fig. 3.11 (d)). Este é o método implementado no MFSim e que foi utilizado para obtenção dos resultados apresentados. Sendo assim, será melhor detalhado a seguir.

Os exemplos anteriores referentes à reconstrução da interface foram baseados em um domínio bidimensional. Quando o problema se estende ao tridimensional, a interface passa a ser representada por um plano e não mais por uma linha. Gueyffier et al. (1999) apresentou um método onde o plano que descreve a interface em cada volume onde ela está presente é definido da forma:

$$\vec{n} \cdot \vec{x} = n_x x + n_y y + n_z z = \alpha, \quad (3.94)$$

onde α corresponde à menor distância entre o plano e a origem do volume de controle e \vec{n} é o vetor normal apontando para fora do volume, sendo suas componentes conhecidas e positivas.

No problema direto calculamos o volume da célula que está abaixo de uma interface definida pelo plano com a seguinte expressão:

$$V = \frac{1}{6n_x n_y n_z} \left[\alpha^3 - \sum_{i=1}^3 F_3(\alpha - n_i \Delta x_i) + F_3(\alpha - \alpha_{max} + n_i \Delta x_i) \right], \quad (3.95)$$

sendo n_i a componente do vetor normal na direção i , Δx_i o espaçamento da malha na direção i ,

$$\alpha_{max} = \sum_{i=1}^3 n_i \Delta x_i, \quad (3.96)$$

e $F_n(z)$ uma função definida como

$$F_n(z) = \begin{cases} z^n & \text{se } z > 0 \\ 0 & \text{se } z \leq 0 \end{cases} \quad (3.97)$$

Mais detalhes a respeito do processo de reconstrução geométrica da interface e das definições utilizadas podem ser encontrados no apêndice C do trabalho de Tryggvason, Scardovelli e Zaleski (2011) e na tese de doutorado de Ribera et al. (2015), desenvolvida também no MFLab.

Após o processo de reconstrução, onde são determinados o vetor normal ao plano (\vec{n}) e a menor distância à origem do volume de controle (α), a interface deve ser transportada com base no campo de velocidades local. Existem diversas formas de se advectar a interface, sendo possível empregar processos puramente geométricos, ou baseados nos fluxos de cada fase.

3.9.2 Propagação da interface

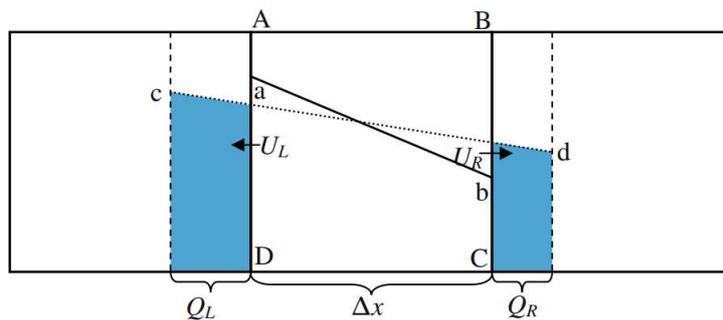
Geralmente, a advecção da interface é realizada de forma separada, ou seja, a advecção é a soma de advecções unidimensionais realizadas em cada direção do escoamento.

As metodologias para advecção podem ser divididas em duas classes: *out-of-cell* e *onto-cell*. Na primeira, advectamos em um dado campo de velocidade unidimensional cada célula da malha e então marcamos as células deformadas na malha original para atualizar os dados de fração de volume, daí o nome fora da célula (em inglês, *out-of-cell*). Por outro lado, no mapeamento para célula (em inglês, *onto-cell*), é calculada a área que será advectada em cada célula da malha computacional.

Esquemas como o *out-of-cell* utilizam interpolações lineares para advectar, em cada direção, os pontos finais dos segmentos que definem a interface. Após realizada a advecção, a interface deve ser reconstruída antes que a advecção continue na próxima direção. Esquemas como o *onto-cell* calculam as áreas que são advectadas para cada célula. Ambos os esquemas carecem de conservação de massa e volume, e devem ser combinados para uma boa conservação.

Gueyffier et al. (1999) apresentou em seu trabalho uma forma de advecção da interface baseada em operações geométricas, em um esquema de primeira ordem. Wang et al. (2009) propôs uma versão de segunda ordem do método de advecção proposto por Gueyffier et al. (1999). A Fig. 3.12 ajuda na descrição do esquema.

Figura 3.12: Representação esquemática da advecção bidimensional de uma interface.



Fonte: (WANG et al., 2009).

Observando a Fig. 3.12, a velocidade representativa do volume central ABCD estimada por uma interpolação linear da forma:

$$u(x) = \left(1 - \frac{x}{\Delta x}\right) U_L + U_R \frac{x}{\Delta x}$$

$$u(x) = \frac{U_R - U_L}{\Delta x}x + U_L = Ax + B \quad (3.98)$$

Após definida a velocidade do volume, adveccta-se a interface em uma direção. Por meio de um método de Runge-Kutta de segunda ordem, pode-se escrever a posição da coordenada original da interface em função da nova coordenada (após advecctada em uma direção), seguindo a Eq. (3.98).

$$x^{(n)} = \frac{x^{(*)} - \left(\frac{1}{2}AB\Delta t^2 + B\Delta t\right)}{1 + A\Delta t + \frac{1}{2}A^2\Delta t^2}. \quad (3.99)$$

Substituindo essa expressão na equação que descreve o plano, é possível obter a equação do novo plano após a advecção em uma direção. O processo é repetido para as outras direções até que se tenha a equação do plano no passo de tempo $n + 1$. O superíndice (*) está sendo usado para representar as operações realizadas em cada direção, sendo que após feitas as advecções em todas as direções, iguala-se $* = n + 1$, representando a nova equação do novo plano na Eq. (3.99).

$$n_x^{(*)}x^{(*)} + n_y^{(*)}y^{(*)} + n_z^{(*)}z^{(*)} = \alpha^{(*)}, \quad (3.100)$$

O procedimento de propagação da interface foi apresentado de forma resumida ao longo da seção, porém, envolve diversas etapas adicionais que são importantes ao longo do processo. Na seção 3.9 da tese de doutorado de Ribera et al. (2015), desenvolvida também no MFLab utilizando o MFSim, a metodologia foi apresentada de forma bastante detalhada, abordando cada passo necessário, as deduções e exemplos visuais. Além disso, o livro de Tryggvason, Scardovelli e Zaleski (2011) apresenta uma abordagem bem completa sobre a advecção de interfaces para escoamentos bifásicos.

3.10 A biblioteca externa *Interface Reconstruction Library* - IRL

Durante os desenvolvimentos do presente trabalho, por meio de contato direto com o professor Olivier Desjardins e o pesquisador Robert Chiodi, foi encontrada uma biblioteca externa desenvolvida na Universidade de Cornell cuja finalidade é fornecer um pacote de metodologias aplicadas ao método VOF. Os desenvolvimentos foram realizados durante o trabalho de Chiodi (2020).

A *Interface Reconstruction Library* (IRL)² é uma biblioteca, escrita em C++14 com uma interface Fortran 2008, de algoritmos computacionais que tem por objetivo possibilitar implementações simples e rápidas de esquemas geométricos envolvidos na metodologia VOF para simulação de escoamentos multifásicos. Os métodos contidos na IRL, no entanto, são gerais e abrangem diversos pontos do método VOF, tais como, cálculo de intersecções volume-volume, reconstruções de interface e otimização de cálculos. A IRL também foi projetada para funcionar em diversos tipos de malhas

²<https://github.com/robert-chiodi/interface-reconstruction-library>

computacionais, sendo aplicável a problemas que utilizem malhas estruturadas, não estruturadas e refinadas de forma adaptativa (CHIODI; DESJARDINS, 2022).

Ele já foi aplicada em códigos CFD para escoamentos incompressíveis e compressíveis e para cenários onde são utilizadas malhas estruturadas, não estruturadas e baseados em AMReX³.

Na apresentação original do PLIC, o plano de interface em cada célula é orientado de acordo com o gradiente da fração de volume (YOUNGS, 1982), denominado método de Youngs (seção 3.9.1). Embora seja uma reconstrução de interface funcional, essa abordagem resulta em um método espacialmente de primeira ordem. Desde então, muitos métodos espaciais de segunda ordem foram desenvolvidos com diferentes abordagens e alguns destes métodos estão presentes na biblioteca IRL.

Uma das vias possíveis para melhoria envolve métodos que usam otimização não linear para reduzir uma função objetivo definida sobre uma vizinhança local de células. O método mais popular nesta categoria é o algoritmo de reconstrução de interface de volume de mínimos quadrados (em inglês, *Least-squares Volume of fluid Interface Reconstruction Algorithm* - LVIRA), proposto por Puckett (1991 apud JR; PUCKETT, 2004). A proposta consiste em um algoritmo que encontra um plano ideal minimizando o erro na reprodução de dados da fração de volume em células vizinhas. Existe também uma variação do LVIRA, chamada de ELVIRA (em inglês, *Efficient Least-squares Volume of fluid Interface Reconstruction Algorithm*) (PILLIOD, 1992 apud JR; PUCKETT, 2004). Tanto o LVIRA quanto o ELVIRA são métodos de segunda ordem e possuem implementação disponível na IRL.

Outra possibilidade são os métodos locais que não envolvem informações de células vizinhas, como o método do *Moment of Fluid* (MoF), apresentado por Dyadechko e Shashkov (2005) e aperfeiçoado por Hill e Shashkov (2013). A proposta está implementada na IRL e consiste em uma metodologia que orienta o plano de interface através de uma minimização não linear de uma função objetivo definida para recuperar o volume centróides de cada fase da célula (CHIODI, 2020).

Todos os métodos de reconstrução abordados até aqui operam baseados na definição de um único plano de interface por célula. Isso implica em um requisito mínimo de resolução da malha computacional para que seja possível capturar as estruturas de interface. Abaixo da resolução espacial da malha as estruturas serão quebradas erroneamente devido a efeitos numéricos. Com o objetivo de atacar esse problema, Chiodi e Desjardins (2018) apresentou um novo método de reconstrução de a dois planos (em inglês, *two-plane interface reconstruction* - R2P), que permite o tratamento de dois planos em uma célula. Este novo método pode capturar filmes arbitrariamente finos, mesmo filmes em escala de subgrade (SGS) mais finos que o tamanho da malha computacional, evitando efeitos de quebras numéricas. Este é o principal desenvolvimento presente na IRL.

Ao longo do trabalho foram realizados testes e implementações tanto dentro da biblioteca IRL, com o suporte do autor Robert Chiodi, quanto implementações envolvendo a IRL dentro do MFSim. Um exemplo de desenvolvimento realizado ao longo do trabalho foi o acoplamento da biblioteca para cálculo de normais por meio do método ELVIRA dentro do MFSim. O trecho principal da implementação é apresentado abaixo

³<https://amrex-codes.github.io/amrex/>

```

subroutine elvira_vof_normal_loop(f, ga, gb, ncn, dn, nxe, nye, nze)
use data_global
use irl_fortran_interface
implicit none
!Input
integer :: ncn(3)
double precision :: dn(3), ga(3), gb(3)
double precision, dimension(ncn(1),ncn(2),ncn(3)) :: f, nxe, nye, nze
!Local
integer, parameter :: DP = kind(1.0d0)
integer :: i, j, k, ii, jj, kk, pp, idx(3)
real(DP) :: distance
real(DP), dimension(1:3) :: normal, pt1, pt2
real(DP), dimension(1:4) :: plane
type(ELVIRANeigh_type) :: elvira_neighborhood
type(RectCub_type), dimension(-1:1,-1:1,-1:1) :: rectangular_cuboid
type(PlanarSep_type) :: found_planar_separator

call new(found_planar_separator)
call new(elvira_neighborhood)
call setSize(elvira_neighborhood,27)

do ii=i-1,i+1; do jj=j-1,j+1; do kk=k-1,k+1
call new(rectangular_cuboid(-1:1,-1:1,-1:1))
end do; end do; end do

do k = 2, ncn(3)-1
do j = 2, ncn(2)-1
do i = 2, ncn(1)-1

if(f(i,j,k) > 0.0d0 .or. f(i,j,k) < 1.0d0) then

do ii=i-1,i+1; do jj=j-1,j+1; do kk=k-1,k+1
!!! Min and max points
idx = [ii,jj,kk]
do pp = 1,3; pt1(pp) = ga(pp) + (dble(idx(pp))-0.5d0)*dn(pp); end do
idx = [ii+1,jj+1,kk+1]
do pp = 1,3; pt2(pp) = ga(pp) + (dble(idx(pp))-0.5d0)*dn(pp); end do

call construct_2pt(rectangular_cuboid(ii-ii,jj-jj,kk-kk),pt1,pt2)
call setMember(elvira_neighborhood,rectangular_cuboid(ii-ii,jj-jj,kk-kk),
f(ii,jj,kk), ii-ii, jj-jj, kk-kk)

end do; end do; end do

call reconstructELVIRA3D(elvira_neighborhood, found_planar_separator)

plane = getPlane(found_planar_separator,0)

nxe(i,j,k) = plane(1)
nye(i,j,k) = plane(2)
nze(i,j,k) = plane(3)
end if

end do
end do
end do

end subroutine elvira_vof_normal_loop

```

O objetivo de apresentar o trecho de código não é trazer um entendimento completo a respeito do mesmo, mas transmitir a ideia de que o acoplamento da IRL não trouxe grandes problemas. A biblioteca possui os tipos adequados para cada estrutura (por exemplo, *ELVIRANeigh_type*), o que torna a utilização mais suave. Além disso, cabe ressaltar que a biblioteca é escrita em C++ mas para o acoplamento com o MFSim foi utilizada a interface Fortran, a qual não apresentou problemas.

Além das implementações realizadas, também foram realizados testes de *benchmark* com a IRL com o objetivo de se comparar o desempenho entre os métodos implementados na biblioteca e também entre IRL e MFSim (métodos nativos). Resultados de testes comparativos são apresentados nas seções 4.2.2 e 4.2.3.

3.11 Função indicadora de domínios aplicada à advecção da interface entre fluidos

Conforme apresentado nas seções 2.2 e 3.5, o método de fronteira imersa implementado no MFSim tem como característica a presença de uma região no domínio,

chamada de domínio complementar, onde não estão presentes comportamentos físicos significativos para o resultado. O domínio complementar está presente puramente devido à abordagem utilizada sendo que, caso fosse utilizada uma malha não estruturada conforme, ele não existiria. Para escoamentos internos, o domínio de interesse é interno à superfície definida pelos pontos lagrangianos. Já para escoamentos externos, como o escoamento sobre um cilindro, o domínio de interesse é externo a esta superfície.

Na propagação da interface realizada no método VOF, apresentada na seção 3.9.2, o campo de velocidade é utilizado. Para que essa propagação seja mais acurada e estável numericamente, ela deve ser realizada utilizando apenas o campo de velocidade do domínio de interesse, certificando-se de que no domínio complementar o campo de velocidades utilizado na advecção da interface seja nulo.

Portanto, são utilizados somente pontos de velocidade contidos no domínio de interesse ao se realizar a advecção da interface entre fluidos. Desta forma, é necessário identificar com precisão os pontos eulerianos internos ou externos à interface, sobretudo em problemas envolvendo interfaces móveis onde se deve fazer essa avaliação sempre que os pontos lagrangianos são deslocados. Uma possível maneira de identificar estes pontos é com o uso de uma função indicadora, proposta por Unverdi e Tryggvason (1992), a qual consiste em um método de captura (*tracking*) da interface com alta robustez.

A função indicadora, $I(\vec{x}, t)$, é definida por:

$$\nabla I(\vec{x}, t) = \vec{G}(\vec{x}, t), \quad (3.101)$$

onde a função $\vec{G}(\vec{x}, t)$ é dada por

$$\vec{G}(\vec{x}, t) = \sum_k D_{ij}(\vec{x} - \vec{x}_k) \vec{n}(\vec{x}_k) \Delta s(\vec{x}_k), \quad (3.102)$$

sendo D_{ij} a função distribuição, $\vec{n}(\vec{x}_k)$ o vetor normal ao ponto lagrangiano e Δs a distância entre os pontos lagrangianos.

Aplicando o operador divergente à Eq. (3.101), chega-se a

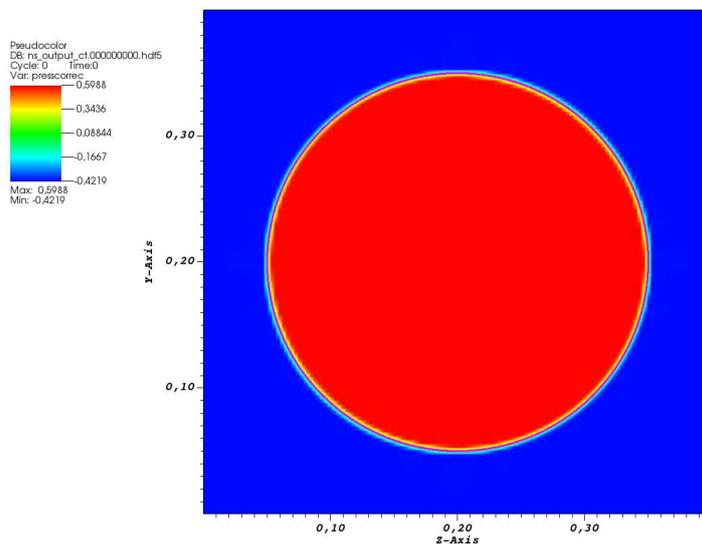
$$\nabla^2 I(\vec{x}, t) = \nabla \cdot \vec{G}(\vec{x}, t). \quad (3.103)$$

A função indicadora é obtida no MFSim através da solução de uma equação elíptica (3.103) que resulta em valores negativos no domínio complementar e em valores positivos no domínio de interesse. Utilizando a malha uniforme, o resultado obtido é o seguinte:

É possível observar que, em sua forma original, a função indicadora apresenta valores entre -0.4219 e +0.5988, o que pode mudar de acordo com a resolução da malha computacional. Porém, para utilizá-la de forma direta na anulação da velocidade de advecção da fração volumétrica no domínio complementar, é necessário que ela possua valores entre 0 e 1. A primeira forma (LIM1) utilizada para tal transformação foi:

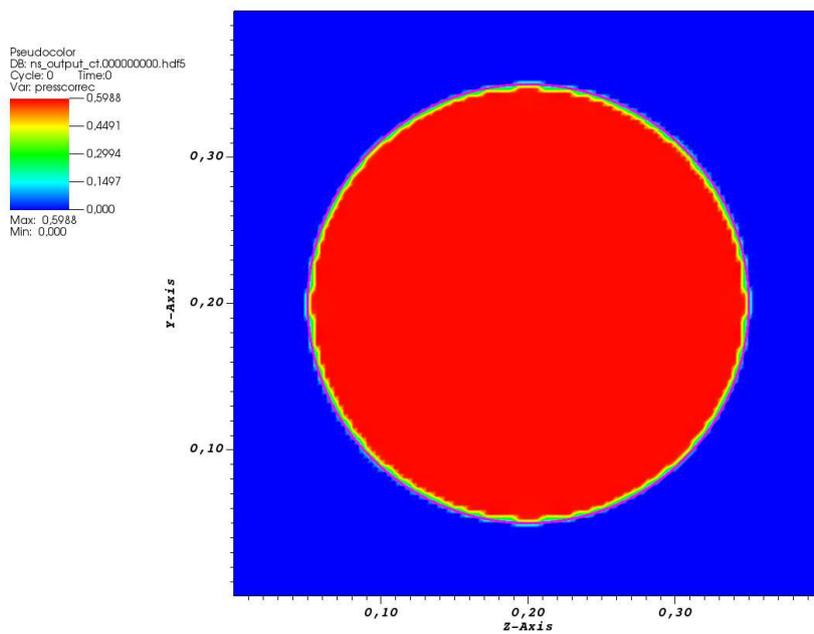
```
! LIM1 transformation
where(ib_if > 0.98d0) ib_if = 1.0d0
where(ib_if < 5.0d-1) ib_if = 0.0d0
```

Figura 3.13: Campo original da função indicadora. A linha rosa é o cilindro modelado com fronteira imersa.



Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 3.14: Campo da função indicadora limitada com LIM1.



Fonte: elaborado pelo autor.

que levou ao seguinte resultado

Através da Fig. 3.14 é possível observar que, utilizando a forma LIM1, o campo perde suavização e o valor máximo não vai para 1 como era esperado, já que o máximo valor apresentado pela função original não é contemplado no `where`.

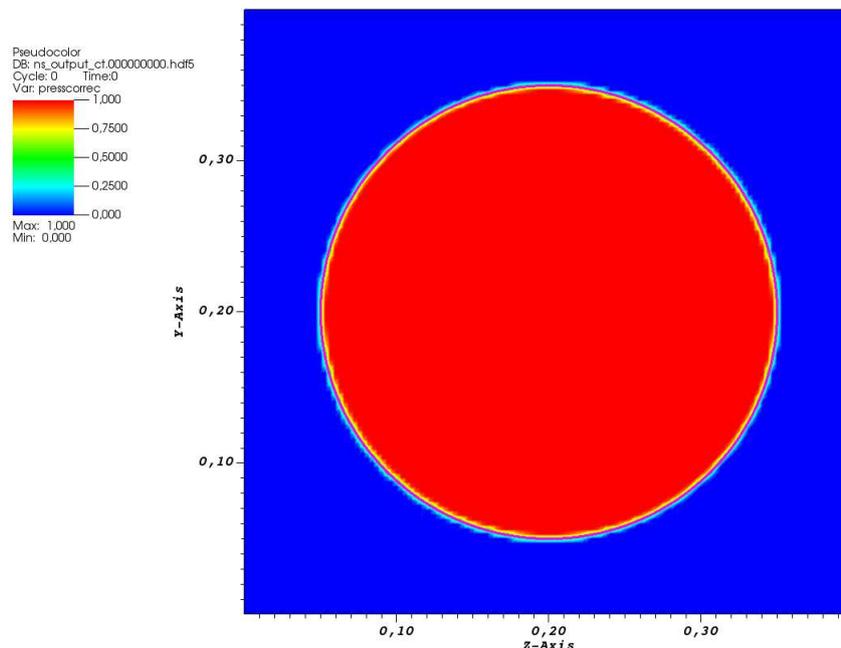
Buscando contornar os problemas apresentados foi implementada uma nova forma de limitação (LIM2), a qual é feita da seguinte forma:

```
! LIM2 transformation
auxib = dabs(minval(ib_if))
ib_if = ib_if + auxib

where(ib_if > 0.97d0) ib_if = 1.0d0
where(ib_if < 0.4d0) ib_if = 0.0d0
```

A metodologia LIM2 consiste em somar o valor mínimo da função original em todos os pontos levando assim, o novo valor de mínimo para algo próximo a zero e o valor máximo para algo em torno de 1. Após esta etapa um pequeno ajuste é realizado por meio de dois `where`. O primeiro utiliza uma tolerância de 3% para levar os valores superiores a 1 e o segundo anula os valores da função no domínio complementar já que, em teoria, na interface, a função indicadora possui um valor intermediário. Ao somar o valor mínimo da função original, o valor intermediário passa de zero para 1, ressaltando que como o campo vem da solução de uma equação diferencial, é dependente da resolução da malha. Essa segunda etapa é muito importante pois tem influência direta na velocidade de advecção da fração volumétrica. O resultado obtido com a metodologia LIM2 pode ser visualizado na Fig. 3.15.

Figura 3.15: Campo da função indicadora limitada com LIM2.



Fonte: elaborado pelo autor.

É possível constatar que o emprego desta metodologia resulta em um campo

mais suave e mais adequado para modificar a velocidade de advecção da fração volumétrica.

Conforme comentado anteriormente, a definição da função marcadora é dependente da malha, já que é obtida por meio de uma equação diferencial parcial. Porém, em conjunto com as funções limitadoras, é possível obter um resultado mais adequado mesmo em malhas mais grosseiras. Como a marcação é aplicada a superfícies sólidas, a aplicação de correções não compromete a acurácia de forma a impactar no resultado.

Foram realizados diferentes testes para validar a metodologia, inclusive em cenários onde existe mais de um corpo imerso no sistema. Um ponto a se ressaltar é que, como a definição da função G na Eq. (3.103) envolve os vetores normais à superfície imersa, a geometria deve ser construída de forma que todos os vetores normais apontem para o domínio de interesse.

Essa metodologia de marcação dos domínios é o elo de conexão entre os modelos de fronteira imersa e de representação do escoamento bifásico e foi um ponto chave para que o código estivesse preparado para as simulações apresentadas na seção 4.4.

No presente capítulo foram detalhadas as principais metodologias implementadas no MFSim que foram utilizadas nas simulações computacionais cujos resultados serão apresentados no capítulo seguinte. Detalhes a respeito das formulações matemáticas e numéricas do código foram discutidos com o objetivo de trazer ao leitor um panorama geral da plataforma numérica utilizada. Os focos principais foram a modelagem de escoamentos bifásicos e a modelagem de corpos imersos, temas centrais do presente trabalho, tendo o cuidado de apresentar ao longo do texto referências que abordam os tópicos apresentados de forma mais detalhada. Portanto, no capítulo 4 serão apresentados resultados obtidos com o MFSim para diversas simulações computacionais realizadas.

Capítulo 4

RESULTADOS

4.1 Simulação de escoamentos monofásicos com a presença de corpos imersos utilizando modelos de turbulência da classe k- ϵ

Nesta seção serão apresentados resultados referentes à modelagem para a simulação de escoamentos com a presença de corpos imersos utilizando modelos de turbulência da classe k- ϵ . Os casos apresentados têm por objetivo demonstrar o comportamento do método em escoamentos monofásicos na presença de corpos imersos como parte do processo de verificação e validação do método implementado.

4.1.1 Caso 1: escoamento em um canal plano

O primeiro caso simulado para verificar a metodologia implementada foi o escoamento monofásico em um canal plano. Utilizou-se a condição de simetria no centro do canal e condições periódicas nas duas direções restantes.

Para a direção do escoamento, um gradiente de pressão dinâmico foi usado. Essa escolha se justifica pela possibilidade de realizar simulações utilizando ou não a modelagem para fronteira imersa. O domínio computacional tem $0,1 \times 0,0125 \times 0,01$ m³ e foi discretizado em uma malha computacional hexaédrica uniforme. Foram utilizadas configurações com $y^+ \approx 8$ e $y^+ \approx 4$. O valor do número de Reynolds (Re) que caracteriza o escoamento é 13.750 que é o mesmo valor utilizado no trabalho de Mansour, Kim e Moin (1988).

O número de Reynolds e a coordenada de parede y^+ são dadas por

$$Re = \frac{\bar{u} \cdot (H/2)}{\nu}, \quad (4.1)$$

e

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu}, \quad (4.2)$$

onde

$$u_\tau = \sqrt{\nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{wall}}. \quad (4.3)$$

Após a escolha do caso, foram realizadas quatro simulações sem a utilização do método de fronteira imersa para modelar a parede do canal. A única diferença entre as configurações foi a expressão utilizada para a imposição da condição de contorno na parede para ϵ (Eqs. (3.58), (3.59), (3.60) e (3.61)), reescritas a seguir:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial n} = 0. \quad (4.4)$$

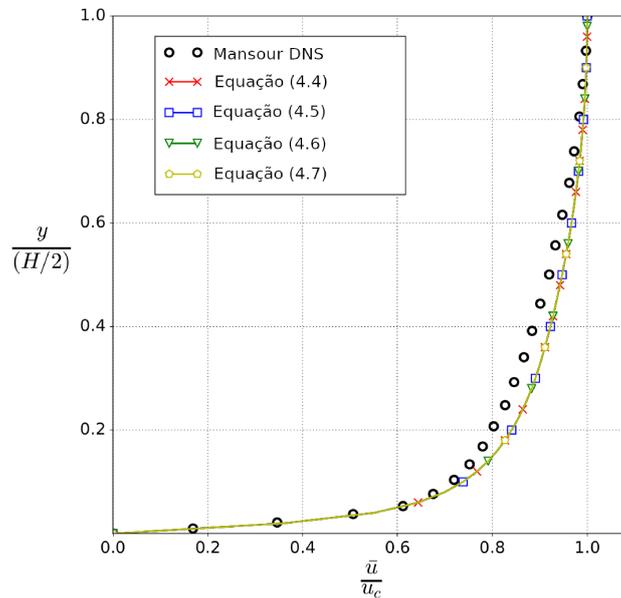
$$\epsilon = \nu \frac{\partial^2 k}{\partial n^2}, \quad (4.5)$$

$$\epsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k_P^{3/2}}{\kappa \delta_P}, \quad (4.6)$$

$$\epsilon = 0. \quad (4.7)$$

Utilizando a metodologia de fronteira imersa para modelar a parede do canal, apenas uma simulação foi realizada para cada malha, na qual foi aplicado o valor da Eq. (4.6) para atribuição de ϵ na parede. O tempo físico total simulado foi de 0,35 s.

Figura 4.1: Perfil de velocidade normalizado obtido por meio de simulações sem fronteira imersa, utilizando diferentes condições de contorno para ϵ .

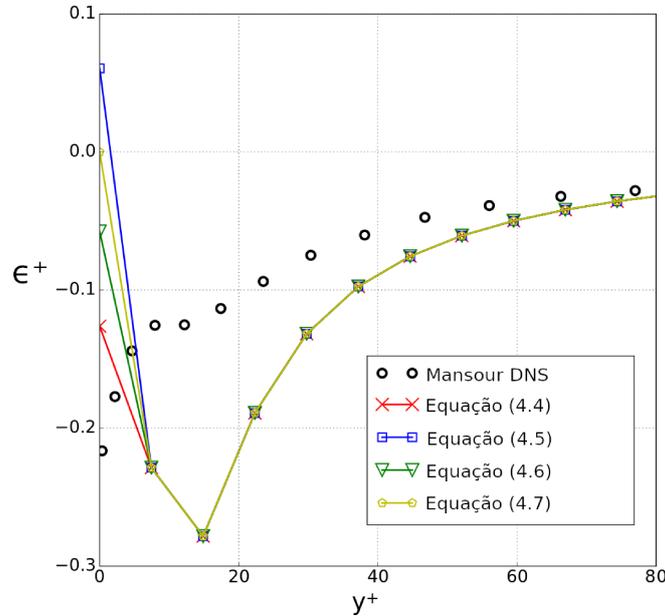


Fonte: elaborada pelo autor.

Por meio de simulações sem a utilização de fronteira imersa, foi possível verificar que os campos de k e de velocidade não apresentaram alterações à medida que se alteravam as expressões utilizadas para imposição das condições de contorno para ϵ . Mesmo para a quantidade ϵ , percebeu-se o mesmo comportamento nos pontos analisados situados no interior do canal. Na Fig. 4.1 mostra-se esse comportamento para o campo de velocidade. Diante desses resultados e com base nos argumentos

apresentados ao longo da metodologia, optou-se por realizar apenas uma simulação com a parede do canal modelada via fronteira imersa. Nesse caso, utilizou-se a Eq. (4.4) para imposição de ϵ na parede.

Figura 4.2: Perfil de ϵ normalizado obtido por meio de simulações sem fronteira imersa, utilizando diferentes condições de contorno para ϵ .



Fonte: elaborada pelo autor.

Os perfis obtidos para k , ϵ e para os campos de velocidades u e u_τ foram comparados com os resultados da Simulação Numérica Direta (DNS) obtidos por Moser, Kim e Mansour (1999).

Comparando os resultados, foi possível observar uma concordância razoável entre os resultados da simulação com fronteira imersa, os resultados da simulação sem fronteira imersa e os resultados de DNS para o campo de velocidade, conforme apresentado na Fig. 4.3.

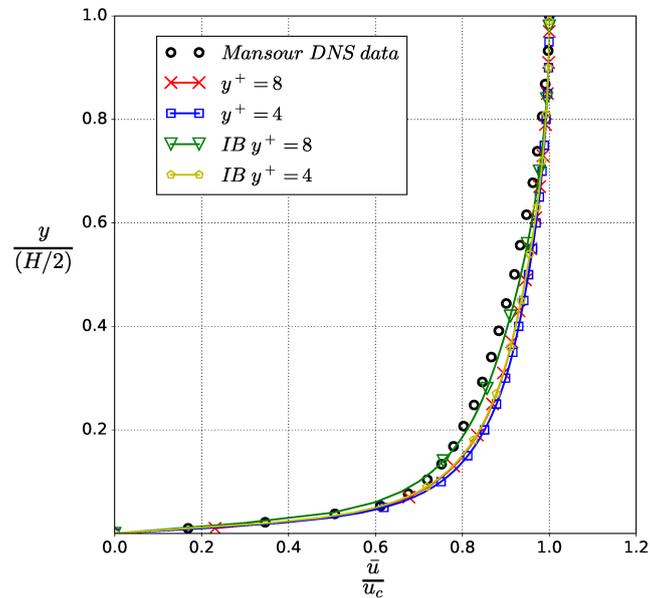
Na Fig. 4.4 é possível observar que, a concordância entre os resultados da simulação realizada utilizando o MFSim e os dados DNS, melhora à medida que o valor de y^+ diminui. Além disso, os resultados sem a utilização de fronteira imersa são melhores que os resultados obtidos com a parede modelada via fronteira imersa, evidenciando que o MDF possui um erro intrínseco, como esperado.

Na Fig. 4.5 mostra-se um perfil adimensional da energia cinética turbulenta e na Fig. 4.6 mostra-se um perfil adimensional da potência de transformação viscosa, seguindo a seguinte expressão:

$$\epsilon^+ = -\frac{\nu \epsilon}{u_\tau^4}. \quad (4.8)$$

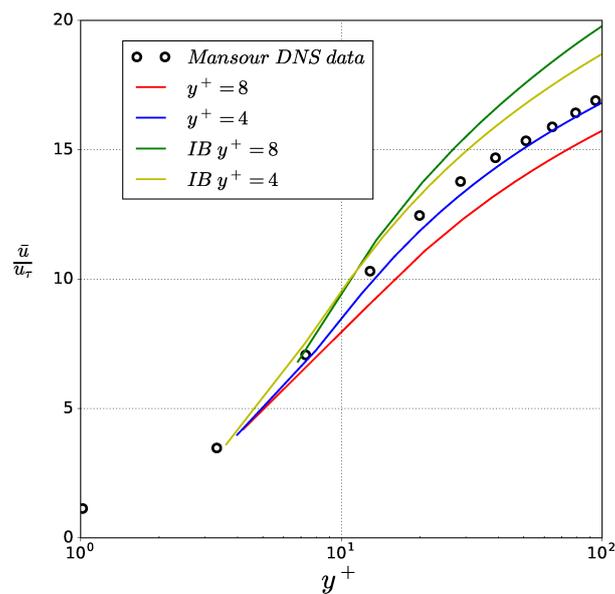
Momentos de segunda ordem, como k e ϵ , têm predição mais complexa que momentos de primeira ordem, como velocidade. Os resultados para k e ϵ com a parede modelada por meio de fronteira imersa são menos acurados que os resultados obtidos sem a utilização desta modelagem, como esperado.

Figura 4.3: Perfil de velocidade média adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13\,750$.



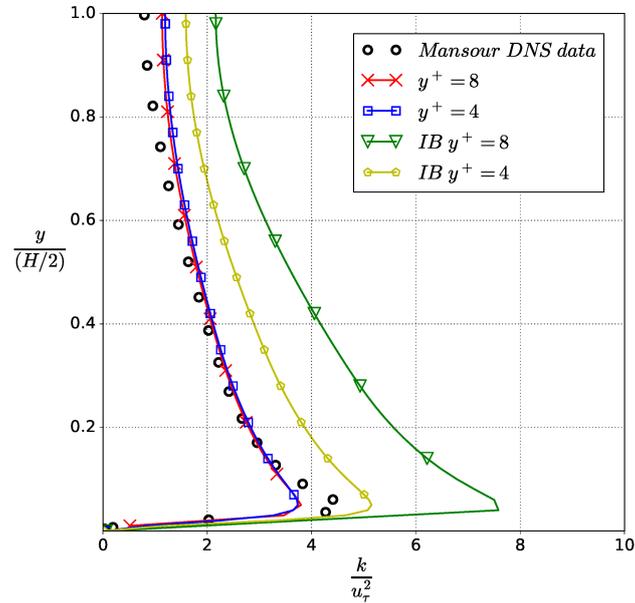
Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.4: Perfil de velocidade média de parede (u_τ) adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13\,750$.



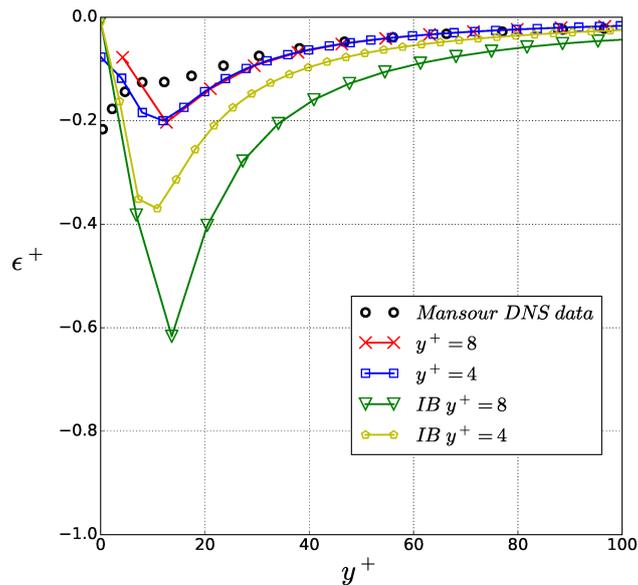
Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.5: Perfil de energia cinética turbulenta (k) adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13.750$.



Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.6: Perfil da potência de transformação viscosa (ϵ) adimensional para um canal plano com escoamento caracterizado por $Re = 13.750$.



Fonte: elaborada pelo autor.

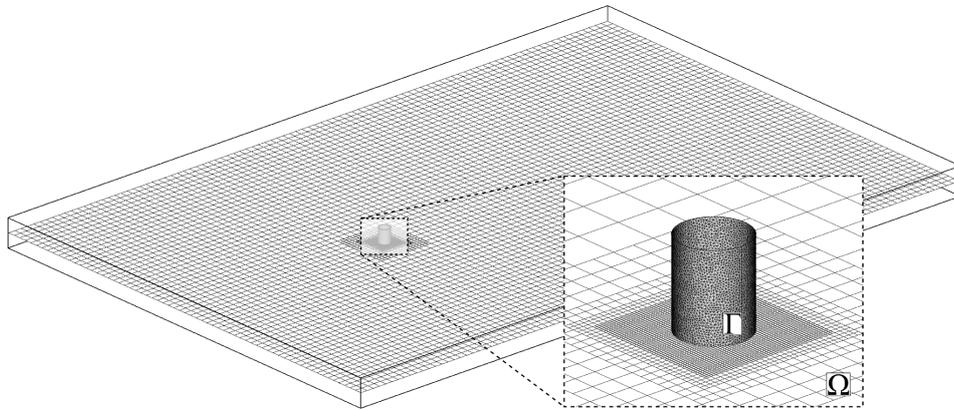
O método de multi-forçagem-direta não é o melhor método para previsões relativas a camada limite, pois envolve diversas etapas de interpolações ao longo do processo. O método e a ordem das interpolações podem alterar os resultados, principalmente próximo à parede. No MFSim estão implementados quatro tipos de função de interpolação mas nas simulações do presente trabalho, apenas a interpolação chapéu (*hat*) foi utilizada por apresentar o menor custo computacional.

4.1.2 Caso 2: escoamento sobre um cilindro

O escoamento em torno de um cilindro foi o primeiro caso escolhido para validar a metodologia em domínios não cartesianos.

O diâmetro do cilindro escolhido é de $d = 0.1$ m e o tamanho total do domínio euleriano é $L_x = 6$ m na direção x , $L_y = 4$ m na direção y e $L_z = 0.25$ m na direção z . O cilindro está posicionado no ponto $(x_c, y_c) = (2, 2)$ m. A malha euleriana base é composta por $90 \times 64 \times 4$ elementos e 5 níveis de refinamento, sendo o refinamento inicial aplicado ao redor do cilindro. O corpo imerso e o gradiente de vorticidade são usados como o critério de refinamento da malha. No que diz respeito à paralelização do domínio, o domínio computacional foi dividido em 32 subdomínios, utilizando o protocolo MPI para comunicação. Na Fig. 4.7, são apresentadas as malhas euleriana e lagrangiana no instante inicial.

Figura 4.7: Malhas euleriana (Ω) e lagrangiana (Γ) no instante inicial.



Fonte: elaborada pelo autor.

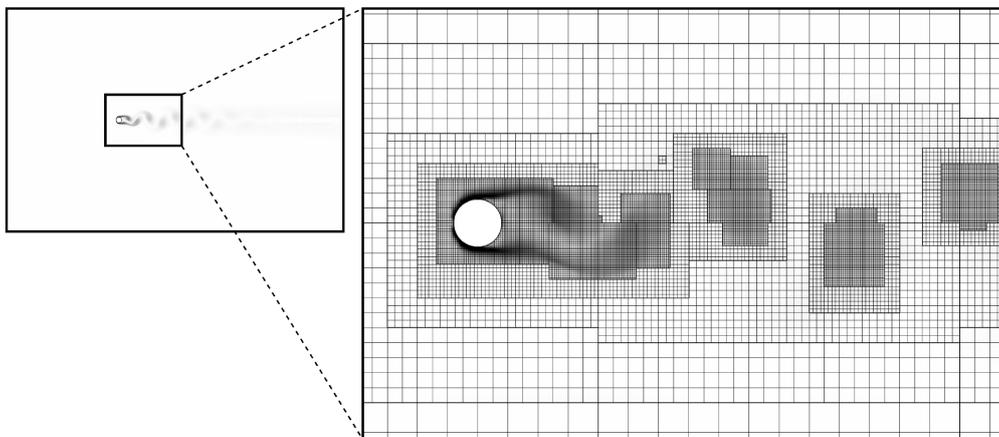
Para determinar o número de elementos, supõe-se que o elemento lagrangiano tenha, aproximadamente, o mesmo volume do elemento euleriano, conforme proposto por Uhlmann (2005). Desta forma, o número de elementos lagrangianos pode ser determinado por meio da expressão $N_l = 2\pi r b / h^2$, onde r é o raio do cilindro, b é o comprimento do cilindro e h é o tamanho característico da célula euleriana.

Como condição inicial foi utilizada a velocidade de entrada do fluido no domínio $U_\infty = 1$ m/s na direção x . Na face de entrada do domínio, foi imposta uma condição de contorno Dirichlet para a velocidade, já na face de saída foi utilizada a condição de contorno advectiva de Orlanski (HAN; MENG; INNIS, 1983). Nas faces do domínio na direção y foram utilizadas condições de contorno do tipo Neumann para a velocidade, já na direção z considerou-se periodicidade.

O número de Reynolds foi calculado com base na velocidade de entrada do fluido U_∞ , diâmetro do cilindro d e viscosidade cinemática ν do fluido, $Re_d = U_\infty d / \nu$. Três valores de Reynolds foram utilizados para caracterizar os escoamentos simulados: $Re_d = 4000$, $Re_d = 10000$ e $Re_d = 200000$.

O comportamento da malha adaptativa pode ser visualizado na Fig. 4.8, na qual apresenta-se o campo instantâneo de magnitude da vorticidade junto a malha no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão. É possível observar que existe um bloco de malha do nível mais fino sobre o cilindro e outros blocos de malha fina que são gerados de acordo com a vorticidade na esteira formada à jusante do cilindro.

Figura 4.8: Campo instantâneo de magnitude da vorticidade junto a malha no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão.



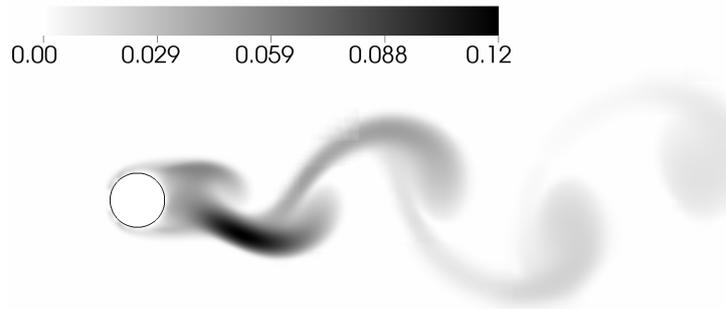
Fonte: elaborada pelo autor.

O campo de energia cinética turbulenta (k) em uma região próxima ao cilindro é mostrado na Fig. 4.9. O campo corresponde à propriedade transportada na primeira equação do modelo de turbulência URANS a duas equações utilizado nas simulações ($k - \epsilon$ padrão). Com o método MDF, é possível impor um valor constante na parede para a energia cinética turbulenta ($k = 0$). É possível observar através do campo apresentado um bom comportamento qualitativo próximo à parede do cilindro.

O campo instantâneo de ϵ no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão é apresentado na Fig. 4.10. Usando o método MDF, valores obtidos a partir de expressões algébricas são forçados na parede para algumas propriedades, como ϵ . As expressões algébricas utilizadas envolvem propriedades do escoamento obtidas por meio de valores em pontos próximos à parede. Assim, o processo para forçar ϵ é mais complexo que a forçagem de k . Nas simulações computacionais do escoamento sobre o cilindro, a expressão utilizada para determinar o valor a ser forçado foi a apresentada na Eq. (3.60). É possível observar nos campos mostrados na Fig. 4.10 um bom comportamento qualitativo na região próxima à parede do cilindro.

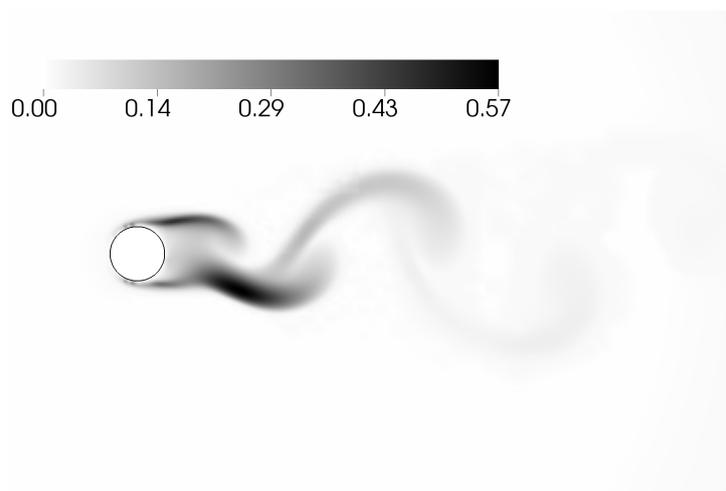
A visualização dos campos de propriedades do escoamento possibilita apenas uma análise qualitativa, importante para observar o comportamento do método, principalmente em regiões próximas à parede. Não conformidades no método MDF

Figura 4.9: Campo instantâneo de energia cinética turbulenta (k) no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão.



Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.10: Campo instantâneo de ϵ no plano central da direção z para $Re = 2 \cdot 10^5$ usando o modelo $k - \epsilon$ padrão.



Fonte: elaborada pelo autor.

Tabela 4.1: Comparação dos valores para o coeficiente de arrasto no escoamento sobre um cilindro com diferentes números de Reynolds.

Re	Trabalho	C_D	Erro (%)
$4 \cdot 10^3$	Kravchenko e Moin (2000)	0.99	-
	Standard $k - \omega$ Young e Ooi (2007)	1.32	33.33
	Standard $k - \epsilon$ (MFSim - MDF)	1.033	4.34
$1 \cdot 10^4$	Gopalkrishnan (1993)	1.1856	-
	LES Yagmur et al. (2015)	1.01	14.81
	Standard $k - \epsilon$ (MFSim - MDF)	1.098	7.39
$2 \cdot 10^5$	Bearman (1969)	1.14	-
	Standard $k - \epsilon$ (MFSim - MDF)	1.196	4.91

podem levar a erros nas propriedades próximas a paredes, causando alterações no comportamento do escoamento.

Para o processo de validação, é necessária uma análise quantitativa. No presente trabalho o valor do coeficiente de arrasto foi avaliado. A comparação foi baseada em resultados de experimentos materiais e computacionais de outros trabalhos encontrados na literatura. Para todos os valores do número de Reynolds foram utilizadas as mesmas condições e a mesma malha, alterando apenas a viscosidade do fluido.

É possível observar na Tab. 4.1 os valores para o coeficiente de arrasto obtidos por meio das simulações computacionais realizadas com o MFSim onde foi empregado o modelo de turbulência $k - \epsilon$ padrão. O erro relativo aos valores encontrados em outros trabalhos também foi calculado.

As primeiras simulações foram realizadas com $Re = 4 \cdot 10^3$, condição na qual tem-se $y^+ \approx 10$. O trabalho experimental de Kravchenko e Moin (2000) e o resultado de simulação computacional Young e Ooi (2007) foram utilizados para comparações com o resultado obtido por meio da simulação utilizando o MFSim. O erro relativo do coeficiente de arrasto calculado por meio da simulação computacional usando o padrão $k - \epsilon$ no MFSim apresenta é de 4.34% quando comparado com a referência experimental. Para efeitos de análise, o erro entre a simulação realizada por Young e Ooi (2007) utilizando o modelo de turbulência $k - \omega$ e o valor experimental é de 33.33%.

Na segunda simulação realizada, o número de Reynolds que caracteriza o escoamento foi alterado para $Re = 1 \cdot 10^4$. A malha computacional inicial é a mesma da primeiras simulação, mas as propriedades fluidodinâmicas levam a $y^+ \approx 20$, pois esse valor é baseado no número de Reynolds. O valor do coeficiente de arrasto do trabalho experimental de Gopalkrishnan (1993) foi utilizado como referência. Um erro de 7.39%, foi obtido para o resultado da simulação computacional usando o modelo $k - \epsilon$ padrão no MFSim. Para efeitos de comparação, o valor obtido por meio de uma simulação computacional de Yagmur et al. (2015) utilizando um modelo de turbulência LES foi considerada e apresenta uma diferença percentual de aproximadamente 15%.

As últimas simulações foram realizadas com $Re = 2 \cdot 10^5$. O escoamento sobre um cilindro caracterizado por esse número de Reynolds é relativamente complicado, pois é um valor próximo à região onde acontece a chamada crise de arrasto. O alto número de Reynolds com a mesma malha computacional inicial leva a $y^+ \approx 300$. Este valor de y^+ não é adequado para simulações com o tratamento de parede *two-layer*. Para a utilização do modelo $k - \epsilon$ padrão com tratamento de parede de duas camadas recomenda-se $y^+ < 15$.

O trabalho experimental de Bearman (1969) é usado para comparações do valor para o coeficientes de arrasto. O erro referente à simulação computacional usando o $k - \epsilon$ padrão no MFSim é de 4.91% quando comparado ao valor experimental.

Os valores de erro apresentados para o modelo $k - \epsilon$ padrão permitem uma observação interessante a respeito do comportamento do método MDF junto ao modelo de turbulência. O valor forçado para as propriedade por meio do MDF pode atuar como uma lei da parede parcial, aplicada apenas à variável forçada. Essa característica leva a bons resultados mesmo para simulações computacionais que utilizam condições inadequadas para o funcionamento dos modelos utilizados, como o escoamento com $Re = 2 \cdot 10^5$.

4.2 Simulações de casos simplificados utilizando a modelagem VOF

Na presente seção serão apresentados resultados de simulações computacionais utilizadas no processo de validação e verificação de diferentes tópicos relacionados à metodologia *Volume of Fluid* (VOF), a qual foi utilizada ao longo do trabalho para a modelagem de escoamentos bifásicos. Os testes foram realizados com o objetivo de se avaliar a metodologia já implementada dentro do MFSim e realizar ajustes e correções de acordo com os resultados e comportamentos observados por meio dos testes.

4.2.1 Testes de verificação da inicialização do campo de fração volumétrica

Para a verificação da parte de inicialização da função marcadora, detalhada na seção 3.7, foram realizados alguns testes das metodologias presentes no código. Foram realizados três testes comparativos entre os diferentes métodos de inicialização presentes no código MFSim. Nestes testes foram analisados o erro e o custo computacional.

O primeiro teste realizado foi a inicialização de uma esfera centrada em 0.5 nas três direções do domínio, com raio 0.1 m em um domínio 3D unitário. A simulação foi realizada dividindo o domínio em dois processos na direção x , com uma malha base (lbot) de $32 \times 32 \times 32$ com um bloco de refinamento fixo indo de 0.35 a 0.65 nas três direções. Foram realizadas simulações aumentando o número de níveis a fim de se testar o uso da biblioteca em malhas compostas.

Conforme pode ser observado na Tab. 4.2, com a inicialização pela biblioteca VOFI, o erro relativo para o volume inicializado se mantém em todas as malhas. O

Tabela 4.2: Tabela comparativa do erro relativo e custo computacional para inicialização de uma esfera com raio 0.1 em um domínio unitário com diferentes malhas.

	Número de níveis	Sub células	VOFI	Pontos
Erro relativo	1	3.86E-04	2.78E-08	3.56E-06
Tempo [s]		0.0795	0.1034	0.2384
Erro relativo	2	9.54E-05	2.78E-08	2.28E-06
Tempo [s]		0.1293	0.1554	0.78
Erro relativo	3	2.38E-05	2.78E-08	1.62E-06
Tempo [s]		0.3492	0.2792	2.5499
Erro relativo	4	5.93E-06	2.78E-08	9.76E-08
Tempo [s]		1.3441	1.5221	9.5263

erro relativo do método de inicialização adotado na biblioteca, segundo (BNÀ et al., 2016), é $2.779E - 08$ e o valor encontrado ao realizar a inicialização via VOFI no MFSim é $2.78E - 08$, significando que o acoplamento da biblioteca externa VOFI foi realizado de maneira correta no código e que a maneira de utilizá-la em uma malha composta também parece adequada.

Realizando a comparação dos erros relativos obtidos por meio dos três métodos de inicialização, pode-se observar que, para este caso, a inicialização via VOFI apresentou em todas as malhas o melhor valor.

Quanto ao custo computacional dos métodos, a inicialização via VOFI apresenta um custo menor que a inicialização por pontos em todas as malhas e um custo similar à inicialização por sub células. Analisando em conjunto os resultados de erro relativo e custo computacional pode-se observar que a inicialização via VOFI apresenta o melhor custo benefício entre os métodos presentes no código MFSim.

Após o primeiro teste foram realizados outros dois testes mais direcionados ao contexto de conversão Lagrange-Euler, onde são inicializados pequenos corpos, geralmente esferas com raio da ordem do espaçamento da malha. Portanto, simulou-se a inicialização de uma esfera centrada em $\{0.3, 0.3, 0.3\}$ em um domínio 3D unitário. As simulações foram realizadas dividindo o domínio em dois processos na direção x , com uma malha base (lbot) de $32 \times 32 \times 32$, três níveis de refinamento, com um bloco de refinamento fixo indo de 0.25 a 0.35 nas três direções. Foram realizadas simulações considerando valores de $1 \Delta x$ e $2 \Delta x$ para o raio da esfera.

Conforme pode ser observado na Tab. 4.3, o erro relativo para a inicialização via VOFI se manteve inalterado em relação ao primeiro teste. Além disso, a comparação com os demais métodos de inicialização seguiu o mesmo comportamento observado no teste anterior, apresentando o melhor custo benefício. Porém, o custo 30% maior em relação à inicialização por sub células pode se tornar significativo em casos de conversão Lagrange-Euler.

Diante dos resultados apresentados, pode-se concluir que a inicialização do campo de fração volumétrica através da biblioteca VOFI se apresenta como uma alternativa interessante, principalmente para casos onde se exige uma inicialização mais precisa do campo, como testes de curvatura ou de correntes espúrias. Porém, a viabilidade

Tabela 4.3: Tabela comparativa do erro relativo e custo computacional para inicialização de uma esfera com raio da ordem do espaçamento da malha em um domínio unitário.

	Raio da esfera	Sub células	VOFI	Pontos
Erro relativo	$2 \Delta x$	9.77E-04	2.78E-08	9.08E-06
Tempo [s]		0.0666	0.0868	0.1681
Erro relativo	$1 \Delta x$	3.91E-03	2.78E-08	2.47E-05
Tempo [s]		0.0639	0.0739	0.0844

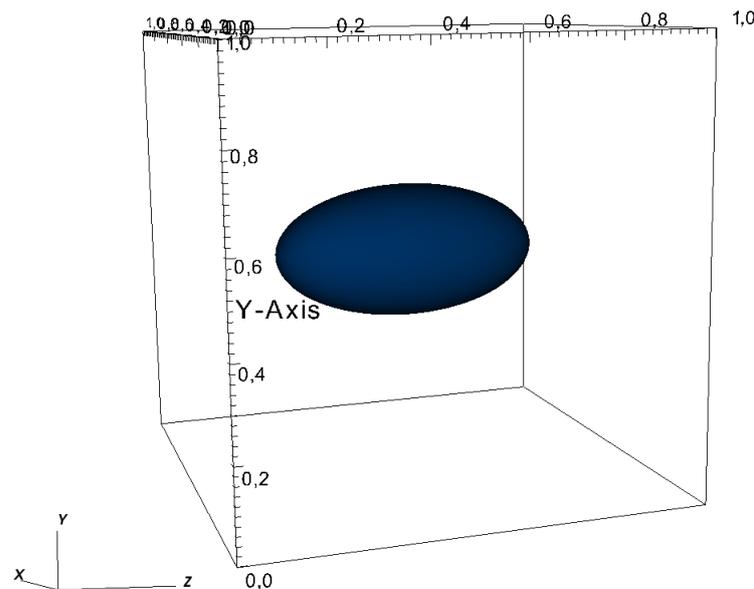
de se usar tal método na conversão Lagrange-Euler deve ser analisada em um caso de aplicação.

4.2.2 Teste de verificação do cálculo de normais

Ao longo dos desenvolvimentos foram realizados também testes para a verificação do processo de cálculo dos vetores normais à interface entre fluidos. Essa é uma parte muito importante no contexto do método VOF, conforme apresentado nas seções 3.8 e 3.9.

O teste de verificação realizado consiste na inicialização de uma superfície, a qual representa a interface entre fluidos, para a qual são calculados os vetores normais unitários. Diferentes superfícies foram utilizadas, porém, o resultado apresentado é para um elipsóide, apresentado na Fig. 4.11.

Figura 4.11: Interface elíptica utilizada nos testes para avaliação de ordem dos métodos de avaliação do vetor normal à interface.



Fonte: elaborado pelo autor.

A inicialização da interface foi realizada utilizando a biblioteca VOFI, possuindo erros associados na ordem de grandeza apresentada nos testes da seção 4.2.1. Após a inicialização, os vetores normais foram calculados e as três componentes foram armazenadas em arquivos para que os erros fossem calculados. Logo após, a execução do MFSim era finalizada. Sendo assim, o teste não envolve os processos de reconstrução e advecção da interface, tendo como objetivo apenas a análise de uma parte fundamental para a acurácia do método VOF, o cálculo das normais.

O domínio utilizado nas simulações foi um cubo unitário, sobre o qual foram aplicadas diferentes discretizações para que pudesse ser avaliada a ordem do método utilizado. Como o teste necessita de apenas uma iteração, não são necessárias especificações de métodos para as equações de transporte de outras propriedades no MFSim nem parâmetros de controle temporais.

Seja uma superfície definida pela função ψ , a qual é utilizada na função de inicialização da função coloração. As componentes do vetor normal à essa superfície podem ser calculadas, de forma exata, como

$$\vec{n} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \quad (4.9)$$

Tendo um cálculo exato para os vetores normais à superfície, dado pela Eq. (4.9), é possível calcular o erro associado aos valores obtidos numericamente. Para esse processo, optou-se por analisar o erro de colinearidade entre os vetores numérico e exato. Para um caso de erro zero, ambos os vetores são perfeitamente colineares. Quanto menos colineares são os resultados, maior é o erro. A análise de colinearidade para comparações vetoriais é mais eficiente que a análise de componentes, por exemplo.

Para a avaliação da diferença foram utilizadas as normas L_2 e L_∞ , as quais são calculadas, respectivamente, como

$$L_2 = \sqrt{\frac{(\vec{n}_{exato} - \vec{n}_{numerico})^2}{N}}, \quad (4.10)$$

e

$$L_\infty = \max |\vec{n}_{exato} - \vec{n}_{numerico}|, \quad (4.11)$$

onde N é o número de pontos onde a diferença foi avaliada.

A avaliação da ordem do método pode ser avaliada utilizando o cálculo do \log_2 da razão entre os resultados de duas malhas subsequentes, ou seja,

$$ordem = \log_2 \left(\frac{L_2(\Delta x)}{L_2(\Delta x/2)} \right), \quad (4.12)$$

sendo $L_2(\Delta x)$ o valor da Eq. (4.10) avaliada em uma malha com espaçamento de Δx e $L_2(\Delta x/2)$ a Eq. (4.10) avaliada em uma malha com a metade do espaçamento. O mesmo desenvolvimento vale quando a norma L_∞ é utilizada.

Na Tab. 4.4 são apresentados os valores das diferenças avaliadas por meio das Eqs. (4.10) e (4.11) para o método MYCS (YOUNGS, 1982), o qual está implementado no MFSim e era o único disponível até o início dos desenvolvimentos do presente trabalho. Na tabela também é apresentada uma análise de ordem do método baseada nas normas L_2 e L_∞ .

Tabela 4.4: Avaliação da ordem do método MYCS (YOUNGS, 1982) implementado no MFSim de acordo com os valores das normas L_2 e L_∞ no caso de uma interface elíptica.

nx	Norma L_2	Norma L_∞	Razão L_∞	Razão L_2	Ordem L_∞	Ordem L_2
16	0.053674	0.153351	-	-	-	-
32	0.014481	0.051153	2.997921	3.706513	1.583962	1.890063
64	0.003615	0.011486	4.453319	4.005295	2.154881	2.001908
128	0.000941	0.003467	3.312903	3.842486	1.728096	1.942040
256	0.000257	0.001269	2.732171	3.664518	1.450048	1.873624

É possível observar nas duas últimas colunas da Tab. 4.4 que, de acordo com os resultados, o método não pode ser considerado de segunda ordem. A partir da malha de 64 elementos, a ordem obtida para o método começa a se distanciar de 2, chegando a apresentar um resultado de 1,45 quando avaliada por meio da norma L_∞ na malha mais refinada. Sendo assim, é possível observar que o método MYCS deve ser considerado de primeira ordem.

Na Tab. 4.5 são apresentados os valores das diferenças avaliadas por meio das Eqs. (4.10) e (4.11) para o método ELVIRA, o qual está implementado no MFSim por meio de acoplamento com a biblioteca externa IRL, apresentada na seção 3.10. Na tabela também é apresentada uma análise de ordem do método baseada nas normas L_2 e L_∞ .

Tabela 4.5: Avaliação da ordem do método ELVIRA (PILLIOD, 1992 apud JR; PUCKETT, 2004) implementado no MFSim via IRL de acordo com os valores das normas L_2 e L_∞ no caso de uma interface elíptica.

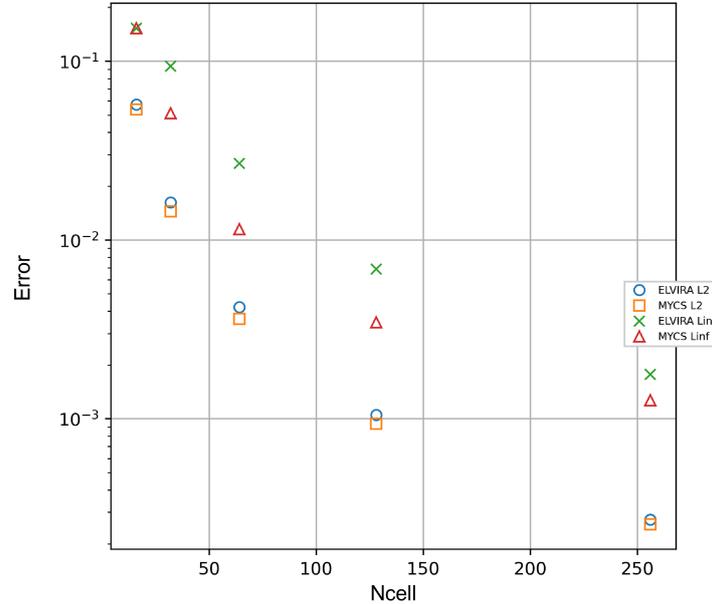
nx	Norma L_2	Norma L_∞	Razão L_∞	Razão L_2	Ordem L_∞	Ordem L_2
16	0.057282	0.153351	-	-	-	-
32	0.016222	0.093646	1.637562	3.531249	0.711549	1.820178
64	0.004218	0.026840	3.489108	3.845894	1.802858	1.943319
128	0.001052	0.006891	3.895136	4.010594	1.961674	2.003816
256	0.000273	0.001773	3.886180	3.846025	1.958353	1.943368

É possível observar nas duas últimas colunas da Tab. 4.5 que, de acordo com os resultados, é mais plausível, em comparação com o MYCS, o método ELVIRA ser considerado de segunda ordem. A partir das malhas menos refinadas, a ordem obtida para o método começa a se aproximar de 2 conforme se aumenta o número de elementos utilizados na discretização do domínio. Apesar dos resultados para ordem obtidos com o método ELVIRA serem aparentemente melhores, ele também não é exatamente de segunda ordem.

Na Fig. 4.12 é apresentado um gráfico de comparação entre os valores das normas L_2 e L_∞ obtidos utilizando os métodos MYCS (Tab. 4.4) e ELVIRA (Tab. 4.5) para avaliação dos vetores normais a uma interface elíptica (Fig. 4.11). Pelo gráfico, com escala logarítmica para o erro, é possível observar que os valores de erro obtidos

com o método ELVIRA estão ligeiramente acima dos obtidos via MYCS, tanto na avaliação com a norma L_2 quanto com a L_∞ .

Figura 4.12: Comparação entre os valores das normas L_2 e L_∞ obtidos utilizando os métodos MYCS (Tab. 4.4) e ELVIRA (Tab. 4.5) para avaliação dos vetores normais a uma interface elíptica (Fig. 4.11).



Fonte: elaborado pelo autor.

Mediante os resultados apresentados para o cálculo dos vetores normais ao longo da presente seção, optou-se pela utilização do método MYCS nas demais simulações. Tendo valores de ordem e erro semelhantes aos obtidos por meio do método ELVIRA implementado na biblioteca IRL, a opção pelo método já utilizado dentro do MFSim visa maior eficiência, já que não necessita de acoplamento com biblioteca externa, e controle sobre a implementação do método, a qual foi refatorada e otimizada ao longo do presente trabalho.

4.2.3 Teste de verificação do método de reconstrução - Deformação de uma esfera

O caso de deformação de uma interface esférica por ação de um campo de velocidades imposto foi originalmente proposto por Leveque (1996) e envolve uma esfera de diâmetro $D = 0.3$ centrada em $(0.35, 0.35, 0.35)$, sendo o domínio um cubo de lado unitário $[0, 1]^3$.

O campo de velocidades $\vec{u}_c = (u, v, w)$ imposto é periódico e reversível, com as componentes dadas por:

$$u = 2\sin^2(\pi x)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z)\cos(\pi t/T), \quad (4.13a)$$

$$v = -\sin(2\pi x)\sin^2(\pi y)\sin(2\pi z)\cos(\pi t/T), \quad (4.13b)$$

$$w = -\sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin^2(\pi z)\cos(\pi t/T), \quad (4.13c)$$

que resulta na deformação máxima da esfera em $T = T/2$ e deve retornar à sua forma inicial em $t = T$.

O objetivo do teste de deformação da esfera é analisar a conservação de volume da fase que compõe a esfera após um número inteiro de ciclos. Como a interface passa por uma deformação severa devido ao campo de velocidades imposto, uma parte do volume acaba se perdendo durante o ciclo. A conservação de massa ao final da simulação depende tanto dos métodos utilizados no transporte da interface quanto da malha computacional utilizada. Todas as simulações foram executadas com uma discretização de 32 células em cada direção para comparar o desempenho entre os diferentes métodos utilizados, tanto da biblioteca IRL (seção 3.10) quanto do MFSim.

O passo de tempo utilizado também influencia nos resultados obtidos. No caso dos testes executados em um código externo ao MFSim utilizando a biblioteca IRL, o CFL é calculado como

$$CFL = \frac{\max(u, v, w)\Delta t}{\Delta x_{hex}}, \quad (4.14)$$

onde Δt é o passo de tempo definido pelo usuário e Δx_{hex} é o espaçamento de malha utilizado.

A seguir são apresentados os resultados para um caso bidimensional e para um caso tridimensional. O MFSim foi utilizado apenas para a simulação do caso tridimensional.

4.2.3.1 Caso bidimensional

No caso bidimensional apenas a biblioteca IRL foi utilizada, avaliando os diferentes métodos de reconstrução (R2P, ELVIRA, MOF e LVIRA) e os diferentes métodos de advecção (semi lagrangiano, semi lagrangiano corrigido e completamente lagrangiano). Os diferentes métodos de advecção presentes na IRL não foram abordados ao longo do texto mas são abordados na tese de Chiodi (2020).

Como o domínio possui somente duas dimensões, a componente w do campo de velocidades (Eq. (4.13c)) é considerada nula e apenas uma célula é utilizada na direção z , com dimensão Δx_{hex} .

Na Tab. 4.6 são apresentados os resultados dos diferentes métodos de reconstrução da IRL em um teste de deformação de uma esfera 2D. Para efeito de comparação, o tempo do processo de reconstrução foi avaliado na última iteração. Todos os resultados apresentados na Tab. 4.6 foram obtidos utilizando o método de advecção completamente lagrangiano disponível na IRL. Além disso, foram simulados 8 segundos com um passo de tempo de 1 milissegundo.

Analisando os resultados da Tab. 4.6 é possível observar que, no teste realizado, o modelo com maior custo computacional é o R2P, tanto em relação ao tempo total de execução (795 s) quanto ao tempo isolado do processo de reconstrução (84.2 ms). Esse comportamento já era esperado devido ao nível de complexidade envolvido neste método, conforme explicado na seção 3.10. Os demais métodos (Elvira, MOF e LVIRA) possuem custos semelhantes, com o LVIRA apresentando o menor tempo de execução total (361.79 s) e o Elvira o menor custo no processo de reconstrução (1.65 ms).

Tabela 4.6: Resultados dos diferentes métodos de reconstrução da IRL em um teste de deformação de uma esfera 2D. Tempo de reconstrução avaliado na última iteração.

Modelo	Tempo de execução [s]	Reconstrução [s]	Norma L1
R2P	795.00	8.4209e-02	0.02469
Elvira	403.94	1.6526e-03	0.02766
MOF	464.00	5.9131e-03	0.03162
LVIRA	361.79	3.9926e-03	0.05112

Quanto à acurácia da solução, avaliada por meio da norma L1 do volume da fase dispersa, o maior erro é obtido pelo método LVIRA ($L_1 = 0.05112$), o que pode justificar o menor tempo total de execução pelo fato do volume perdido ao longo do transporte da interface. A menor diferença avaliada pela norma L1 acontece no método R2P ($L_1 = 0.02469$), seguido pelos resultados utilizando Elvira ($L_1 = 0.02766$) e MOF ($L_1 = 0.03162$).

Conforme explicado, o método R2P foi desenvolvido com o objetivo de representar bem filamentos e filmes finos, portanto, no momento de máxima deformação da interface, menos massa se perde devido à sua característica de representação sub malha. Porém, ao se realizar uma análise conjunta do custo computacional e da acurácia, o método Elvira pode ser considerado o de melhor custo benefício.

Na Tab. 4.7 é apresentada uma análise comparativa quanto a acurácia e custo computacional dos métodos de advecção disponíveis na IRL. Todos os testes utilizaram as mesmas configurações do teste entre métodos de reconstrução. O método de reconstrução utilizado em todos os casos apresentados foi o R2P.

Tabela 4.7: Resultados dos diferentes métodos de advecção da IRL em um teste de deformação de uma esfera 2D. Tempo de advecção avaliado na última iteração.

Método de advecção	Norma L1	Advecção [s]	Tempo de execução [s]
SemiLagrangian	0.02312	5.3974e-02	654.42
SemiLagrangianCorrected	0.01828	6.1024e-02	758.94
FullLagrangian	0.02469	2.7521e-02	489.49

Pelos resultados observados na Tab. 4.7 é possível notar que o método de advecção mais eficiente em termos de custo computacional implementado na IRL é o completamente lagrangiano, o qual apresenta um tempo total de execução de 489.49 s, consumindo 27 ms para o processo de advecção na última iteração. O método de advecção semi lagrangiano vem logo em seguida (654.42 s e 54 ms), com o semi lagrangiano corrigido apresentando o pior desempenho em termos de custo computacional (758.94 s e 61 ms). As diferenças entre os tempos computacionais das Tabs. 4.6 e 4.7 se justificam pelo fato dos testes terem sido realizados em computadores diferentes. Sendo assim, as análises comparativas devem ser realizadas entre resultados da mesma tabela.

Quanto a acurácia dos métodos avaliada por meio da conservação de volume da fase, o desempenho dos métodos se inverte, com o semi lagrangiano corrigido levando

ao melhor resultado ($L_1 = 0.01828$), seguido pelo semi lagrangiano ($L_1 = 0.02312$) e com o completamente lagrangiano apresentando o pior resultado em termos de acurácia para o teste realizado ($L_1 = 0.02469$).

Portanto, com os resultados ao longo da seção, foi possível realizar uma análise de desempenho dos métodos implementados na biblioteca IRL para reconstrução e advecção da interface em um teste bidimensional. Na seção seguinte, o mesmo teste é apresentado para um domínio tridimensional, adicionando também resultados obtidos com as metodologias implementadas no MFSim.

4.2.3.2 Caso tridimensional

No caso tridimensional, além da biblioteca IRL foi realizada uma simulação no MFSim utilizando toda a estrutura de reconstrução e advecção de interface presente no código. As simulações com a IRL foram feitas avaliando os diferentes métodos de reconstrução (R2P, ELVIRA, MOF e LVIRA) com o método de advecção completamente lagrangiano.

Nas Tabs. 4.8 e 4.9 são apresentados os resultados dos diferentes métodos de reconstrução da IRL em um teste de deformação de uma esfera 3D sujeita ao campo de velocidades dado pela Eq. (4.13), tendo como diferença apenas o passo de tempo utilizado. Para efeito de comparação, o tempo dos processos de reconstrução e advecção da interface foram avaliados na última iteração. Todos os resultados apresentados nas Tabs. 4.8 e 4.9 foram obtidos utilizando o método de advecção completamente lagrangiano disponível na IRL. Além disso, foram simulados 8 segundos.

Tabela 4.8: Resultados dos diferentes métodos de reconstrução da IRL em um teste de deformação de uma esfera 3D comparados com o resultado do MFSim utilizando um passo de tempo $\Delta t = 1e - 2$. Tempo de reconstrução e advecção avaliados na última iteração.

Método	Norma L1	Reconstrução [s]	Advecção [s]	Tempo de execução [s]
Elvira	0.00738	4.0704e-02	4.5279e-01	178.10
Lvira	0.00878	3.4291e-02	4.5159e-01	179.23
MOF	0.00479	4.1034e-02	4.6409e-01	182.39
R2P	0.00368	3.0418e-01	4.5601e-01	456.69
MFSim	0.00814	2.7090e-03	1.1270e-03	8.27

O primeiro detalhe interessante para se notar nos resultados apresentados na Tab. 4.8 é a diferença entre o custo computacional da metodologia implementada no MFSim com as provindas da IRL. Enquanto o tempo total de execução no MFSim é de 8.3 s, o segundo menor tempo é do Elvira com 178.1 s. A grande diferença entre custos computacionais é percebida também ao se avaliar os tempos individuais dos processos de reconstrução e advecção da interface na última iteração. Essa grande diferença nos tempos avaliados pode ser explicada pelo fato dos métodos presentes na IRL serem implementados para a utilização em diferentes tipos de malha, enquanto a implementação do MFSim foi pensada para se alcançar a máxima eficiência em cenários com malha bloco estruturada multinível.

Ao se avaliar os valores calculados para a norma L_1 , nota-se que a metodologia do MFSim entrega resultados superiores apenas aos obtidos com o LVIRA via IRL. Os métodos Elvira, MOF e R2P apresentam desempenhos superiores ao do MFSim em termos de acurácia, sendo o melhor resultado obtido com o R2P, conforme esperado e em concordância com os resultados apresentados do caso bidimensional de deformação.

Na Tab. 4.9 são apresentados resultados obtidos com a mesma configuração com que os resultados da Tab. 4.8 foram obtidos, alterando apenas o passo de tempo utilizado para 1 ms.

Tabela 4.9: Resultados dos diferentes métodos de reconstrução da IRL em um teste de deformação de uma esfera 3D comparados com o resultado do MFSim utilizando um passo de tempo $\Delta t = 1e - 3$. Tempo de reconstrução e advecção avaliados na última iteração.

Método	Norma L_1	Reconstrução [s]	Advecção [s]	Tempo de execução [s]
Elvira	0.00766	4.1310e-02	4.9734e-01	1782.80
Lvira	0.00939	3.3462e-02	4.9903e-01	1791.95
MOF	0.00591	3.6309e-02	4.9318e-01	1765.37
R2P	0.00903	2.6881	5.1065e-01	5801.12
MFSim	0.00811	2.8470e-03	1.0950e-03	79.70

O comportamento em relação ao custo computacional se mantém, com o menor tempo de execução obtido pela metodologia do MFSim e com o maior estando relacionado ao método *two plane* da IRL. O custo computacional avaliado com a metodologia do MFSim está duas ordens de grandeza abaixo do segundo menor tempo total, obtido com o método MOF da IRL.

Um comportamento interessante é observado ao se realizar a análise de acurácia é que com o passo de tempo menor o erro avaliado pela norma L_1 na simulação com o R2P é maior que o obtido com passo de tempo maior (Tab. 4.8). Nas simulações com passo de tempo de 1 ms, o maior valor da norma L_1 foi obtido com o método Lvira, assim como se observou com o passo de tempo de 10 ms. Nos resultados da Tab. 4.9 porém, o menor valor da norma foi obtido com o método MOF.

Ao se avaliar os valores calculados para a norma L_1 , nota-se que a metodologia do MFSim entrega resultados superiores aos obtidos com o LVIRA e R2P via IRL. Os métodos Elvira e MOF apresentam desempenhos superiores ao do MFSim em termos de acurácia. Levando em consideração o tempo de execução do MFSim que é ordens de grandeza menor que os demais, observa-se que a metodologia implementada oferece um bom custo benefício.

4.2.4 Simulação de uma gota apoiada

Para os casos de gotas apoiadas, o campo gravitacional e as forças interfaciais são os responsáveis por levar a gota da condição inicial à posição de equilíbrio. Por isso é importante que se quantifique o peso desses dois efeitos, o que é realizado por

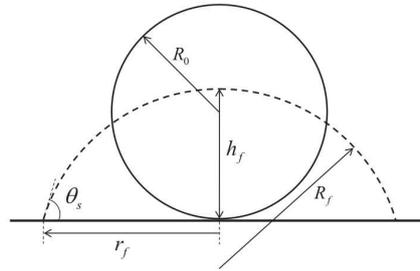
meio do número de Eötvös, definido como:

$$Eo = \frac{(\rho_1 - \rho_2) g R_o^2}{\sigma}, \quad (4.15)$$

onde ρ_1 e ρ_2 são as massas específicas das fases, g é o valor do campo gravitacional atuante, R_o é o raio inicial da gota e σ é a tensão interfacial.

O teste apresentado foi realizado para $Eo = 0$, ou seja, desprezando-se o campo gravitacional. Isso quer dizer que a gota sairá de sua forma inicial para uma forma de equilíbrio, dependente apenas do raio inicial R_o e do ângulo de contato estático, θ_s . A representação esquemática do caso é mostrada na Fig. 4.13.

Figura 4.13: Representação esquemática das formas inicial (-) e de equilíbrio (- -) de uma gota em uma superfície plana com ângulo de contato estático sem gravidade ($Eo = 0$).



Fonte: elaborada pelo autor.

As quantidades R_f , h_f e r_f possuem soluções analíticas que permitem uma validação do código por meio deste caso. As soluções analíticas para essas quantidades são representadas pelas seguintes equações:

$$R_f = R_o \left[\frac{4}{3} \left(\underbrace{\frac{2}{3} - \cos(\theta_s) + \frac{1}{3} \cos^3(\theta_s)}_{\gamma} \right)^{-1} \right]^{1/3} \implies R_f = R_o \left(\frac{4}{3\gamma} \right)^{1/3} \quad (4.16)$$

$$h_f = R_f (1 - \cos(\theta_s)) \quad (4.17)$$

$$r_f = R_f \sin(\theta_s) \quad (4.18)$$

De posse das soluções analíticas, parte-se para a etapa de simulações computacionais, as quais serão realizadas sem fronteira imersa, ou seja, com a gota apoiada em uma das paredes do domínio.

4.2.4.1 Caso sem consideração do campo gravitacional ($Eo = 0$)

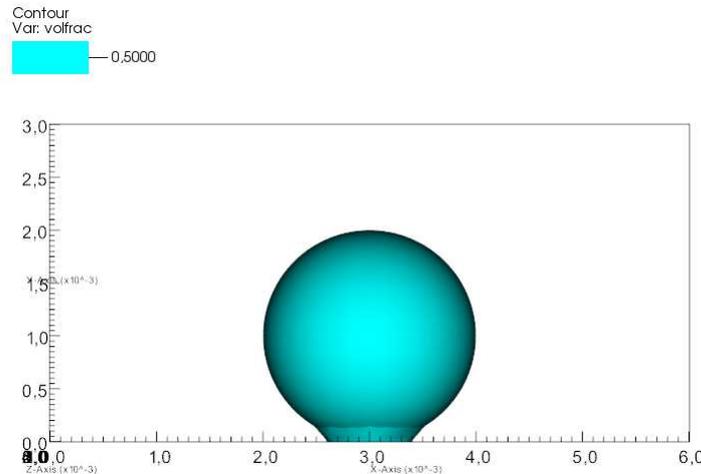
A simulação da gota apoiada sem fronteira imersa será realizada exclusivamente para o caso em que $\theta_s = 90^\circ$, pois, o código recupera este ângulo de contato quando se utiliza o esquema padrão de tratamento da função marcadora nos contornos do domínio. Os parâmetros utilizados buscam replicar o trabalho de Patel et al. (2017), e são mostrados na tabela a seguir.

Tabela 4.10: Parâmetros utilizados nas simulações do teste 1 sem fronteira imersa

Parâmetro	Valor	Unidade
Massa específica	$\rho_w = 1000; \rho_o = 950$	kg/m ³
Viscosidade dinâmica	$\mu_w = 1 \cdot 10^{-3}; \mu_o = 2 \cdot 10^{-2}$	Pa · s
Campo gravitacional	(0,0,0)	m/s ²
Tamanho do domínio	6 x 3 x 6	mm
Malha (lbot)	32 x 16 x 32	célula
Número de níveis	3	-
Malha adaptativa	Sim	-
Crítérios de remalhagem	Densidade (1)	-
CFL	0.2	-
Raio inicial da gota (R_o)	1	mm
Posição inicial da gota (xc,yc,zc)	(3,1,3)	mm

A Fig. 4.14 mostra um isovalor de $\alpha = 0.5$ na condição inicial imposta para as simulações realizadas. É possível observar uma anormalidade próxima à parede, que talvez possa ser melhorada com uma inicialização mais precisa.

Figura 4.14: Inicialização da fração volumétrica na simulação realizada.



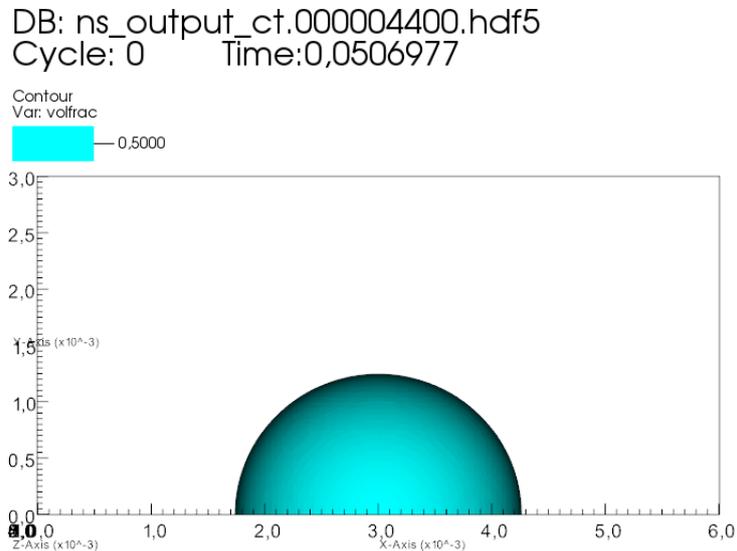
Fonte: elaborada pelo autor.

O isovalor $\alpha = 0.5$ é mostrado na Fig. 4.15 para o instante em que a gota atinge a posição de equilíbrio. É possível observar na figura uma interface suave, sem irregularidades nas regiões próximas ou distantes das paredes.

Após a simulação, os resultados foram comparados com os valores analíticos buscando validar os resultados. A comparação entre a forma analítica da gota em equilíbrio para $\theta_s = 90^\circ$ e $EO = 0$ e o resultado computacional é mostrada na Fig. 4.16.

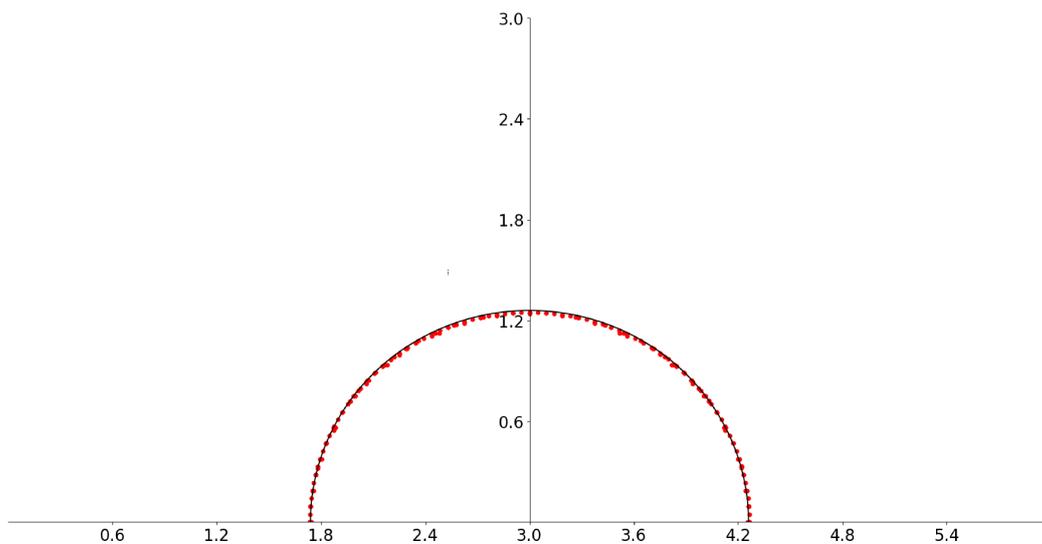
Também foram analisados os erros relativos aos valores de h_f e r_f , comparando os valores analíticos aos valores numéricos obtidos na simulação computacional, além

Figura 4.15: Isocontorno $\alpha = 0.5$ no instante em que a gota atinge a posição de equilíbrio para o caso em que $\theta_s = 90^\circ$ e $EO = 0$.



Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.16: Comparação entre a solução analítica (linha preta) e o resultado numérico (pontos vermelhos) para o caso em que $\theta_s = 90^\circ$ e $EO = 0$, sem a utilização de modelagem para ponto de contato triplo.



Fonte: elaborada pelo autor.

de uma análise de erro apresentada por Patel et al. (2017), a qual é calculada como

$$Ey = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|y_{i,\alpha=0.5} - y_{i,analitico}|}{R_f}, \quad (4.19)$$

onde N é o número de pontos analisados, y_i é o valor da coordenada na direção y e R_f é dado pela Eq. (4.16). É importante ressaltar que todos os erros foram analisados em um plano $x - y$ localizado em $z = 0.003$ m.

Os valores dos erros são apresentados na Tab. 4.11.

Tabela 4.11: Erros relativos para h_f e r_f no caso da gota em equilíbrio para $\theta_s = 90^\circ$ e $Eo = 0$, sem a utilização de modelagem para ponto de contato triplo.

Variável	Erro (%)
h_f	0.89
r_f	0.32
Ey	9.02

Conforme pode ser observado na Fig. 4.16 e na Tab. 4.11, os resultados para o caso simulado foram satisfatórios, apresentando boa concordância na localização da interface além de baixos valores para o erro relativo. Cabe ressaltar novamente que nesta simulação não foi utilizada nenhuma modelagem que leve em conta ângulo de contato.

4.2.4.2 Caso com consideração do campo gravitacional ($Eo > 0$)

Na seção anterior foram apresentados os resultados para um caso onde $Eo = 0$. Conforme pode ser observado na Eq. (4.15), a desconsideração do campo gravitacional leva a essa condição. Na seção atual serão apresentados resultados para casos com $Eo > 0$. Tais condições foram obtidas considerando o campo gravitacional $\vec{g} = (0, 0, -9, 81)$ [m/s²] e atuando na tensão interfacial σ para chegar aos valores desejados do número de Eötvös.

Em números de Eötvös mais altos ($Eo \gg 1$) a gota forma uma poça sob a influência da gravidade, nesse cenário, a altura da gota passa a ser dada pela seguinte expressão:

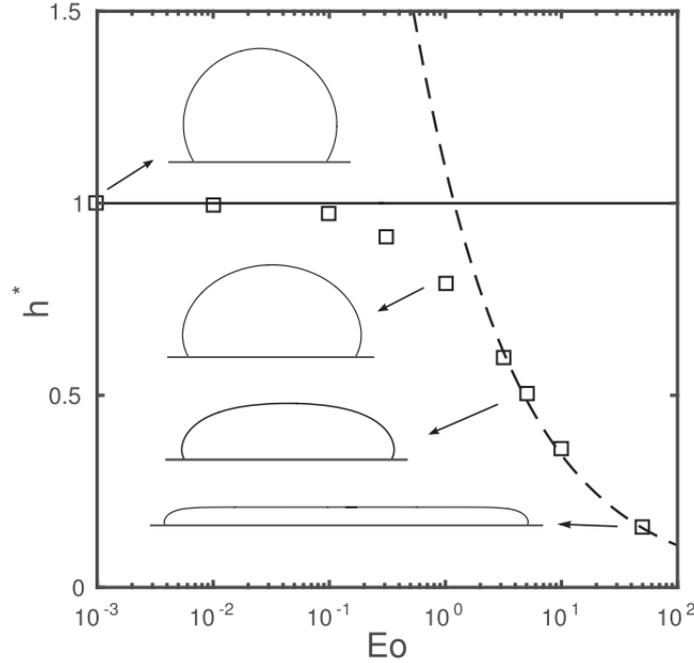
$$h_\infty = 2 \sqrt{\frac{\sigma}{(\rho_1 - \rho_2)g}} \text{sen} \left(\frac{\theta_s}{2} \right). \quad (4.20)$$

Como pode ser observado na Fig. 4.17, a partir de valores de Eo acima de 3, a Eq. (4.20) representa de forma mais precisa a altura da gota na posição de equilíbrio. Além disso, pelas representações de forma da gota é possível identificar que o ângulo θ_s pode ficar mais próximo ou mais distante de 90° , a depender do número de Eötvös que caracteriza o sistema.

Na Fig. 4.18 é apresentada a comparação da altura adimensional obtida via simulação computacional no MFSim com o valor analítico para casos em que $\theta_s = 90^\circ$ e $Eo > 0$.

Todos os parâmetros utilizados nas simulações computacionais realizadas correspondem aos apresentados na Tab. 4.10, exceto o campo gravitacional, que agora é

Figura 4.17: Formas de gota de equilíbrio e altura de gota adimensional h^* em uma superfície plana com número de Eötvös: resultados numéricos de Patel et al. (2017) (\square), soluções assintóticas da Eq. (4.17) (—) e Eq. (4.20) (---).



Fonte: (PATEL et al., 2017).

considerado. É importante ressaltar que nenhum tratamento para o ponto de contato tripo foi utilizado. A condição de contorno do MFSim para a interface recupera um caso onde $\theta_s = 90^\circ$. Além disso, a interface da gota foi inicializada na posição de equilíbrio para 90° em um sistema caracterizado por $Eo = 0$, semelhante à interface apresentada na Fig. 4.15.

A altura adimensional (h^*) corresponde à razão entre a altura calculada para o valor simulado (Eq. (4.20) para $Eo \gg 1$) e esta mesma altura calculada por meio da Eq. (4.17) para um caso em que $Eo = 0$. Ou seja,

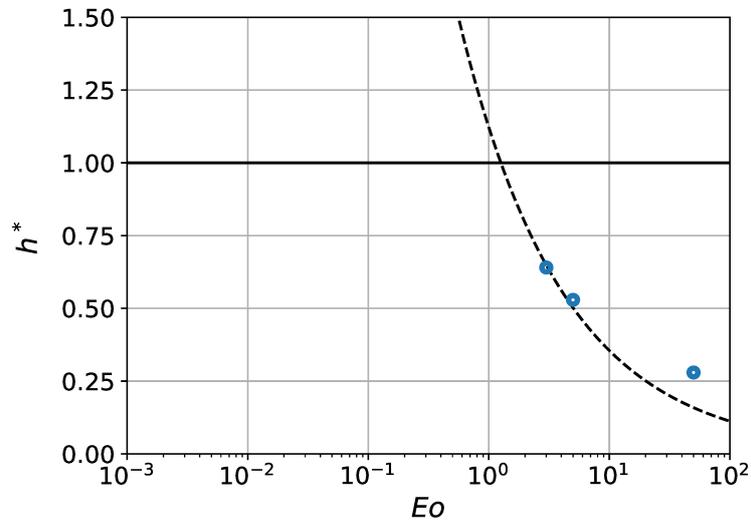
$$h^* = \frac{h_\infty}{h_f} = \frac{2}{R_f(1 - \cos(\theta_s))} \sqrt{\frac{\sigma}{(\rho_1 - \rho_2)g}} \operatorname{sen}\left(\frac{\theta_s}{2}\right), \quad (4.21)$$

a qual pode ser manipulada algebricamente para que a expressão esteja em função do número de Eötvös que caracteriza o sistema.

Foram avaliados os resultados para três valores diferentes do número de Eötvös (3, 5 e 50), obtidos pela manipulação no valor da tensão interfacial entre fluidos, conforme explicado anteriormente. Sendo assim, todas as alturas são calculadas por meio da Eq. (4.20) e consideraram o ângulo de contato $\theta_s = 90^\circ$, tanto no cálculo analítico quanto na representação do contato tripo da simulação computacional.

Conforme pode ser observado na Fig. 4.18, nas simulações caracterizadas por um número de Eötvös mais próximo de 1, os resultados da simulação estão mais aderentes à curva, porém, para $Eo = 50$, o valor obtido via simulação computacional apresenta uma diferença maior para a curva analítica.

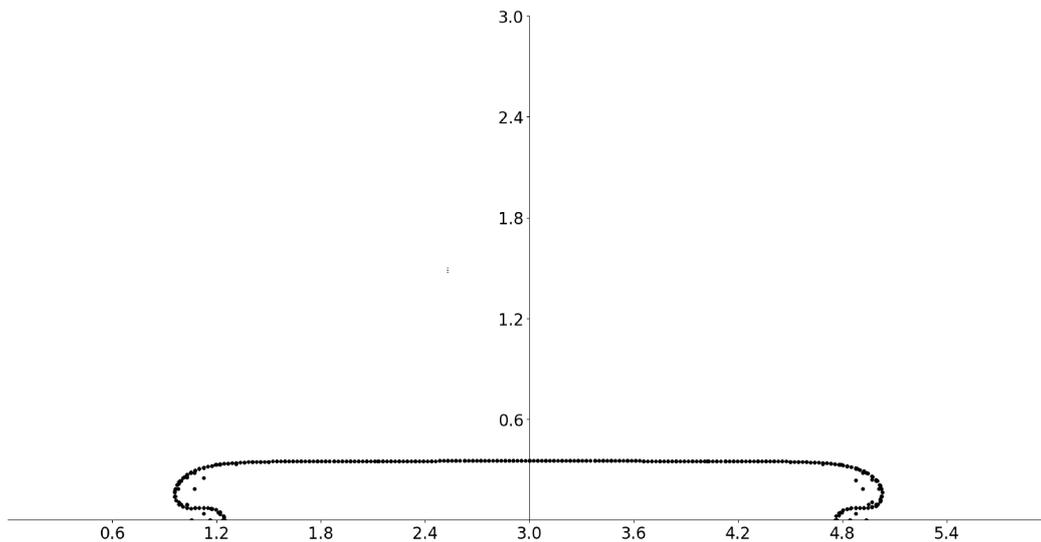
Figura 4.18: Comparação da altura obtida via simulação computacional com o valor analítico para casos em que $\theta_s = 90^\circ$ e $EO > 0$.



Fonte: elaborada pelo autor.

Além da análise da altura por meio do gráfico, é interessante observar o formato da interface obtido na simulação. Na Fig. 4.19 é apresentada a interface, extraída no centro do domínio, obtida para a gota em posição de equilíbrio em um sistema caracterizado por $EO = 50$ simulado com o MFSim.

Figura 4.19: Interface obtida para a gota em posição de equilíbrio em um sistema caracterizado por $EO = 50$ simulado com o MFSim.

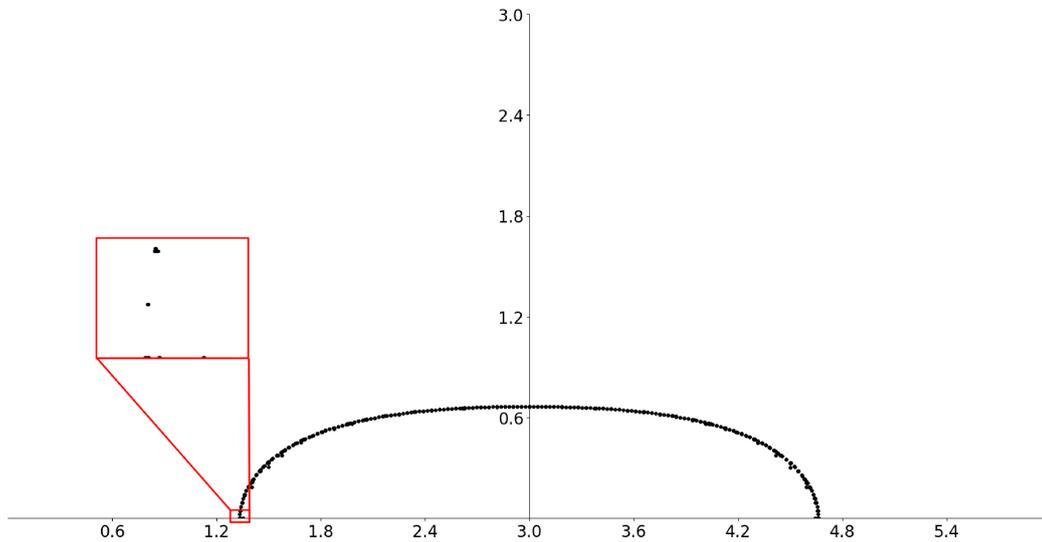


Fonte: elaborada pelo autor.

De acordo com o gráfico da Fig. 4.18 já não era esperado um bom resultado para esse cenário, porém, observando a figura nota-se que a interface da gota sofreu uma deformação severa na região próxima à parede.

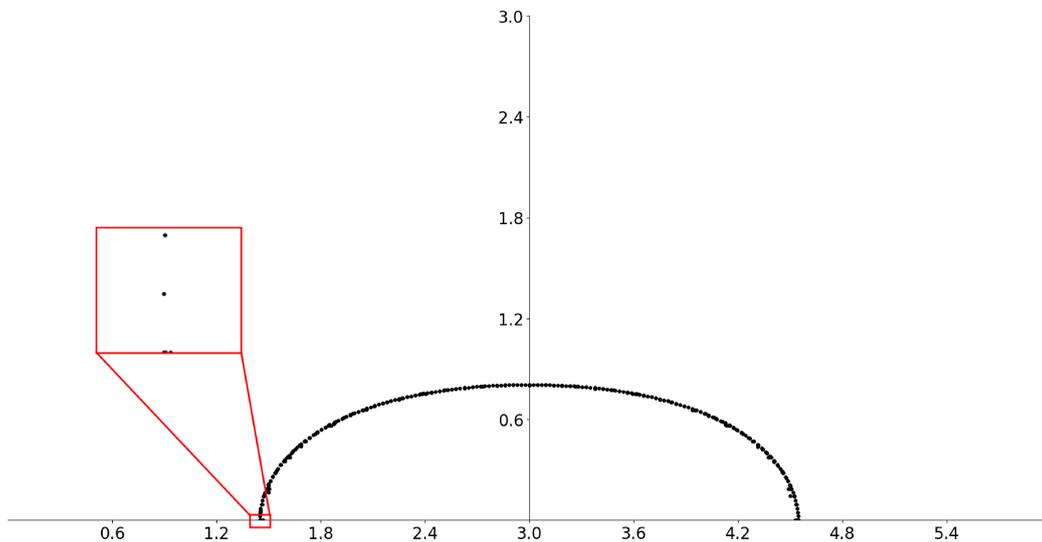
Nas Figs. 4.20 e 4.21 são apresentadas as interfaces, extraída no centro do domínio, obtidas para a gota em posição de equilíbrio em sistemas caracterizados, respectivamente, por $Eo = 5$ e $Eo = 3$ simulados com o MFSim.

Figura 4.20: Interface obtida para a gota em posição de equilíbrio em um sistema caracterizado por $Eo = 5$ simulado com o MFSim.



Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.21: Interface obtida para a gota em posição de equilíbrio em um sistema caracterizado por $Eo = 3$ simulado com o MFSim.



Fonte: elaborada pelo autor.

No retângulo vermelho das Figs. 4.20 e 4.21 é apresentado um zoom da região próxima à parede onde a gota está apoiada e que nas simulações foi modelada como uma condição de contorno de gradiente nulo. É possível observar que a interface não desliza na parede a partir de uma determinada coordenada, tendo efeito semelhante a

um agarramento. É possível observar também que a zona onde este comportamento acontece é maior para o caso com $Eo = 5$ que para o caso com $Eo = 3$.

Diante do estudo apresentado ao longo desta seção é possível concluir que a ausência de uma modelagem direcionada ao ponto triplo de contato (duas fases fluidas e sólido) possui impactos diferentes dependendo das características do sistema. Quanto maior o número de Eötvös, por exemplo, maior o impacto da ausência desse tratamento, porém, em sistemas caracterizados por valores mais moderados desse parâmetro adimensional, pode ser aceitável não tratar o ponto triplo de contato. O cenário ideal para uma representação acurada da interação entre as fases fluidas e o sólido porém, consiste em considerar uma modelagem para o ponto triplo com ângulo de contato dinâmico (RIBERA et al., 2015).

4.3 Aplicação: estudo da transição de escoamentos estratificados para pistonados em um canal plano

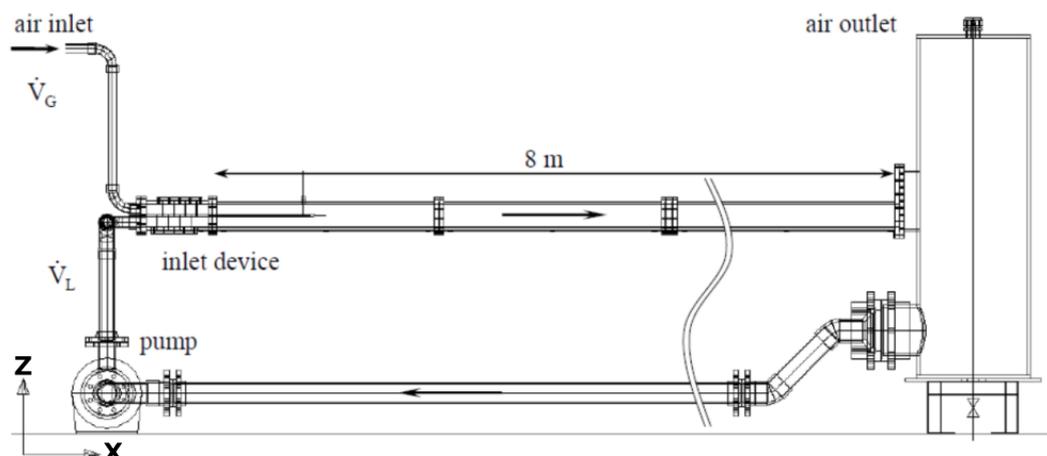
Inicialmente o código MFSim foi utilizado para simular um escoamento em regime de slug ocorrendo em um duto horizontal de seção retangular. As simulações computacionais foram baseadas em um experimento material no qual também é baseado o trabalho de Lu (2015). Inicialmente será detalhado o experimento material e a seguir serão apresentados os resultados obtidos com o código MFSim, bem como a comparação dos resultados com os obtidos por meio de outros códigos de CFD e que são apresentados na literatura.

4.3.1 Detalhamento do experimento material

O experimento material utilizado como base para as simulações computacionais foi realizado no Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD), laboratório localizado na Alemanha. O duto de seção retangular do experimento possui dimensões de 8000 mm x 30 mm x 100 mm, ou seja, uma razão de aspecto $L/D_h = 173$. A velocidade superficial da água e do gás são, respectivamente, 1 m/s e 5 m/s. Na entrada do duto existe uma placa de 500 mm dividindo as duas correntes na entrada fazendo com que a altura (eixo Z) de cada fase na entrada seja de 50 mm. O modelo diagramático do experimento é apresentado na Fig. 4.22.

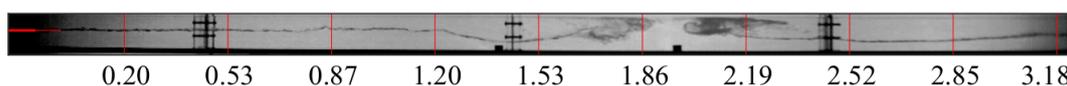
No experimento material foram posicionadas seis sondas para monitoramento da altura da água ao longo do tempo, elas foram posicionadas a 0.20 m, 0.53 m, 0.87 m, 1.20 m, 1.53 m, 1.86 m, 2.19 m, 2.52 m, 2.85 m e 3.18 m da entrada das fases após a placa separadora, conforme pode ser observado na Fig. 4.23. Além disso, foi monitorado também o local de formação do primeiro *slug*. Portanto, as comparações serão realizadas com base nesses resultados.

Figura 4.22: Modelo diagramático do experimento material realizado no FZD.



Fonte: (VALLÉE et al., 2010)

Figura 4.23: Representação das seções onde foram avaliados os níveis de água no experimento material.



Fonte: (VALLÉE et al., 2010)

4.3.2 Detalhamento da simulação computacional utilizando o código MFSim

Para a simulação computacional utilizando o código MFSim foram utilizados os dados relativos ao experimento material, visando reproduzir da maneira mais fiel possível o experimento material. Abaixo são detalhadas as propriedades utilizadas na simulação computacional:

- Reprodução do experimento realizado no Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD), Alemanha;
- Par de fluidos: água-ar;
 - $\rho_{\text{água}} = 1000 \text{ kg/m}^3$;
 - $\rho_{\text{ar}} = 1,226 \text{ kg/m}^3$;
 - $\mu_{\text{água}} = 1,137 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$;
 - $\mu_{\text{ar}} = 1,78 \times 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$;
 - $\sigma = 0,07 \text{ N/m}$;
- Campo gravitacional: $-9,81 \text{ m/s}^2$ na direção z ;
- Domínio com dimensões de $8000 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$;
- Modelagem bifásica Euler-Euler: Volume of Fluid (VoF):

- Modelo para estimativa de curvatura: *Heigth function* + Shirani;
- Equações de transporte na forma não-conservativa;
- Discretização temporal: Euler;
- Esquema advectivo para Navier-Stokes: Cubista;
- CFL = 0,25;
- Solver de velocidade: SIP;
- Solver de pressão: biblioteca PETSc:
 - Pré-condicionador: HYPRE;
 - Solver: BiCGStab (Stabilized version of BiConjugate Gradient) method;
 - Tolerância: $0,5 \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)^2$;
- Modelagem de fechamento da turbulência: k- ϵ padrão;
- Tratamento do modelo de fechamento da turbulência na parede: two-layer;
- Solver das equações de transporte de k e ϵ : multigrid multinível;
- Esquema advectivo para equações da turbulência: *upwind* de 1ª ordem.

As velocidades superficiais para as fases líquida e gasosa neste caso são, respectivamente, $U_L = 1,0$ m/s e $U_G = 5,0$ m/s (VALLÉE et al., 2008), que levam a $V_I = 6,0$ m/s.

Nas simulações desse caso realizadas no MFSim não foi utilizada a técnica de malha adaptativa. Após análises a priori considerando as dimensões do domínio e o número de células no nível base, constatou-se que, para as configurações do caso escolhido, o custo do método poderia ser incompatível com os ganhos apresentados em termos de resultados. Cabe observar que, após a transição do escoamento estratificado para o padrão pistonado, a malha do nível mais fino na interface entre fluidos cobriria grande parte do domínio. Sendo assim, a exploração de técnicas que tornem viável o uso de malhas adaptativas nesse tipo de caso é um tópico interessante a ser explorado em trabalhos futuros.

Além das propriedades físicas e computacionais, o trabalho de Lu (2015) e, principalmente, o de Frank (2005), relatam a importância de se reproduzir as perturbações injetadas no experimento material pela presença da placa na entrada, de bombas e outros fatores externos. Uma boa modelagem das perturbações pode ajudar a obter resultados mais próximos aos obtidos no experimento material. Porém, para este caso foram realizados testes visando observar a influência das perturbações na formação do primeiro slug e no sinal de holdup. Foram realizadas simulações inserindo uma perturbação inicial na interface ou altura variável para a entrada de fluido mas não foram observadas diferenças significativas em relação aos resultados sem a modelagem de perturbações, portanto, optou-se por manter a configuração das simulações de Vallée et al. (2008). Sendo assim, os resultados apresentados a

seguir são de simulações com condições iniciais e de entrada considerando altura constante da interface $z_i = 50$ mm.

Outro ponto analisado foi a interferência de se utilizar condição de simetria na direção Y (conforme a Fig. 4.22). A mesma simulação foi realizada com o domínio completo e com condição de simetria, o que reduz o número de células a metade. Ao se analisar os resultados obtidos observou-se que não haviam diferenças significativas com o uso da condição de simetria, portanto optou-se por utilizá-la. Na Tab. 4.12 são apresentadas as condições de contorno em cada face.

Para as variáveis do modelo de turbulência utilizado ($k - \epsilon$ padrão), o cálculo de k para a condição de contorno na entrada (x_{min}) é obtida por meio da expressão

$$k = \frac{3}{2}(U I)^2, \quad (4.22)$$

onde U é a velocidade do fluido, a qual é diferente no líquido e no gás, e I é a intensidade turbulenta. Essa quantidade pode ser definida através de um valor obtido em experimento material ou por meio da expressão

$$I = 0,16 Re_{DH}^{-1/8}, \quad (4.23)$$

sendo Re_{DH} o número de Reynolds baseado no diâmetro hidráulico.

A obtenção do valor de ϵ para as condições iniciais e de contorno pode ser realizada baseando-se no valor de k através da expressão

$$\epsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{l_s} \quad (4.24)$$

onde C_μ é uma constante e l_s é um comprimento característico do escoamento. No presente trabalho utilizou-se $l_s = 0,07 D_H$, sendo D_H o diâmetro hidráulico da tubulação.

Cabe ressaltar que os valores das propriedades são considerados de maneira pontual, ou seja, em regiões onde a tubulação está preenchida com gás são utilizadas as propriedades do gás nos cálculos das propriedades, em regiões preenchidas por líquido são consideradas as propriedades do líquido.

Tabela 4.12: Condições de contorno utilizadas na simulação do *slug* retangular.

Face	Velocidade	Pressão	k	ϵ	α
x_{min}	Dirichlet	Neumann	Dirichlet	Dirichlet	Dirichlet
x_{max}	Advectiva	Neumann	Neumann	Neumann	Neumann
y_{min}	<i>No-slip</i>	Neumann	$k = 0$	Neumann	Neumann
y_{max}	Simetria	Neumann	Neumann	Neumann	Neumann
z_{min}	<i>No-slip</i>	Neumann	$k = 0$	Neumann	Neumann
z_{max}	<i>No-slip</i>	Neumann	$k = 0$	Neumann	Neumann

As condições de Neumann da Tab. 4.12 se referem à imposição de derivada nula para a propriedade na face indicada.

Para a simulação da transição entre os padrões estratificado e *slug* no duto de seção retangular foram utilizadas seis configurações distintas de malha, alterando o espaçamento da malha e também a razão entre os espaçamentos nas direções x e z ($\Delta x/\Delta z$). A análise de diferentes razões de espaçamento foi realizada pois, teoricamente, o refinamento da malha na seção transversal é mais importante que o refinamento ao longo do comprimento. As características de cada configuração de malha utilizada estão representadas na Tab. 4.13.

Tabela 4.13: Configurações de malha para as simulações realizadas no MFSim.

Identificação	Malha ($N_x \times N_y \times N_z$)	Razão $\Delta x/\Delta z$	Total de elementos
C1	$1600 \times 6 \times 32$	1,6	307 200
C2	$800 \times 6 \times 32$	3,2	153 600
C3	$400 \times 6 \times 32$	6,4	76 800
C4	$3200 \times 12 \times 64$	1,6	2 457 600
C5	$1600 \times 12 \times 64$	3,2	1 228 800
C6	$800 \times 12 \times 64$	6,4	614 400

Como base de comparação, no trabalho de Lu (2015), nas simulações realizadas no código STAR-CCM+ com malha hexaédrica, que também fazem uso de condição de contorno de simetria ($L_y = 15$ mm), foram testadas duas malhas, a primeira com 928 672 elementos e a segunda com 2 217 984. Já na simulação realizada no código comercial CFX não se emprega a condição de simetria ($L_y = 30$ mm) e a malha computacional é composta por, aproximadamente, 1 200 000 elementos. A priori, comparando tais números com os apresentados na Tab. 4.13, as configurações C4, C5 e C6 estão mais próximas das configurações utilizadas pela literatura de referência.

Na seção seguinte serão apresentados os resultados obtidos por meio das simulações realizadas utilizando o código MFSim, bem como comparações de tais resultados com os valores obtidos em outros trabalhos numéricos e experimentais encontrados na literatura.

4.3.3 Resultados das simulações computacionais

O primeiro parâmetro comparado é a distância de formação do primeiro slug em relação à entrada do domínio. Foram retirados do trabalho de Lu (2015) resultados obtidos por meio de simulações computacionais utilizando os códigos CFX, STAR-CCM+ e Fluent.

A simulação com o código CFX foi realizada no trabalho de Vallée et al. (2005) utilizando como modelo de fechamento da turbulência $k-\omega$ padrão junto a uma função de amortecimento na interface (FAI) entre as duas fases. Foi utilizada uma malha hexaédrica com $1,2 \times 10^5$ elementos.

Bartosiewicz, Laviéville e Seynhaeve (2008) realizaram simulações computacionais, utilizando o código Fluent, para reproduzir os resultados do experimento material. Foram realizadas simulações usando como modelo de fechamento da turbulência o $k-\epsilon$ padrão, o $k-\omega$ padrão e o $k-\omega$ SST. É interessante observar que,

segundo Lu (2015), não foi observada a formação de *slugs* nas simulações realizadas utilizando o código Fluent, por esse motivo os resultados não serão apresentados na tabela.

O código STAR-CCM+ foi utilizado por Lu (2015) para realizar os experimentos computacionais. Em seu trabalho são apresentados resultados de várias simulações, porém, foram tomadas como base para comparação apenas aquelas que apresentaram melhores resultados, as quais utilizaram como modelo de fechamento da turbulência o $k-\omega$ SST com uma malha poliédrica de $1,68 \times 10^6$ elementos. São apresentados os resultados utilizando perfis com velocidades constantes na entrada (PU) e com perfis de velocidade desenvolvidos (PD).

Na Tab. 4.14 é apresentada a comparação da distância e do tempo de formação do primeiro slug utilizando os códigos computacionais MFSim, CFX, STAR-CCM+ e Fluent. Os resultados são comparados com os que foram obtidos por meio do experimento material.

Tabela 4.14: Tabela comparativa da distância e do tempo de formação do primeiro slug utilizando os códigos computacionais MFSim, CFX, STAR-CCM+ e Fluent.

Código	Modelagem	Malha	Posição [m]	Erro (%)	Tempo [s]
Experimento	-	-	1,5	-	0,6
CFX	$k-\omega$ + FAI	$1,2 \cdot 10^5$	3,5	133,33	1,65
STAR-CCM+	$k-\omega$ SST + PD	$1,68 \cdot 10^6$	3,45	130,0	2,5
STAR-CCM+	$k-\omega$ SST + PU	$1,68 \cdot 10^6$	3,78	152,0	2,7
MFSim C1	$k-\epsilon$ + PU	$3,07 \cdot 10^5$	1,41	6,0	0,483
MFSim C2	$k-\epsilon$ + PU	$1,53 \cdot 10^5$	1,27	15,33	0,486
MFSim C3	$k-\epsilon$ + PU	$7,68 \cdot 10^4$	1,43	4,67	0,522
MFSim C4	$k-\epsilon$ + PU	$2,45 \cdot 10^6$	1,6	6,67	0,714
MFSim C5	$k-\epsilon$ + PU	$1,22 \cdot 10^6$	1,39	7,33	0,692
MFSim C6	$k-\epsilon$ + PU	$6,14 \cdot 10^5$	1,47	2,0	0,717

Os resultados expostos na Tab. 4.14 permitem algumas observações interessantes. Em linhas gerais os resultados obtidos com os códigos CFX e STAR-CCM+ apresentam mais de 100% de erro tanto para a posição quanto para o tempo de formação do 1º *slug* quando comparados com os resultados do experimento material. Por outro lado, os resultados das simulações realizadas com o MFSim apresentaram erros pequenos em relação aos demais códigos citados.

Antes das observações relativas aos resultados obtidos com o código MFSim é importante relembrar que a diferença entre as simulações C1, C2 e C3 é apenas a razão $\Delta x/\Delta z$ e o mesmo ocorre entre as simulações C4, C5 e C6. Além disso, as configurações C4, C5 e C6 possuem espaçamento de malha correspondentes à metade dos utilizados nas configurações C1, C2 e C3, respectivamente, conforme pode ser constatado na Tab. 4.13.

O erro relativo à posição de formação do 1º *slug* possui o mesmo comportamento nos conjuntos C1, C2, C3 e C4, C5, C6, aumentando das configurações com razão $(\Delta x/\Delta z)$ de 1,6 para as de 3,2 e diminuindo da razão de 3,2 para a de 6,4.

Sendo assim, é possível observar que as configurações com a razão $\Delta x/\Delta z = 3,2$ apresentaram os maiores valores de erro para a posição de formação do 1º slug.

Outro comportamento observado é que ao refinar as malhas com razão de 3,2 e 6,4 o erro se torna duas vezes menor, porém, o mesmo comportamento não é observado quando se usa a razão de 1,6.

Diante das observações realizadas anteriormente é possível concluir que os resultados mais consistentes foram observados na malha onde $\Delta x/\Delta z = 6,4$. A princípio este não era o resultado esperado. Acreditava-se que o código teria melhor desempenho na malha com razão de 1,6. Porém, esse comportamento pode ser explicado considerando que perturbações foram geradas no escoamento por meio dos erros numéricos inerentes aos métodos e à configuração utilizada. Essas perturbações, de natureza numérica, inseridas na simulação computacional podem ter modelado de forma satisfatória as instabilidades presentes no experimento material. Entretanto, cabe ressaltar que esta não é uma forma adequada de aproximação devido à impossibilidade de reprodução em outros códigos computacionais.

É importante ressaltar que reproduzir com perfeição um escoamento turbulento no tempo e no espaço simultaneamente apresenta grande nível de dificuldade já que a interação entre as estruturas presentes envolve diversas fontes de não-linearidade. Porém, de forma geral, os resultados obtidos com o MFSim se mostraram próximos aos valores experimentais tanto no tempo quanto na posição de formação do primeiro slug. Porém, o acesso à faixa de erro observada no experimento material seria importante para análises mais conclusivas em relação ao tempo e à posição de formação do primeiro slug.

Durante o experimento material utilizado como referência, foram capturados, nas seções apresentadas na Fig. 4.23, os níveis de água ao longo do tempo nos primeiros 2,5 segundos de análise. Esses sinais foram comparados com os resultados obtidos nos primeiros 2,5 segundos físicos das simulações computacionais utilizando as configurações de malha C1, C2 e C3. A comparação entre os sinais é apresentada na Fig. 4.24, onde a linha azul representa o sinal capturado no experimento material, a linha laranja o resultado obtido com a configuração de malha C1 e as linhas verde e vermelha os níveis de água ao longo do tempo nas simulações com as configurações C2 e C3, respectivamente. Por meio da observação dos sinais apresentados na Fig. 4.24, é possível realizar algumas constatações.

A primeira observação a ser realizada é quanto ao amortecimento do sinal nas diferentes configurações de malha, onde o sinal relativo a C3 parece ser mais amortecido em comparação com os outros sinais. Esse comportamento é esperado, já que essa configuração corresponde à malha mais grosseira dentre as consideradas. Em uma análise qualitativa, o sinal correspondente à configuração C1, a qual representa a malha mais refinada dentre as apresentadas na Fig. 4.24, possui características mais próximas às do sinal correspondente ao experimento material.

Quanto à condição inicial e ao sinal observados nos primeiros 0,4 segundos dos gráficos, é possível observar que o comportamento do sinal capturado no experimento material difere dos resultados das simulações computacionais. Essa diferença pode ser explicada pela dificuldade, ou impossibilidade, de se reproduzir no experimento material uma condição onde o gás e o líquido possuem fração volumétrica constante ao longo de todo o domínio. No *loop* real é necessário que as medições comecem a

ser realizadas um tempo após o aparato ser ligado, visando eliminar interferências do regime transiente inicial.

A análise e comparação do sinal temporal é complexa e pode não ser conclusiva. Portanto, seguindo o procedimento observado nos trabalhos de Lu (2015) e Vallée et al. (2008) e recomendado no relatório técnico relativo ao experimento material, foram analisadas também as propriedades estatísticas do sinal, considerando o valor médio e o desvio padrão de cada sinal apresentado na Fig. 4.24.

No gráfico da Fig. 4.25 é apresentada a comparação do nível médio de água ao longo dos primeiros 2,5 segundos de simulação com os resultados do experimento material nas seções previamente mostradas na Fig. 4.23. No gráfico, além dos valores médios obtidos no experimento material (linha preta contínua) são apresentadas as regiões da média acrescida e subtraída do valor identificado de desvio padrão (linhas pretas tracejadas). Na figura é possível observar que os resultados médios obtidos com as configurações de malha C1, C2 e C3 foram muito parecidos na maioria das seções, exceto em 1,2 m e 1,53 m, onde as configurações C1 e C2 apresentaram valores mais próximos da média observada no experimento material. Esse resultado está alinhado ao comportamento esperado a princípio e, sendo analisado junto à posição de formação do 1º *slug*, demonstram que a malha com razão $\Delta x/\Delta z = 1,6$ apresentou os melhores resultados.

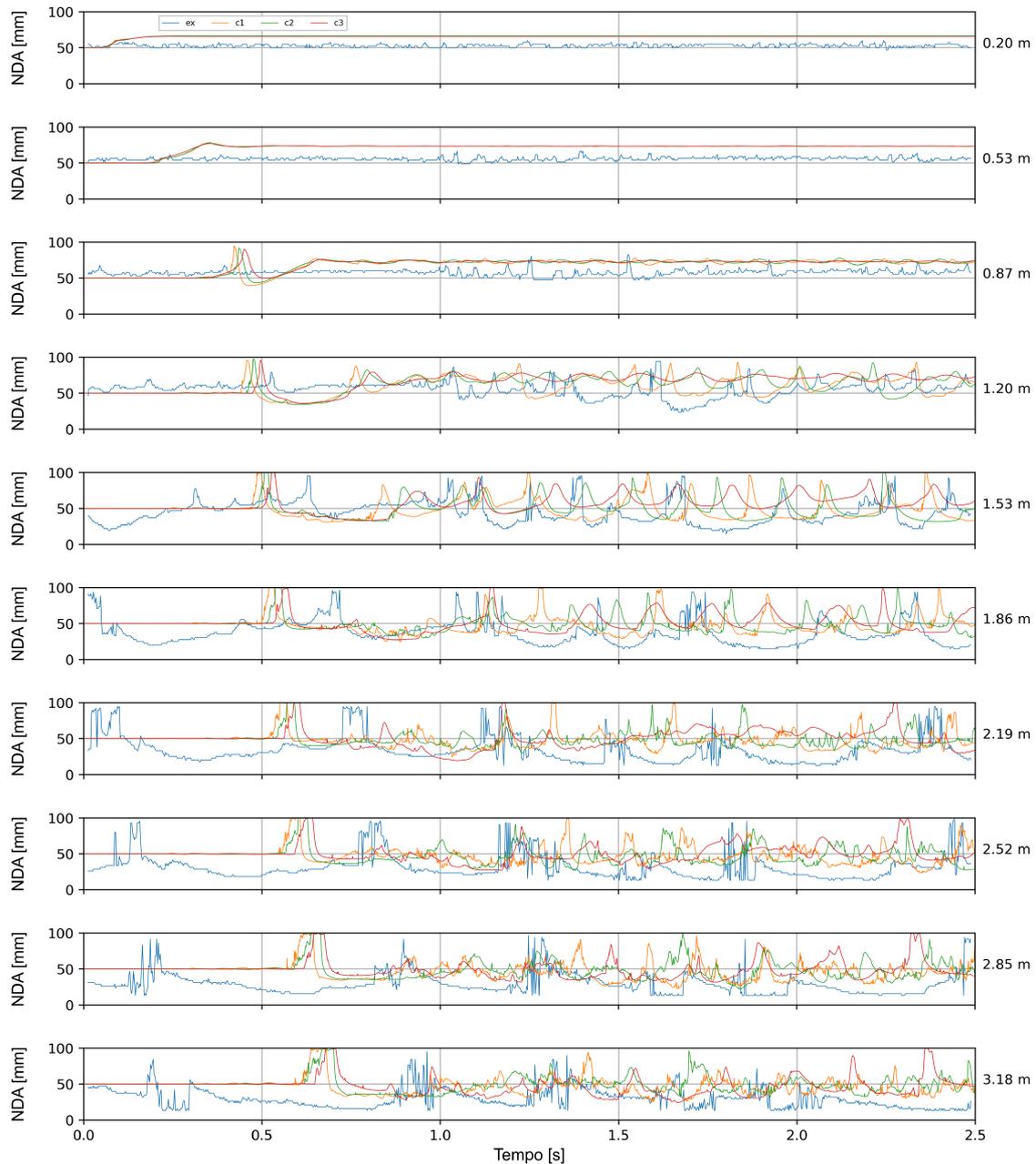
A comparação do nível médio de água entre as configurações C3 e C6 é apresentada na Fig. 4.26, onde é possível observar uma melhoria ao se diminuir o espaçamento da malha, principalmente na seção mais próxima à placa de entrada (0,2 m). Os valores nas seções a 2,19 m, 2.52 m e 2.85 m também ficaram mais próximos dos valores médios observados no experimento material com a configuração C6. Apesar da aproximação dos resultados em relação à média experimental, é possível observar também que o comportamento geral foi mantido, com os pontos relativos a seções distando menos que 1,5 m da placa estando fora da zona que considera média alterada pelo desvio padrão e os pontos em seções a mais de 1,5 m estando dentro dessa zona, apesar de estarem próximos aos limites definidos pelo valor médio acrescido pelo desvio padrão.

Além da comparação dos valores médios do nível de água, foi realizada também uma análise no domínio da frequência utilizando a *Fast Fourier Transform* (FFT) do nível de água ao longo do tempo na seção que dista 3,18 m da entrada de fluido (ou da placa para o experimento material). A FFT exige um sinal com passo de tempo constante, característica não identificada no sinal obtido por meio das simulações numéricas onde o passo de tempo é calculado com base nas restrições. Por isso, todos os sinais foram interpolados, considerando um passo de tempo de 0,0001 s para a construção da FFT.

Com o sinal do nível médio de água da seção no domínio da frequência, foram identificadas as frequências com maior amplitude de cada sinal em relação ao valor obtido no experimento material. Os resultados são apresentados na Tab. 4.15.

De acordo com os valores de erro relativo observados na Tab. 4.15 para a frequência com maior amplitude identificada na FFT do nível médio de água na seção que dista 3,18 m da entrada de fluido, é possível observar que o resultado mais próximo ao observado no experimento material foi obtido por meio da simulação computacional com configuração de malha C1, ou seja, com razão $\Delta x/\Delta z = 1,6$,

Figura 4.24: Nível de água ao longo do tempo nos primeiros 2,5 segundos de escoamento nas seções apresentadas na Fig. 4.23. Comparação entre o sinal experimental (azul) e os resultados com as configurações de malha C1 (laranja), C2 (verde) e C3 (vermelha).

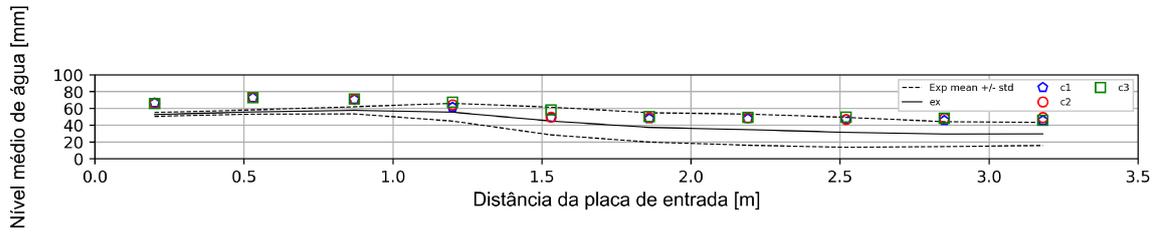


Fonte: elaboradas pelo autor.

seguido pelo resultado da malha C2 e, finalmente, o da configuração C3, o qual apresenta um erro de 100 %.

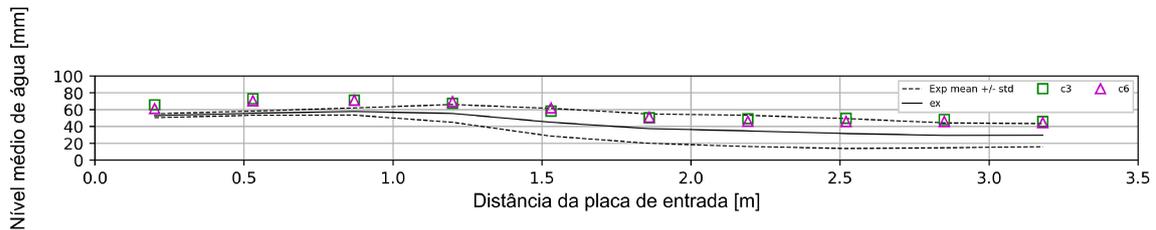
Considerando todos os resultados apresentados anteriormente, pode-se concluir que a configuração de malha C1 apresentou uma boa relação entre número de células (custo computacional) e proximidade dos resultados observados no experimento ma-

Figura 4.25: Comparação dos resultados do nível médio de água obtidos nas simulações com configuração de malha C1, C2 e C3 com os valores experimentais.



Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.26: Comparação dos resultados do nível médio de água obtidos nas simulações com configuração de malha C3 e C6 com os valores experimentais.



Fonte: elaborada pelo autor.

Tabela 4.15: Máxima frequência identificada na FFT do nível médio de água na seção que dista 3,18 m da entrada de fluido. Comparação entre o valor do experimento material e os obtidos nas simulações computacionais com configuração C1, C2 e C3.

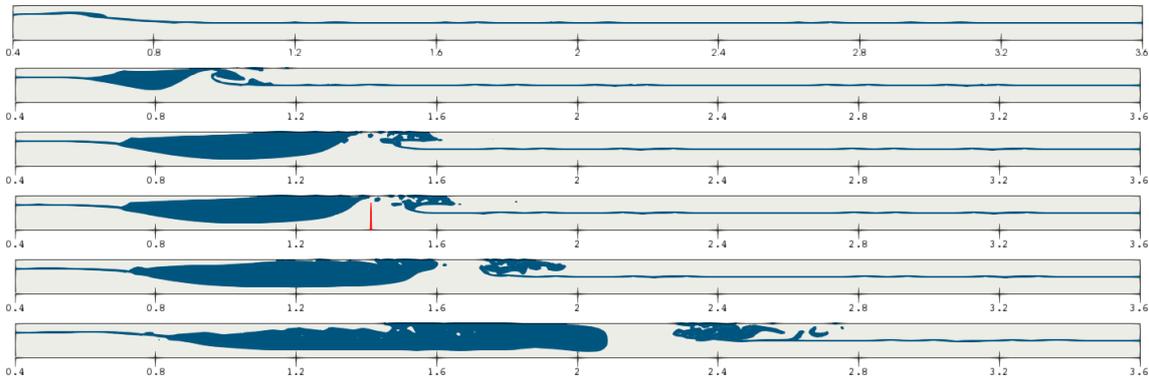
Configuração	Frequência da máxima amplitude [Hz]	Erro relativo (%)
Experimental	2,4	-
MFSim C1	2,8	16,67
MFSim C2	1,6	33,33
MFSim C3	4,8	100,0

terial. Sendo assim, essa configuração pode ser utilizada para avaliação da inclusão de modelagens adicionais como modelagem de contato triplo (parede-gás-líquido), tratamentos interfaciais (HÖHNE; MEHLHOOP, 2014) e de *entrainment* de gotas (HÖHNE; HÄNSCH, 2015).

Por fim, na Fig. 4.27, é apresentada a visualização da interface entre $x = 0,4$ m e $x = 3,6$ m na malha C1 em um corte a partir de $y = 15$ mm.

A visualização da interface foi extraída por meio de um contorno de fração volumétrica 0,5 que, na metodologia VOF, representa a interface. Sendo assim, as partes completamente preenchidas pela cor azul representam o líquido que está escoando nas paredes laterais da tubulação. Uma linha vermelha foi colocada na imagem correspondente ao instante de tempo onde o 1º *slug* se formou ($t = 0,483$ s) como forma de se identificar a posição de formação do mesmo ($x = 1,41$ m). O critério utilizado para a demarcação da posição de formação do *slug* foi a primeira

Figura 4.27: Visualização da interface (colorida pela cor azul) entre $x = 0,4$ m e $x = 3,6$ m na configuração de malha C1.



Fonte: elaboradas pelo autor.

posição, partindo de $x = 0$ m, onde não se identifica a presença de interface entre o gás e o líquido, ou seja, onde a seção transversal está completamente preenchida por líquido.

Perante a análise dos resultados obtidos através das simulações realizadas com o MFSim e a comparação com resultados encontrados na literatura, é possível afirmar que não foram encontrados resultados com tal proximidade em relação aos dados experimentais para escoamentos do padrão *slug* acontecendo em dutos de seção retangular.

4.4 Aplicação: estudo da transição de escoamentos estratificados para pistonados em tubulações de seção circular

A simulação computacional do escoamento em regime de slug para dutos de seção circular utilizando o MFSim é mais complexa já que se trata de um código baseado em uma estrutura de malha bloco estruturada hexaédrica, portanto, para a simulação de geometrias não cartesianas é preciso utilizar um método de fronteira imersa, nesse caso o Multi-Direct Forcing (MDF) apresentado na seção 3.5.

Ao longo da presente seção, serão detalhadas as simulações realizadas por Frank (2005) utilizando o código CFX e que foram utilizadas como ponto de partida para o estudo desse caso. Serão expostos também os resultados preliminares obtidos utilizando o código MFSim com o modelo de fechamento da turbulência de Smagorinsky constante, um modelo LES. É importante ressaltar que na literatura vasculhada não foram encontrados trabalhos que utilizam um modelo LES puro para a simulação de escoamentos bifásicos no padrão de slug.

4.4.1 Detalhes do trabalho de Frank (2005)

Conforme exposto anteriormente, o trabalho utilizado como ponto de partida para o estudo de escoamentos no padrão de *slug* em dutos horizontais de seção cir-

cular foi o de Frank (2005). Tal publicação é referenciada em diversos trabalhos relativos a *slugs* e tem como objetivo principal demonstrar a importância e propor uma modelagem para as perturbações presentes no escoamento. O experimento material citado pelo autor como referência para a definição de parâmetros e comparação de resultados é o que consta em um relatório interno da Universidade Técnica de Munique, na Alemanha. O relatório foi elaborado por Th. Lex no ano de 2003, com o título "Descrição de um caso de teste para escoamento horizontal de gás-líquido" (*Beschreibung eines Testfalls zur horizontalen Gas-Flüssigkeitsströmung*). O trabalho de Lex não foi encontrado para fins de consulta, sendo assim, foram utilizados apenas dados que constam também no trabalho de Frank.

Em seu trabalho, o autor apresenta os resultados para duas simulações computacionais utilizando o código CFX, uma considerando condição de periodicidade em um domínio menor que o do experimento e outra considerando o domínio completo sem o uso de periodicidade. A Tab. 4.16 fornece informações sobre as simulações realizadas. Ambas as abordagens serão detalhadas nas subseções seguintes. Na Tab. 4.16, D representa o diâmetro da tubulação e L, o comprimento.

Tabela 4.16: Tabela informativa das simulações realizadas por Frank (2005).

	Condição de contorno	D	L	Número de células
1	Periodicidade	0,054	4,0	73 500
2	Entrada/Saída	0,054	8,0	147 000

4.4.1.1 Simulação computacional com condições de contorno periódicas

Para a realização de simulações computacionais aplicando condições de contorno periódicas foi utilizado um domínio com comprimento de 4 m. A seleção do comprimento foi baseada em resultados do experimento material que Frank (2005) utilizou como base, onde observou-se um comprimento aproximado do primeiro slug de 1,4 m.

A distribuição da fração volumétrica das fases líquida e gasosa no domínio computacional foi inicializada com fração volumétrica média de 0,5 em conjunto com uma função senoidal para a modelagem de perturbações no campo inicial. A interface entre os fluidos foi definida de acordo com a função

$$z_I = z_o + A_I \text{sen} \left(2\pi \frac{x}{p_I} \right), \quad (4.25)$$

onde z_o é a coordenada do domínio na direção do eixo z, $A_I = 0,1D$, D é o diâmetro do duto e $p_I = 0,5L$, sendo L o comprimento do duto (direção X das simulações).

As velocidades iniciais tanto da fase líquida quanto da fase gasosa são definidas como $U_G = U_L = 2,0$ m/s, que correspondem a uma velocidade superficial de $v_G = v_L = 1,0$ m/s. Como a simulação computacional considera a periodicidade do domínio, é necessário que se defina um gradiente de pressão, o qual, baseado nos resultados coletados do experimento material, foi definido como $\Delta P = 800$ Pa/m.

4.4.1.2 Simulação computacional com condições de contorno de entrada e saída

Na simulação computacional onde não se considera a condição de periodicidade foi utilizado um duto também com diâmetro de 0,054 m, porém, com um comprimento de 8,0 m, conforme a Tab. 4.16. Esse domínio reproduz o duto utilizado no experimento material, porém foi aplicada condição de simetria, permitindo que se realizasse a simulação de apenas metade do duto, objetivando diminuir o custo computacional da simulação.

Como foram consideradas condições de contorno de entrada e saída no domínio, o autor relata a importância de se aplicar uma função para determinar a altura de entrada das fases. Portanto, o posicionamento da interface na entrada do domínio é definido segundo a função:

$$z_I = z_o + A_I \text{sen} \left(2\pi \frac{V_I \cdot t}{p_I} \right) \quad (4.26)$$

onde V_I é a velocidade característica da interface, t é o tempo físico onde a condição de contorno está sendo avaliada, z_o é a coordenada do domínio na direção do eixo z , $A_I = 0,25D$, D é o diâmetro do duto e $p_I = 0,5L$, sendo L o comprimento do duto. Estes valores são utilizados também para determinar a perturbação no campo inicial através da Eq. (4.25).

As velocidades iniciais tanto da fase líquida quanto da gasosa são definidas como $U_G = U_L = 2,0$ m/s, que correspondem a uma velocidade superficial $v_G = v_L = 1,0$ m/s. O tempo total simulado foi de 7,0 s, utilizando passo de tempo fixo $\Delta t = 0,005$ s. É importante ressaltar também que como não se utiliza a condição de periodicidade, não se aplica um gradiente de pressão imposto, como no caso periódico.

Os resultados obtidos por meio tanto da simulação periódica quanto da não periódica serão abordados em uma seção de resultados subsequentes, sendo comparados com os resultados obtidos através das simulações computacionais utilizando o MFSim.

4.4.2 Simulações no código computacional MFSim

Com base no trabalho de Frank (2005) foram realizadas simulações no código computacional MFSim utilizando tanto um domínio periódico quanto não-periódico. Buscou-se a utilização de todos os parâmetros fornecidos por Frank em seu trabalho. Portanto, as velocidades, as funções de perturbação e o gradiente de pressão imposto são os relatados na seção 4.4.1.

Nas simulações desse caso realizadas no MFSim não foi utilizada a técnica de malha adaptativa. Após análises a priori considerando as dimensões do domínio e o número de células no nível base, constatou-se que, para as configurações do caso escolhido, o custo do método poderia ser incompatível com os ganhos apresentados em termos de resultados. Cabe observar que, na metodologia implementada no MFSim, a superfície lagrangiana (fronteira imersa) deve estar sempre contida no nível mais fino de refinamento e, após a transição do escoamento estratificado para o padrão pistonado, a malha do nível mais fino na interface entre fluidos cobriria

grande parte do domínio, sendo somada à malha sobre o corpo imerso. Sendo assim, a exploração de técnicas que tornem viável o uso de malhas adaptativas nesse tipo de caso é um tópico interessante a ser explorado em trabalhos futuros.

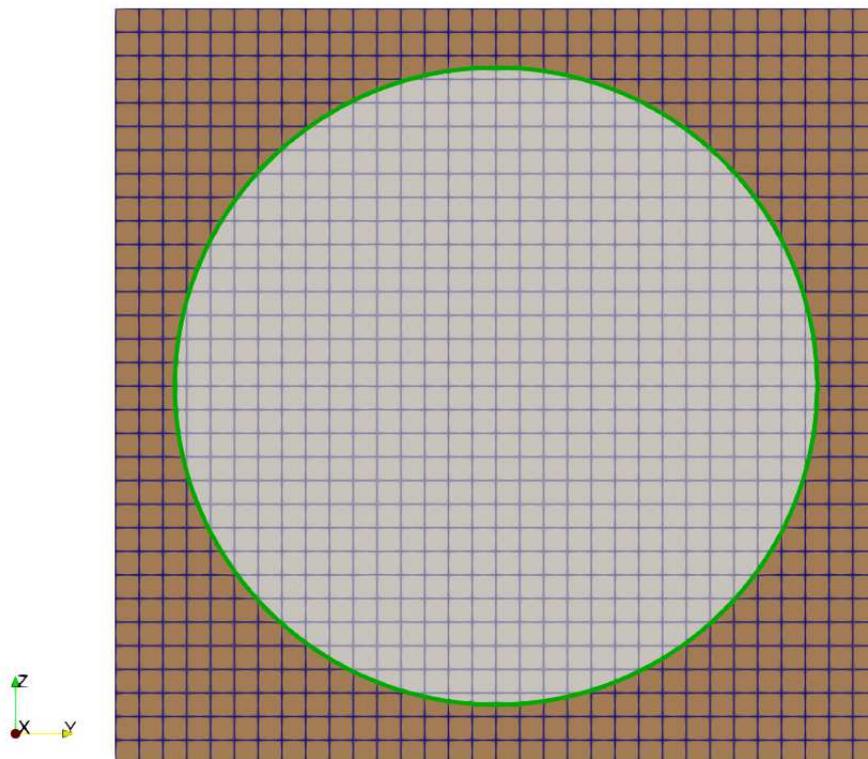
A seguir serão abordados os parâmetros utilizados em cada simulação, a não-periódica e a periódica, respectivamente. Junto à descrição dos parâmetros da simulação serão apresentados os resultados obtidos, bem como a comparação com os resultados de Frank.

4.4.2.1 Caso não-periódico

O primeiro caso simulado no código MFSim visa reproduzir o apresentado na seção 4.4.1.2. Sendo assim, na seção de entrada do domínio foi utilizada a condição de Dirichlet (valor imposto) para as velocidades e para a posição da interface, para pressão foi utilizada condição de contorno impondo-se gradiente nulo (Neumann). Na saída do domínio foi utilizada uma condição de contorno advectiva para as velocidades, a qual apresenta maior estabilidade em casos onde os vetores de velocidade não são normais à seção de saída, e condição de contorno de gradiente nulo para a pressão.

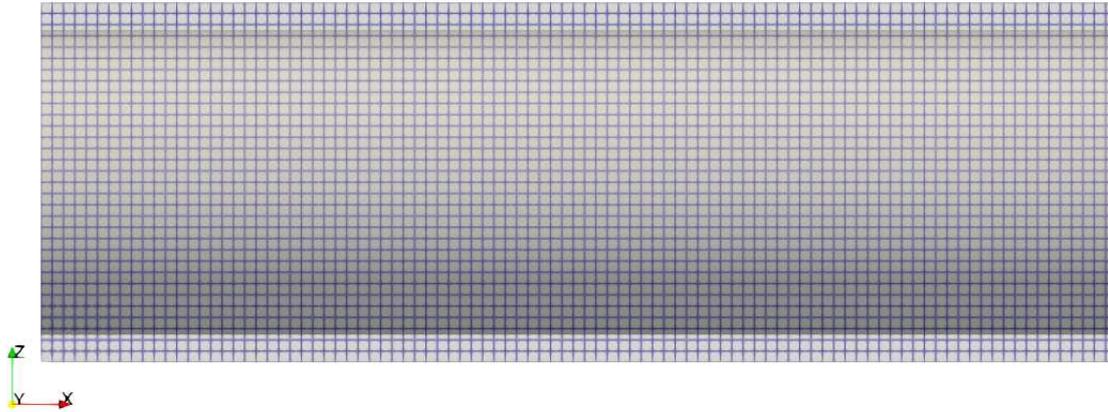
Nas Figs. 4.28 e 4.29 são apresentadas vistas dos planos Y-Z e X-Z, respectivamente. Na Fig. 4.28 são representados também os elementos característicos do método de fronteira imersa

Figura 4.28: Vista do plano Y-Z do domínio simulado. Domínio complementar (região marron), domínio de interesse (região cinza) e superfície imersa (linha verde).



Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 4.29: Vista do plano X-Z do domínio simulado.



Fonte: elaborada pelo autor.

Como se trata de um escoamento interno, na Fig. 4.28, o domínio complementar é o representado pela região marrom, o domínio de interesse é a região cinza e a linha verde representa o contorno da superfície imersa na seção apresentada. Portanto, os valores de velocidade, gradiente de pressão e fração volumétrica são definidos somente no domínio de interesse (região cinza).

Na Tab. 4.17 são apresentadas as condições de contorno (CC) utilizadas para as velocidades e para a pressão em cada face do domínio e seus respectivos valores, ressaltando que u é a componente do vetor velocidade na direção axial do duto (x) e o valor apresentado na tabela só é imposto no interior do duto.

Tabela 4.17: Tabela com as condições de contorno (CC) utilizadas em cada face do domínio para velocidades e pressão na simulação da transição estratificado-slug em uma tubulação circular, sem a consideração de periodicidade.

Face do domínio	CC velocidades	Valor	CC pressão	Valor
$x = 0,0$ m	Dirichlet	$\vec{v} = (2, 0, 0)$ m/s	Neumann	$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$
$x = 8,0$ m	Advectiva	-	Neumann	$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$
$y = 0,0$ m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$
$y = 0,064$ m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$
$z = 0,0$ m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$
$z = 0,064$ m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$

Abaixo são apresentados outros detalhes da simulação computacional realizada:

- Reprodução do caso periódico no trabalho de Frank (2005);
- Par de fluidos: água-ar;

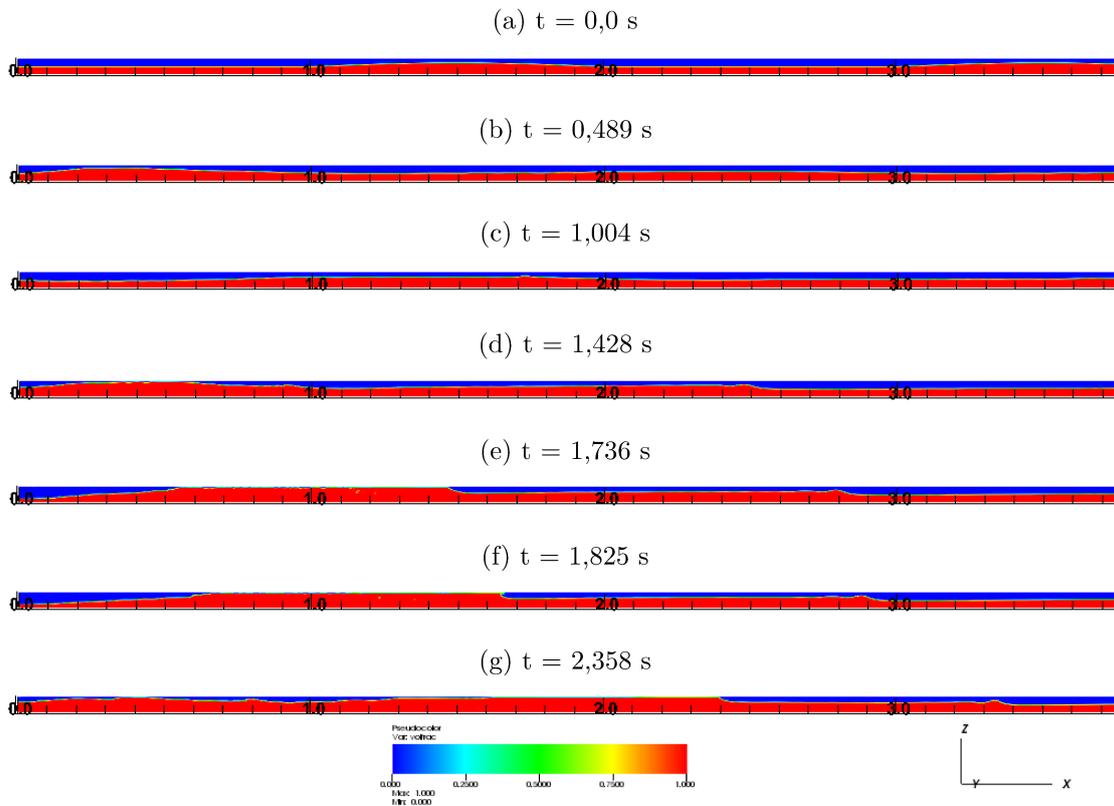
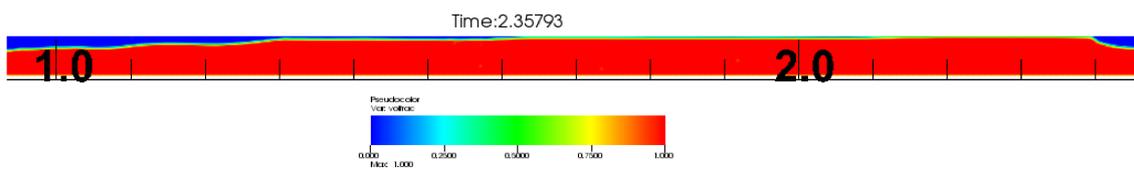
$$- \rho_{\text{água}} = 995 \text{ kg/m}^3, \mu_{\text{água}} = 1,0 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s};$$

- $\rho_{\text{ar}} = 1,0 \text{ kg/m}^3$, $\mu_{\text{ar}} = 1,82 \times 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$;
- $\sigma = 0,07 \text{ N/m}$;
- Campo gravitacional: $(0,0,-9.81) \text{ m/s}^2$;
- Velocidade das fases: $U_G = U_L = 2,0 \text{ m/s}$. Fora do duto as velocidades são inicializadas como nulas;
- Domínio com dimensões de $8,0 \text{ m} \times 0,064 \text{ m} \times 0,064 \text{ m}$;
- Malha bloco-estruturada hexaédrica uniforme com 4 096 000 células;
- Método de fronteira imersa: Multi-Direct Forcing (MDF).
- Variáveis forçadas com o MDF: velocidades;
- Perturbação inicial senoidal ao longo do domínio: Eq. (4.25);
- Modelagem bifásica: Volume of Fluid (VoF):
 - Modelo de curvatura: Shirani;
- Posicionamento da interface na entrada: Eq. (4.26);
- Discretização temporal: Euler;
- Esquema advectivo: Upwind de primeira ordem;
- $\text{CFL} = 0,25$;
- Modelagem de fechamento da turbulência: LES Smagorinsky ($C = 0,2$);
- Solver de velocidade: SIP;
- Solver de pressão definido utilizando a biblioteca PETSc:
 - Pré-condicionador: HYPRE;
 - Solver: BiCGStab (Stabilized version of BiConjugate Gradient) method;
 - Tolerância: $0,5 \cdot \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)^2$;
- 40 processos na direção x;

Nas Figs. 4.30 são apresentados os campos de fração volumétrica para uma simulação computacional sem utilizar a condição de periodicidade no domínio.

São apresentados na Fig. 4.30 os campos de fração volumétrica em sete instantes de tempo diferentes desconsiderando-se o domínio complementar. Por meio das figuras é possível observar a inicialização do escoamento estratificado estável em $t = 0,0 \text{ s}$ (Fig. 4.30a) evoluindo até a formação do primeiro pistão de líquido em $t = 2,358$ (Fig. 4.30g). É possível observar também por meio da figura a localização do primeiro pistão formado. Para facilitar a análise da formação do pistão, um zoom da Fig. 4.30g na região de formação é apresentado na Fig. 4.31.

Figura 4.30: Visualização do campo de fração volumétrica em diferentes tempos.

Figura 4.31: Visualização do campo de fração volumétrica em $t = 2,358$ s no intervalo $x = 1,0-2,5$ m.

A análise da formação do primeiro pistão pode ser complexa, ainda mais considerando-se a utilização de um método de fronteira imersa como o MDF. Como pode ser observado, no tempo $t = 1,428$ s (Fig. 4.30d) já existe uma estrutura semelhante a um pistão de líquido com a frente situada em 0,6 m. Essa estrutura avança espacialmente e com isso captura mais líquido e se torna maior.

Segundo Frank (2005), nas simulações não periódicas realizadas em seu trabalho foi observada a formação do primeiro slug em $t \approx 3,35$, localizado em $x \approx 3,8$ m, estabilizando-se em $t \approx 4,04$ quando se encontrava em $x \approx 4$ m. Observando o tempo e a localização de formação do primeiro slug na simulação realizada com o MFSim, é possível constatar um resultado não muito próximo aos obtidos pelo autor em seus experimentos computacionais tanto para o tempo quanto para a localização

de formação do primeiro slug. Não foram apresentados resultados relacionados à performance do código CFX, utilizado em seu trabalho.

Cabe ressaltar que a simulação sem condições de periodicidade é muito dependente da condição de contorno aplicada para a entrada de fluido. Como utiliza-se uma equação para se impor a altura da interface, é possível ajustar para que se obtenha um resultado mais próximo aos valores de referência. Porém, no presente trabalho, optou-se por utilizar apenas a expressão sugerida por Frank (2005), sem o ajuste de parâmetros.

Diante dos resultados distantes dos valores de referência apresentados ao se utilizar o domínio completo, foram realizadas também simulações utilizando-se um domínio periódico no MFSim, cujos resultados serão apresentados na seção seguinte.

4.4.2.2 Caso periódico

O segundo caso simulado no código MFSim visa reproduzir o apresentado na seção 4.4.1.1. Sendo assim, foi utilizado um domínio com condição de contorno periódica tanto para as velocidades quanto para a pressão na direção do comprimento do duto (direção x).

As configurações geométricas e de malha do domínio são muito semelhantes às apresentadas nas Figs. 4.28 e 4.29 da seção 4.4.2.1, tendo como única mudança o comprimento do duto (e conseqüentemente o número de elementos na direção X), que no caso não periódico era de oito metros e nesse caso sem condições de periodicidade é de quatro metros.

A Tab. 4.18 mostra as condições de contorno (CC) utilizadas em cada face do domínio e seus respectivos valores, considerando que na condição de Dirichlet é imposto um valor para a propriedade, já na condição de Neumann é imposto um valor para a derivada na direção normal à face, representada por n . Na representação da tabela $\vec{v} = \{u, v, w\}$ representa o vetor contendo as componentes da velocidade.

Tabela 4.18: Tabela com as condições de contorno (CC) utilizadas em cada face do domínio para velocidades e pressão na simulação da transição estratificado-slug em uma tubulação circular considerando-se periodicidade.

Face do domínio	CC velocidades	Valor	CC pressão	Valor
x = 0,0 m	Periodicidade	-	Periodicidade	-
x = 4,0 m	Periodicidade	-	Periodicidade	-
y = 0,0 m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$
y = 0,064 m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$
z = 0,0 m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$
z = 0,064 m	Neumann	$\frac{\partial \vec{v}}{\partial n} = 0$	Dirichlet	$p = 0$

Abaixo são apresentados outros detalhes da simulação computacional realizada:

- Reprodução do caso periódico no trabalho de Frank (2005);
- Par de fluidos: água-ar;

- $\rho_{\text{água}} = 995 \text{ kg/m}^3$, $\mu_{\text{água}} = 1,0 \times 10^{-3} \text{ kg/(m} \cdot \text{s)}$;
- $\rho_{\text{ar}} = 1,0 \text{ kg/m}^3$, $\mu_{\text{ar}} = 1,82 \times 10^{-5} \text{ kg/(m} \cdot \text{s)}$;
- $\sigma = 0,07 \text{ N/m}$;
- Aceleração da gravidade: $9,81 \text{ m/s}^2$ na direção z ;
- Velocidade das fases: $U_G = U_L = 2,0 \text{ m/s}$. No domínio complementar as velocidades são inicializadas como nulas;
- Gradiente de pressão imposto: 800 Pa/m ;
- Domínio com dimensões de $4,0 \text{ m} \times 0,064 \text{ m} \times 0,064 \text{ m}$;
- Malha bloco-estruturada hexaédrica uniforme com $2\,048\,000$ células;
- Método de fronteira imersa: Multi-Direct Forcing (MDF).
- Variáveis forçadas com o MDF: velocidades;
- Perturbação inicial senoidal ao longo do domínio: Eq. (4.25);
- Modelagem bifásica Euler-Euler: Volume of Fluid (VoF):
 - Modelo de curvatura: Shirani;
- Discretização temporal: Euler;
- Esquema advectivo: Upwind de primeira ordem;
- $\text{CFL} = 0,25$;
- Modelagem de fechamento da turbulência: LES Smagorinsky ($C = 0,2$);
- Solver de velocidade: SIP;
- Solver de pressão definido utilizando a biblioteca PETSc:
 - Pré-condicionador: HYPRE;
 - Solver: BiCGStab (Stabilized version of BiConjugate Gradient) method;
 - Tolerância: $0,5 \cdot \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)^2$.
- 32 processos na direção x ;

Após a realização da simulação utilizando o MFSim, a localização e o tempo de formação do primeiro pistão de líquido, foram comparados com os resultados obtidos por Frank através de simulações computacionais utilizando o código computacional CFX. Na Tab. 4.19 é apresentada uma comparação da localidade e do tempo de formação do primeiro slug nas simulações computacionais com domínio periódico.

Conforme pode ser observado na Tab. 4.19, a localização do primeiro slug na simulação realizada no MFSim ($1,4 \text{ m}$) é semelhante à obtida no trabalho de referência utilizando o código CFX ($1,52 \text{ m}$), apresentando uma discrepância de aproximadamente $7,9 \%$. Já para o tempo de formação do primeiro slug, a diferença

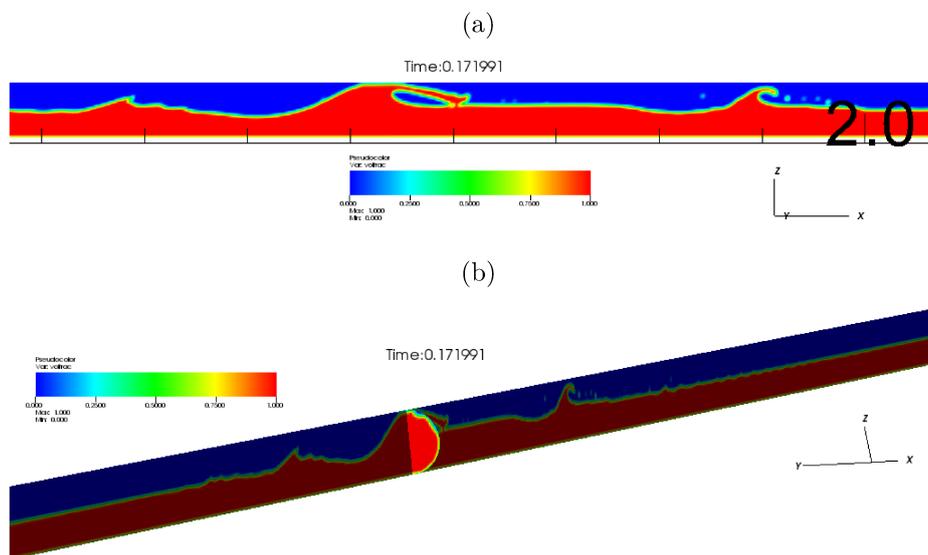
Tabela 4.19: Tabela comparativa da localidade e do tempo de formação do primeiro slug nas simulações computacionais com domínio periódico.

Código	Modelagem turbulência	Local do 1º slug	Tempo 1º slug
CFX Frank (2005)	k- ω (URANS)	1,4 m	1,21 s
MFSim	Smagorinsky C = 0,2 (LES)	1,52 m	0,17 s

foi grande, sendo de 1,21 s no CFX e de 0,17 s no MFSim. A distância entre os tempos de formação do primeiro slug observada pode estar relacionada ao modelo de fechamento da turbulência utilizado, já que Frank utilizou um modelo URANS, enquanto na simulação realizada com o MFSim foi aplicado um modelo LES. Outro fator de diferença entre as simulações comparadas é a modelagem da tubulação já que, enquanto no trabalho de referência o domínio considerado é o próprio duto, na simulação do MFSim é aplicado um método de fronteira imersa. Utilizando o MDF para as velocidades, k e ϵ são inseridos erros numéricos intrínsecos da metodologia.

A seguir são apresentadas visualizações dos campos de fração volumétrica, velocidade e pressão obtidos por meio da simulação computacional realizada no MFSim. Nas Figs. 4.32, 4.33a e 4.33b são mostrados, respectivamente, os campos de fração volumétrica, pressão e velocidade em $t = 0,172$ s, que é o tempo aproximado de formação do primeiro slug. Por meio desses campos é possível realizar também uma análise qualitativa dos resultados obtidos.

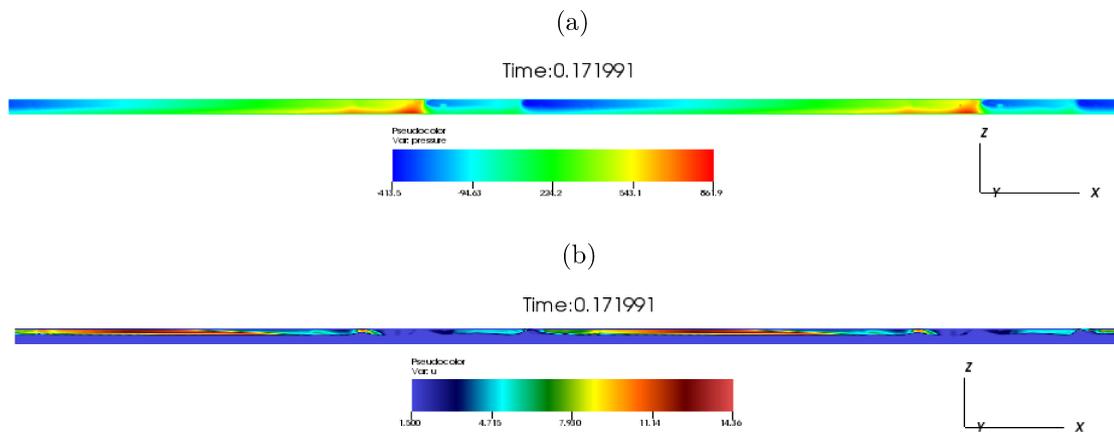
Figura 4.32: Visualizações do campo de fração volumétrica no tempo aproximado de formação do primeiro slug.



Fonte: elaboradas pelo autor.

Na Fig. 4.34 mostra-se, através do campo de fração volumétrica, o desenvolvimento do escoamento desde o campo em um tempo inicial (Fig. 4.34a) que caracteriza um escoamento estratificado, passando pela formação do primeiro slug até a saída e reentrada dos pistões de líquido formados no domínio por meio da condição

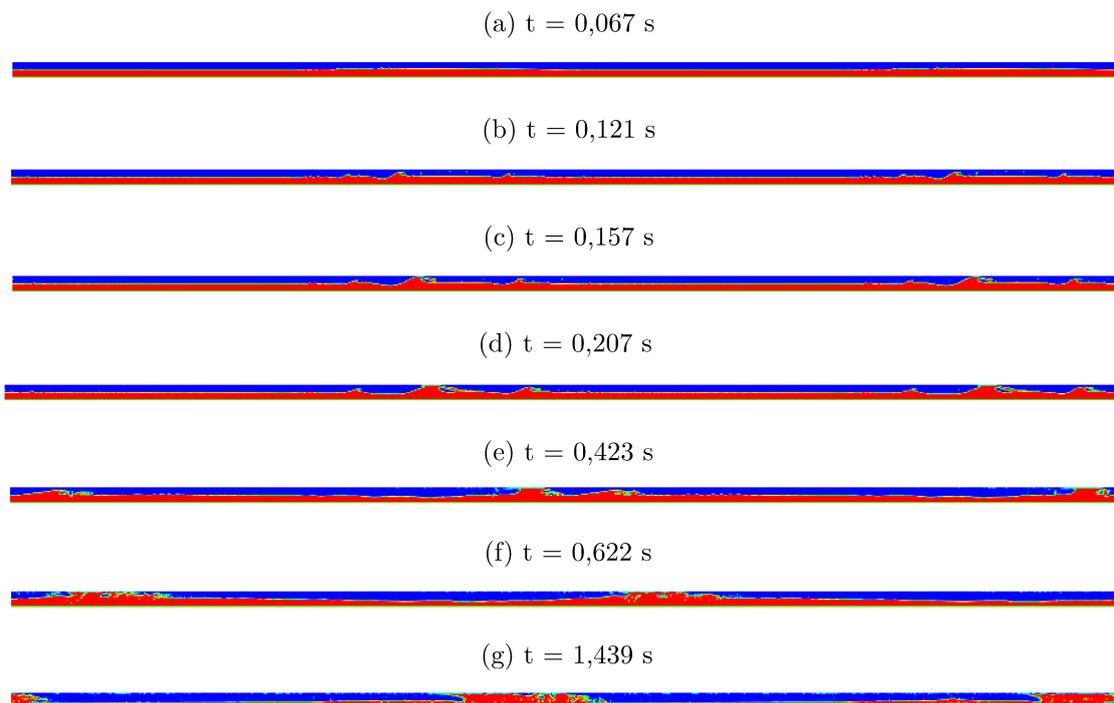
Figura 4.33: Visualização do campo de (a) pressão e (b) velocidade no tempo aproximado de formação do primeiro slug.



Fonte: elaboradas pelo autor.

de periodicidade.

Figura 4.34: Visualização do campo de fração volumétrica em diferentes tempos.



Fonte: elaboradas pelo autor.

É possível observar que, já em $t = 0,121$ s (Fig. 4.34b) são formadas duas estruturas semelhantes ao longo do duto, uma na primeira metade e outra na segunda. Essas estruturas crescem (Fig. 4.34c) e se transformam em um pistão de líquido (Fig. 4.34d). Os dois pistões formados capturam líquido, aumentando a sua

extensão (Fig. 4.34e), até que passam a uma forma mais irregular (Fig. 4.34f).

A partir de $t = 0,423$ s, é possível identificar também quebras da interface entre fluidos que podem ser numéricas. Na Fig. 4.34g é possível inclusive observar várias porções pequenas de líquido aderidas na parede superior do duto. Esse comportamento pode ser ocasionado, por exemplo, pelo refinamento de malha utilizado, por características do método de fronteira imersa e pela ausência de uma modelagem adequada para o ponto triplo de contato.

De forma geral, simulação computacional realizada no MFSim considerando o domínio periódico, apesar de utilizar metodologias diferentes para a modelagem do escoamento bifásico, do fechamento da turbulência e da representação da superfície do duto, forneceu resultados parecidos com os obtidos por Frank no que diz respeito à localidade de formação do primeiro slug. Porém, acredita-se que seja possível a obtenção de resultados ainda melhores em trabalhos futuros que apliquem melhorias na modelagem utilizada como, por exemplo, um modelo para ponto triplo de contato.

Capítulo 5

CONCLUSÕES

No presente trabalho apresentou-se um conjunto de metodologias, desenvolvimentos e testes utilizados com o objetivo de se estudar a transição entre os padrões de escoamento bifásico estratificado e em golfadas (*slug flow*) em domínios tridimensionais. Para as simulações computacionais foi utilizado o código MFSim, que é uma plataforma computacional em desenvolvimento há mais de 15 anos no Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab) da Universidade Federal de Uberlândia (UFU).

Dada a complexidade do problema físico abordado e a metodologia numérica do MFSim, foi necessária uma composição de diferentes linhas de pesquisa presentes no laboratório como, por exemplo, modelos de fechamento para o problema da turbulência, modelos de fronteira imersa e todo o arcabouço numérico presente em escoamentos multifásicos. Portanto, diante de tal cenário, foram realizados diversos desenvolvimentos e testes nas diferentes frentes que compõem o problema com o objetivo de se verificar de forma separada quais eram as necessidades reais em cada etapa.

Foi desenvolvida e implementada uma abordagem para a aplicação do método de fronteira imersa *Multi Direct Forcing* (MDF) para k e ϵ em modelos URANS da classe $k - \epsilon$, para a qual foram verificados bons resultados para um escoamento em canal plano e escoamento ao redor de um cilindro em diferentes números de Reynolds.

Quanto à metodologia *Volume of Fluid* (VoF), utilizada na modelagem de escoamentos bifásicos no MFSim, foram realizados testes de desempenho e acurácia para as partes de inicialização do campo de fração volumétrica, cálculo dos vetores normais à interface entre fluidos e métodos de reconstrução e advecção da interface. A acurácia e o desempenho da metodologia implementada no MFSim foi comparada com métodos implementados em uma biblioteca externa chamada *Interface Reconstruction Library* (IRL) e a análise dos resultados mostrou que a metodologia implementada no MFSim oferece uma relação de custo benefício interessante.

Finalmente foram apresentados resultados para dois casos de aplicação: a simulação da transição de um escoamento bifásico entre os padrões estratificado estável e *slug* tanto em um duto horizontal de seção retangular quanto de seção circular. Foram apresentados resultados de diversas comparações com os resultados obtidos por meio de outros códigos computacionais e também com resultados de experimentos materiais. De acordo com os resultados, é possível perceber que

o MFSim entregou predições interessantes para holdup médio por seção do duto, tempo e localização de formação do primeiro slug, entre outros.

Um ponto importante a se ressaltar é que, apesar de não se utilizar a técnica de malha adaptativa nas simulações de aplicação, todas as metodologias apresentadas ao longo do trabalho foram implementadas de forma compatível à adaptatividade de malha. Sendo assim, a simulação de escoamentos com a presença de transição entre padrões de escoamentos bifásicos utilizando malha adaptativa pode ser explorada em trabalhos futuros.

O presente trabalho foi proposto com os objetivos de: formar pessoas no tema de transição entre padrões de escoamentos bifásicos e contribuir para o desenvolvimento de uma plataforma de simulação numérica de problemas de dinâmica dos fluidos.

A principal contribuição com o presente trabalho foi a adequação do código computacional para a simulação de um problema desafiador envolvendo mecanismos físicos complexos de diferentes linhas de pesquisa já presentes no MFLab. Grandes são os desdobramentos dessa tese em termos de pesquisa e desenvolvimento. A seguir são elencadas sugestões de trabalhos futuros envolvendo a plataforma MFSim dentro do tema trabalhado ao longo da tese:

- Simulação da transição entre padrões de escoamentos bifásicos utilizando a técnica de malha adaptativa;
- Implementação de uma metodologia para avaliação de pontos de contato triplo (sólido-fluido-fluido) com ângulo de contato dinâmico;
- Consideração de conversões euler-lagrange e lagrange-euler para tratar de forma adequada mecanismos como o arrancamento de gotas e bolhas de gás contidas na fase líquida;
- Implementação de tratamentos especiais para avaliação dos modelos de turbulência na interface entre fluidos;
- Simulação da transição entre os padrões de escoamento estratificado estável e anular;
- Simulação da transição entre padrões de escoamentos bifásicos em tubulações verticais e inclinadas.

Bibliografia

AFKHAMI, S.; BUSSMANN, M. Height function-based contact angles for vof simulations of contact line phenomena. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, v. 1, n. 1, p. 1–18, 2004. Disponível em: <http://www.individual.utoronto.ca/afkhami/conferences/SCA2006.pdf>.

ANDREOLLI, I. *Introdução à elevação e escoamento monofásico e multifásico de petróleo*. [S.l.: s.n.], 2016. v. 1. 594–595 p. ISBN 978-8571933880.

ANNALAND, M. van S.; DEEN, N.; KUIPERS, J. Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 60, n. 11, p. 2999–3011, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.01.031>.

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://www.jstor.org/stable/2158449>.

AULISA, E. et al. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 225, n. 2, p. 2301–2319, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.03.015>.

ÁVILA, Í. A. M. d. et al. Modelagem matemática e computacional de interação fluido-estrutura com elementos de casca curvilíneos tridimensionais. Universidade Federal de Uberlândia, 2021. Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2021.5563>.

BAEZA, A.; MULET, P. Adaptive mesh refinement techniques for high-order shock capturing schemes for multi-dimensional hydrodynamic simulations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 52, n. 4, p. 455–471, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/fld.1191>.

BAKER, O. et al. Design of pipelines for the simultaneous flow of oil and gas. In: SOCIETY OF PETROLEUM ENGINEERS. *Fall meeting of the petroleum branch of AIME*. 1953. Disponível em: <https://doi.org/10.2118/323-G>.

BALACHANDAR, S.; EATON, J. K. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews, v. 42, p. 111–133, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.010908.165243>.

- BALAY, S. et al. *PETSc Web page*. 2022. <https://petsc.org/>. Disponível em: <https://petsc.org/>.
- BALAY, S. et al. *PETSc/TAO Users Manual*. [S.l.], 2022. Disponível em: <https://petsc.org/release/docs/manual/>.
- BARBI, F. Experimentação numérica de bolhas em ascensão. Universidade Federal de Uberlândia, 2016. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/18155>.
- BARBI, F. et al. Numerical experiments of ascending bubbles for fluid dynamic force calculations. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 40, n. 11, p. 519, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s40430-018-1435-7>.
- BARTOSIEWICZ, Y.; LAVIÉVILLE, J.; SEYNHAEVE, J.-M. A first assessment of the neptune_cfd code: Instabilities in a stratified flow comparison between the vof method and a two-field approach. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 29, n. 2, p. 460–478, 2008. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2007.09.005>.
- BEARMAN, P. On vortex shedding from a circular cylinder in the critical reynolds number regime. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 37, n. 3, p. 577–585, 1969. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0022112069000735>.
- BEGGS, D. H.; BRILL, J. P. et al. A study of two-phase flow in inclined pipes. *Journal of Petroleum technology*, Society of Petroleum Engineers, v. 25, n. 05, p. 607–617, 1973. Disponível em: <https://doi.org/10.2118/4007-PA>.
- BELL, J. et al. Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 15, n. 1, p. 127–138, 1994. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/0915008>.
- BERGER, M.; COLELLA, P. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 82, n. 1, p. 64 – 84, 1989. ISSN 0021-9991. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90035-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(89)90035-1).
- BERGER, M.; LEVEQUE, R. Adaptive mesh refinement using wave-propagation algorithms for hyperbolic systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 35, n. 6, p. 2298–2316, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/S0036142997315974>.
- BERGER, M. J.; OLIGER, J. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of computational Physics*, Elsevier, v. 53, n. 3, p. 484–512, 1984. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(84\)90073-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(84)90073-1).
- BNÀ, S. et al. Vofi—a library to initialize the volume fraction scalar field. *Computer Physics Communications*, Elsevier, v. 200, p. 291–299, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.10.026>.

- BOGER, M. et al. Reduction of parasitic currents in the dns vof code fs3d. In: *12th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*. [s.n.], 2010. Disponível em: <https://www.yumpu.com/en/document/read/22414238/reduction-of-parasitic-currents-in-the-dns-vo-code-fs3d-iag>.
- BOUDIER, G. et al. Comparison of les, rans and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 31, n. 2, p. 3075 – 3082, 2007. ISSN 1540-7489. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.067>.
- BOUSSINESQ, J. *Essai sur la théorie des eaux courantes*. [s.n.], 1877. 1-680 p. Disponível em: <https://gallica.bnf.fr/ark:/12148/bpt6k56673076.texteImage>.
- BRACKBILL, J. U.; KOTHE, D. B.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 100, n. 2, p. 335–354, 1992. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90240-Y](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y).
- BRATLAND, O. *Pipe flow 2: Multi-phase Flow Assurance*. [s.n.], 2010. ISBN 978-616-335-926-1. Disponível em: <http://www.drbratland.com/free-book-pipe-flow-2-multi-phase-flow-assurance/>.
- CAPIZZANO, F. Turbulent wall model for immersed boundary methods. *AIAA Journal*, v. 49, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/1.J050466>.
- CARVALHO, A. R. D. et al. Modelagem e aplicação de métodos de fronteira imersa para análise de escoamentos sobre atenuadores de viv. Universidade Federal de Uberlândia, 2021. Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2021.415>.
- CHEN, H.; PATEL, V. Near-wall turbulence models for complex flows including separation. *AIAA journal*, v. 26, n. 6, p. 641–648, 1988. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/3.9948>.
- CHIODI, R.; DESJARDINS, O. A two-plane interface reconstruction strategy to enable thin-films in vof simulations. In: *Proc. of 14th Triennial Int. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems, Chicago, IL*. [S.l.: s.n.], 2018.
- CHIODI, R.; DESJARDINS, O. General, robust, and efficient polyhedron intersection in the interface reconstruction library. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 449, p. 110787, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110787>.
- CHIODI, R. M. *Advancement of numerical methods for simulating primary atomization*. Cornell University, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.7298/cy69-rb39>.
- CHORIN, A. J. The numerical solution of the navier-stokes equations for an incompressible fluid. *Bulletin of the American Mathematical Society*, v. 73, n. 6, p. 928–931, 1967. Disponível em: <https://doi.org/10.2307/2004575>.

- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968. Disponível em: <https://doi.org/10.2307/2004575>.
- CHOU, P. Y. On velocity correlations and the solutions of the equations of turbulent fluctuation. *Quarterly of Applied Mathematics*, v. 3, n. 1, p. 38–54, 1945. Disponível em: <https://doi.org/10.1090/qam/11999>.
- CUMMINS, S. J.; FRANCOIS, M. M.; KOTHE, D. B. Estimating curvature from volume fractions. *Computers & structures*, Elsevier, v. 83, n. 6-7, p. 425–434, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2004.08.017>.
- DALY, B. J. Numerical study of the effect of surface tension on interface instability. *The Physics of Fluids*, American Institute of Physics, v. 12, n. 7, p. 1340–1354, 1969. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1692673>.
- DAMASCENO, M. M. R. et al. Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada. Universidade Federal de Uberlândia, 2018. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.te.2018.771>.
- DAVYDOV, B. On statistical dynamics of an incompressible turbulent fluid. In: *Soviet Physics Doklady*. [s.n.], 1961. v. 6, p. 10. Disponível em: <https://zbmath.org/?q=an:0098.17503>.
- DEBAR, R. Fundamentals of the kraken code. *Technical Report UCIR-760*, Lawrence Livermore National Laboratory, 1974. Disponível em: <https://doi.org/10.2172/7227630>.
- DENNER, F. et al. Comparative study of mass-conserving interface capturing frameworks for two-phase flows with surface tension. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 61, p. 37–47, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.12.011>.
- DRIEST, E. R. V. On turbulent flow near a wall. *Journal of the aeronautical sciences*, v. 23, n. 11, p. 1007–1011, 1956. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/8.3713>.
- DUARTE, B. A. d. F. et al. Phase change modelling for non-isothermal flows: a mathematical, numerical and computational model for pure substances. Universidade Federal de Uberlândia, 2018. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.te.2018.795>.
- DYADECHKO, V.; SHASHKOV, M. Moment-of-fluid interface reconstruction. *Los Alamos Report LA-UR-05-7571*, p. 49, 2005. Disponível em: <https://cnls.lanl.gov/~shashkov/papers/main.pdf>.
- ECKHARDT, B. et al. Turbulence transition in pipe flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Annual Reviews, v. 39, p. 447–468, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.39.050905.110308>.

- FEDKIW, R. P. et al. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 152, n. 2, p. 457–492, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6236>.
- FERNANDEZ, E. F. y; JUNIOR, O. A. P.; PINHO, A. C. de. *Dicionário do petróleo em língua portuguesa: exploração e produção de petróleo e gás uma colaboração Brasil, Portugal e Angola*. Lixikon, 2009. Disponível em: <https://dicionariopetroleoegas.com.br/>.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.; STREET, R. L. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 2002. v. 3. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-56026-2>.
- FOX, R. O. *Computational models for turbulent reacting flows*. Cambridge university press, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511610103>.
- FRANCOIS, M. M. et al. A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 213, n. 1, p. 141–173, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.08.004>.
- FRANK, T. Numerical simulation of slug flow regime for an air-water two-phase flow in horizontal pipes. In: *Proceedings of the 11th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Avignon, France, October*. [s.n.], 2005. p. 2–6. Disponível em: https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/36/049/36049863.pdf.
- GEORGE, D.; LEVEQUE, R. Finite volume methods and adaptive refinement for global tsunami propagation and local inundation. *Science of Tsunami Hazards*, v. 24, n. 5, p. 319–328, 2006. Disponível em: <http://hdl.handle.net/1773/4639>.
- GERMANO, M. et al. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 3, n. 7, p. 1760–1765, 1991. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.857955>.
- GIBOU, F.; FEDKIW, R.; OSHER, S. A review of level-set methods and some recent applications. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 353, p. 82–109, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.10.006>.
- GOPALKRISHNAN, R. *Vortex-induced forces on oscillating bluff cylinders*. [S.l.], 1993. Disponível em: <https://apps.dtic.mil/sti/pdfs/ADA265056.pdf>.
- GUEYFFIER, D. et al. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational physics*, Elsevier, v. 152, n. 2, p. 423–456, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jcph.1998.6168>.
- HAN, T.; MENG, J.; INNIS, G. An open boundary condition for incompressible stratified flows. *Journal of Computational Physics*, v. 49, n. 2, p. 276 – 297, 1983. ISSN 0021-9991. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(83\)90127-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(83)90127-4).

- HARLOW, F. H.; NAKAYAMA, P. I. *Transport of turbulence energy decay rate*. [S.l.], 1968. Disponível em: https://digital.library.unt.edu/ark:/67531/metadc1026296/m2/1/high_res.d/4556905.pdf.
- HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids*, American Institute of Physics, v. 8, n. 12, p. 2182–2189, 1965. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1761178>.
- HILL, R. N.; SHASHKOV, M. The symmetric moment-of-fluid interface reconstruction algorithm. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 249, p. 180–184, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.04.037>.
- HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 39, n. 1, p. 201–225, 1981. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5).
- HÖHNE, T.; HÄNSCH, S. A droplet entrainment model for horizontal segregated flows. *Nuclear Engineering and Design*, Elsevier, v. 286, p. 18–26, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2015.01.013>.
- HÖHNE, T.; MEHLHOOP, J.-P. Validation of closure models for interfacial drag and turbulence in numerical simulations of horizontal stratified gas–liquid flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 62, p. 1–16, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2014.01.012>.
- HÖHNE, T.; VALLÉE, C. Experiments and numerical simulations of horizontal two-phase flow regimes using an interfacial area density model. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 2, n. 3, p. 131–143, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1260/2F1757-482X.2.3.131>.
- ILIE, M. Fluid-structure interaction in turbulent flows; a cfd based aeroelastic algorithm using les. *Applied Mathematics and Computation*, v. 342, p. 309 – 321, 2019. ISSN 0096-3003. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2017.10.059>.
- JR, J. E. P.; PUCKETT, E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 199, n. 2, p. 465–502, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.12.023>.
- KIM, T.-W. et al. Optimization and extended applicability of simplified slug flow model for liquid-gas flow in horizontal and near horizontal pipes. *Energies*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 13, n. 4, p. 842, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/en13040842>.
- KIM, W.; CHOI, H. Immersed boundary methods for fluid-structure interaction: A review. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 75, p. 301–309, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2019.01.010>.

- KINOSHITA, D. et al. Fourier pseudospectral method for nonperiodical problems: A general immersed boundary method for three types of thermal boundary conditions. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, Taylor & Francis, v. 70, n. 6, p. 537–558, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/10407790.2016.1244401>.
- KOLMOGOROV, A. N. Equations of turbulent motion in an incompressible fluid. In: *Dokl. Akad. Nauk SSSR*. [S.l.: s.n.], 1941. v. 30, p. 299–303.
- KOLMOGOROV, A. N. Equations of turbulent motion in an incompressible fluid. *Izv. Akad. Nauk*, n. 6, p. 56–58, 1942.
- KOTHE, D. et al. Volume tracking of interfaces having surface tension in two and three dimensions. In: *34th aerospace sciences meeting and exhibit*. [s.n.], 1996. p. 859. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/6.1996-859>.
- KOTHE, D. B.; RIDER, W. J. Comments on modeling interfacial flows with volume-of-fluid methods. *submitted for publication*, Citeseer, 1995. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/2334143_Comments_on_Modeling_Interfacial_Flows_with_Volume-of-Fluid_Methods.
- KRAVCHENKO, A. G.; MOIN, P. Numerical studies of flow over a circular cylinder at $re_d = 3900$. *Physics of fluids*, AIP, v. 12, n. 2, p. 403–417, 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.870318>.
- LAM, K. *A numerical surface tension model for two-phase flow simulations*. Tese (Doutorado) — Faculty of Science and Engineering, 2009. Disponível em: <https://www.math.rug.nl/~veldman/Scripties/Lam-MasterTechWisk.pdf>.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*. [S.l.]: Academic Press, 1972. ISBN 0124380506.
- LEVEQUE, R. J. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 33, n. 2, p. 627–665, 1996. Disponível em: <https://www.jstor.org/stable/2158391>.
- LILLY, D. K. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 4, n. 3, p. 633–635, 1992. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.858280>.
- LOPEZ, J. et al. An improved height function technique for computing interface curvature from volume fractions. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 198, n. 33-36, p. 2555–2564, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2009.03.007>.
- LU, M. Experimental and computational study of two-phase slug flow. Imperial College London, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.25560/25748>.
- LUO, K. et al. Level set method for atomization and evaporation simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, Elsevier, v. 73, p. 65–94, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2019.03.001>.

- LÜBCKE, H. et al. Comparison of les and rans in bluff-body flows. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, v. 89, n. 14, p. 1471 – 1485, 2001. ISSN 0167-6105. Bluff Body Aerodynamics and Applications. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0167-6105\(01\)00134-9](https://doi.org/10.1016/S0167-6105(01)00134-9).
- MAGALHÃES, G. M. et al. Soluções contínuas e discretas de escoamentos cisalhantes livres em regimes laminar e turbulento. Universidade Federal de Uberlândia, 2018. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2018.1181>.
- MANDHANE, J.; GREGORY, G.; AZIZ, K. A flow pattern map for gas—liquid flow in horizontal pipes. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 1, n. 4, p. 537–553, 1974. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0301-9322\(74\)90006-8](https://doi.org/10.1016/0301-9322(74)90006-8).
- MANSOUR, N. N.; KIM, J.; MOIN, P. Reynolds-stress and dissipation-rate budgets in a turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 194, p. 15–44, 1988. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0022112088002885>.
- MARIANO, F. P. et al. A new incompressible navier-stokes solver combining fourier pseudo-spectral and immersed boundary methods. *Computer Modeling in Engineering & Sciences (CMES)*, Tech Science Press, 4924 Balboa Blvd,# 488 Encino CA 91316 USA, v. 59, n. 2, p. 181–216, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.3970/cmcs.2010.059.181>.
- MARTINI, J. E. F. et al. Modelagem computacional de escoamentos turbulentos em turbinas eólicas utilizando fronteira imersa e refinamento adaptativo da malha. Universidade Federal de Uberlândia, 2021. Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2021.455>.
- MATOS, A. de; PINHO, F. A.; SILVEIRA-NETO, A. Large-eddy simulation of turbulent flow over a two-dimensional cavity with temperature fluctuations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 42, n. 1, p. 49 – 59, 1999. ISSN 0017-9310. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(98\)00155-0](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(98)00155-0).
- MEIER, M.; YADIGAROGLU, G.; SMITH, B. L. A novel technique for including surface tension in plic-vof methods. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, Elsevier, v. 21, n. 1, p. 61–73, 2002. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0997-7546\(01\)01161-X](https://doi.org/10.1016/S0997-7546(01)01161-X).
- MELO, R. et al. Simulation of thermal transfer using the immersed boundary method and adaptive mesh. In: BEGEL HOUSE INC. *ICHMT DIGITAL LIBRARY ONLINE*. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1615/THMT-18.1040>.
- MELO, R. R. S. *Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia da fronteira imersa e malha adaptativa*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2017. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.te.2017.79>.

MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*, v. 32, n. 8, p. 1598–1605, 1994. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.2514/3.12149⟩](https://doi.org/10.2514/3.12149).

MENTER, F. R. Review of the shear-stress transport turbulence model experience from an industrial perspective. *International journal of computational fluid dynamics*, Taylor & Francis, v. 23, n. 4, p. 305–316, 2009. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1080/10618560902773387⟩](https://doi.org/10.1080/10618560902773387).

MIAO, S.; HENDRICKSON, K.; LIU, Y. Slug generation processes in co-current turbulent-gas/laminar-liquid flows in horizontal channels. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 860, p. 224–257, 2019. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1017/jfm.2018.868⟩](https://doi.org/10.1017/jfm.2018.868).

MITTAL, R.; IACCARINO, G. Immersed boundary methods. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Annual Reviews, v. 37, p. 239–261, 2005. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743⟩](https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743).

MOHAMMADI, B.; PIRONNEAU, O. *Analysis of the K-Epsilon turbulence model*. [S.l.]: Wiley, 1994. (Recherches en mathématiques appliquées). ISBN 2-225-84391-0.

MOHD-YUSOF, J. *Combined immersed boundaries/Bsplines methods for simulations of flows in complex geometries*. [S.l.], 1997. Disponível em: [⟨https://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=19990063249⟩](https://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=19990063249).

MOSER, R. D.; KIM, J.; MANSOUR, N. N. Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $re \tau = 590$. *Physics of fluids*, AIP, v. 11, n. 4, p. 943–945, 1999. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1063/1.869966⟩](https://doi.org/10.1063/1.869966).

NETO, A. S. *Escoamentos turbulentos: Análise física e modelagem teórica*. Universidade Federal de Uberlândia, 1ª edição edition, 2020.

NETO, H. R. et al. Influence of seabed proximity on the vibration responses of a pipeline accounting for fluid-structure interaction. *Mechanical Systems and Signal Processing*, Elsevier, v. 114, p. 224–238, 2019. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1016/j.ymssp.2018.05.017⟩](https://doi.org/10.1016/j.ymssp.2018.05.017).

NETO, H. R. et al. Modelagem matemática para a interação fluido-estrutura acoplando escoamentos incompressíveis e viga de timoshenko. Universidade Federal de Uberlândia, 2016. Disponível em: [⟨https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/21141⟩](https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/21141).

NETO, H. R. et al. Modelagem matemática e computacional de interações fluido-sólido utilizando o método de fronteira imersa tipo ghost em ambiente paralelo e com malha adaptativa. Universidade Federal de Uberlândia, 2021. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.14393/ufu.te.2021.412⟩](https://doi.org/10.14393/ufu.te.2021.412).

NICHOLS, B.; HIRT, C.; HOTCHKISS, R. A fractional volume of fluid method for free boundary dynamics. In: SPRINGER. *Seventh international conference on numerical methods in fluid dynamics*. 1981. p. 304–309. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1007/3-540-10694-4_46⟩](https://doi.org/10.1007/3-540-10694-4_46).

- NICHOLS, R. H. *Turbulence models and their application to complex flows*. University of Alabama at Birmingham, Revision, 2010. v. 4. 89 p. Disponível em: https://overflow.larc.nasa.gov/files/2014/06/Turbulence_Guide_v4.01.pdf.
- NIKFARJAM, F. *Extension of the LS-STAG immersed boundary/cut-cell method to 3D extruded geometries: Application to Newtonian and non-Newtonian flows*. Tese (Doutorado) — Université de Lorraine, 2018. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/324683696_Extension_of_the_LS-STAG_immersed_boundarycut-cell_method_to_3D_extruded_geometries_Application_to_Newtonian_and_non-Newtonian_flows.
- NOH, W. F.; WOODWARD, P. Slic (simple line interface calculation). In: SPRINGER. *Proceedings of the fifth international conference on numerical methods in fluid dynamics June 28–July 2, 1976 Twente University, Enschede*. 1976. p. 330–340. Disponível em: https://doi.org/10.1007/3-540-08004-X_336.
- OSHER, S.; SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 79, n. 1, p. 12–49, 1988. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90002-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2).
- OSHER, S.; SHU, C.-W. High-order essentially nonoscillatory schemes for hamilton–jacobi equations. *SIAM Journal on numerical analysis*, SIAM, v. 28, n. 4, p. 907–922, 1991. Disponível em: <https://doi.org/10.1137/0728049>.
- PARKER, B.; YOUNGS, D. *Two and three dimensional Eulerian simulation of fluid flow with material interfaces*. [S.l.]: Atomic Weapons Establishment, 1992.
- PATEL, H. et al. A coupled volume of fluid and immersed boundary method for simulating 3d multiphase flows with contact line dynamics in complex geometries. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 166, p. 28–41, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.03.012>.
- PESKIN, C. S. Flow patterns around heart valves: a numerical method. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 10, n. 2, p. 252–271, 1972. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(72\)90065-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(72)90065-4).
- PESKIN, C. S. The immersed boundary method. *Acta numerica*, Cambridge University Press, v. 11, p. 479–517, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0962492902000077>.
- PILLIOD, J. E. *An analysis of piecewise linear interface reconstruction algorithms for volume-of-fluid methods*. U. of Calif., Davis, 1992. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=eIisGwAACAAJ>.
- 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. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.08.009>.

- 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. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.04.042>.
- POPOVAC, M.; HANJALIC, K. Compound wall treatment for rans computation of complex turbulent flows and heat transfer. *Flow, turbulence and combustion*, Springer, v. 78, n. 2, p. 177–202, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10494-006-9067-x>.
- PRANDTL, L. Bericht uber untersuchugen zur ausgebildeten turbulenz. *Angew Math.*, v. 5, p. 136 – 139, 1925. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-3-662-11836-8_57.
- PRANDTL, L. *Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz*. Vandenhoeck & Ruprecht, 1945. (Nachrichten der Akademie der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse). Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=JByAPwAACAAJ>.
- PU, T.; ZHOU, C. An immersed boundary/wall modeling method for rans simulation of compressible turbulent flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 87, n. 5, p. 217–238, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/flid.4487>.
- PUCKETT, E. G. A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction. In: *Proceedings of the Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics*. [s.n.], 1991. p. 933–938. Disponível em: <https://msp.org/camcos/2010/5-2/camcos-v5-n2-p02-s.pdf>.
- QUIBEN, J. M. *Experimental and analytical study of two-phase pressure drops during evaporation in horizontal tubes*. [S.l.], 2005. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.5075/epfl-thesis-3337>.
- RAESSI, M.; MOSTAGHIMI, J.; BUSSMANN, M. Advecting normal vectors: A new method for calculating interface normals and curvatures when modeling two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 226, n. 1, p. 774–797, 2007. Disponível em: https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2007JCoPh.226..774R/doi:10.1016/j.jcp.2007.04.023.
- RAMIREZ, J. A.; CORTES, C. Comparison of different urans schemes for the simulation of complex swirling flows. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, Taylor & Francis, v. 58, n. 2, p. 98–120, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/10407790.2010.508440>.
- REN, Z. et al. Simulations of a turbulent non-premixed flame using combined dimension reduction and tabulation for combustion chemistry. *Fuel*, v. 105, p. 636 – 644, 2013. ISSN 0016-2361. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.08.018>.

- RIBERA, R. L. et al. Understanding the dynamics of gas-liquid-solid contact points. Universidade Federal de Uberlândia, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.14393/ufu.te.2015.14>.
- RICHTMYER, R. D.; MORTON, K. W. Difference methods for initial-value problems. *Malabar*, 1994.
- ROMA, A. M.; PESKIN, C. S.; BERGER, M. J. An adaptive version of the immersed boundary method. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 153, n. 2, p. 509–534, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6293>.
- ROMAN, F.; ARMENIO, V.; FROHLICH, J. A simple wall-layer model for large eddy simulation with immersed boundary method. *Physics of Fluids*, v. 21, n. 10, p. 101701, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.3245294>.
- ROMAN, F. et al. An improved immersed boundary method for curvilinear grids. *Computers & Fluids*, v. 38, n. 8, p. 1510–1527, 2009. ISSN 0045-7930. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2008.12.004>.
- RUDMAN, M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International journal for numerical methods in fluids*, Wiley Online Library, v. 24, n. 7, p. 671–691, 1997. Disponível em: [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0363\(19970415\)24:7%3C671::AID-FLD508%3E3.0.CO;2-9](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0363(19970415)24:7%3C671::AID-FLD508%3E3.0.CO;2-9).
- SANTOS, J. G. d. F. Análise numérica de jatos turbulentos bifásicos utilizando modelo de fase discreta com refinamento adaptativo de malha. Universidade Federal de Uberlândia, 2017. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/19491>.
- SANTOS, J. G. d. F. et al. Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-sólido em malha adaptativa dinâmica. Universidade Federal de Uberlândia, 2019. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2019.2218>.
- SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Interface reconstruction with least-square fit and split eulerian-lagrangian advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 41, n. 3, p. 251–274, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/fld.431>.
- SCHNEIDER, K. Immersed boundary methods for numerical simulation of confined fluid and plasma turbulence in complex geometries: a review. *Journal of Plasma Physics*, Cambridge University Press, v. 81, n. 6, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0022377815000598>.
- SHIH, T.-H. et al. A new k- ϵ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers & Fluids*, v. 24, n. 3, p. 227 – 238, 1995. ISSN 0045-7930. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)00032-T](https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T).
- SHIRANI, E.; ASHGRIZ, N.; MOSTAGHIMI, J. Interface pressure calculation based on conservation of momentum for front capturing methods. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 203, n. 1, p. 154–175, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.08.017>.

- SHOHAM, O. *Mechanistic modeling of gas-liquid two-phase flow in pipes*. Richardson, TX: Society of Petroleum Engineers, 2006. ISBN 978-1-55563-107-9. Disponível em: <https://doi.org/10.2118/9781555631079>.
- SILVEIRA-NETO, A. *A turbulência nos fluidos aplicada*. [S.l.]: Apostila da Disciplina Mecânica dos Fluidos do Programa de Pós-Graduação da Universidade Federal de Uberlândia, 2002. v. 1.
- SOTIROPOULOS, F.; YANG, X. Immersed boundary methods for simulating fluid–structure interaction. *Progress in Aerospace Sciences*, Elsevier, v. 65, p. 1–21, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2013.09.003>.
- SPALART, P. R.; ALLMARAS, S. R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. *AIAA Paper*, 1992. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/6.1992-439>.
- SUSSMAN, M. et al. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 27, n. 5-6, p. 663–680, 1998. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0045-7930\(97\)00053-4](https://doi.org/10.1016/S0045-7930(97)00053-4).
- SUSSMAN, M.; PUCKETT, E. G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 162, n. 2, p. 301–337, 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6537>.
- TAITEL, Y.; BORNEA, D.; DUKLER, A. Modelling flow pattern transitions for steady upward gas-liquid flow in vertical tubes. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 26, n. 3, p. 345–354, 1980. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/aic.690260304>.
- TAITEL, Y.; DUKLER, A. E. A model for predicting flow regime transitions in horizontal and near horizontal gas-liquid flow. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 22, n. 1, p. 47–55, 1976. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/aic.690220105>.
- TAY, W. et al. Validation of immersed boundary method for the numerical simulation of flapping wing flight. *Computers & Fluids*, v. 115, p. 226 – 242, 2015. ISSN 0045-7930. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2015.04.009>.
- TORREY, M. D. et al. Nasa-vof2d: a computer program for incompressible flows with free surfaces. *NASA STI/Recon Technical Report N*, v. 86, p. 30116, 1985. Disponível em: <https://www.osti.gov/biblio/5934123>.
- TROTTEBERG, U.; OOSTERLEE, C. W.; SCHULLER, A. *Multigrid*. [S.l.]: Elsevier, 2000. ISBN 9780080479569.
- TRYGGVASON, G. et al. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 169, n. 2, p. 708–759, 2001. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6726>.

TRYGGVASON, G.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge university press, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511975264>.

UHLMANN, M. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, v. 209, n. 2, p. 448 – 476, 2005. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.03.017>.

UNVERDI, S. O.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 100, n. 1, p. 25–37, 1992. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90307-K](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90307-K).

VALLÉE, C. et al. Experimental modelling and cfd simulation of air/water flow in a horizontal channel. In: *International topical meeting NURETH-11, Avignon, France, log.* [s.n.], 2005. v. 479. Disponível em: <https://www.hzdr.de/publications/Publ-6956>.

VALLÉE, C. et al. Experimental investigation and cfd simulation of horizontal stratified two-phase flow phenomena. *Nuclear Engineering and Design*, Elsevier, v. 238, n. 3, p. 637–646, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2007.02.051>.

VALLÉE, C. et al. Experimental cfd grade data for stratified two-phase flows. *Nuclear Engineering and design*, Elsevier, v. 240, n. 9, p. 2347–2356, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2009.11.011>.

VEDOVOTO, J. M. et al. Modelagem matemática de escoamentos reativos turbulentos utilizando uma metodologia hibrida les/pdf. Universidade Federal de Uberlândia, 2011. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14704>.

VEDOVOTO, J. M.; SERFATY, R.; NETO, A. D. S. Mathematical and Numerical Modeling of Turbulent Flows. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, scielo, v. 87, p. 1195 – 1232, 06 2015. ISSN 0001-3765. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/0001-3765201520140510>.

VILLAR, M. M. et al. Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais. Universidade Federal de Uberlândia, 2007. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14664>.

WACHEM, B. V.; SCHOUTEN, J. Experimental validation of 3-d lagrangian vof model: Bubble shape and rise velocity. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 48, n. 12, p. 2744–2753, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/aic.690481205>.

WANG, D.; RUUTH, S. J. Variable step-size implicit-explicit linear multistep methods for time-dependent partial differential equations. *Journal of Computational Mathematics*, JSTOR, p. 838–855, 2008. Disponível em: <https://www.jstor.org/stable/43693484>.

- WANG, S. et al. The performance of different turbulence models (urans, sas and des) for predicting high-speed train slipstream. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, Elsevier, v. 165, p. 46–57, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2017.03.001>.
- 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*, v. 34, n. 3, p. 283 – 302, 2008. ISSN 0301-9322. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.10.004>.
- 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*, v. 34, n. 3, p. 283 – 302, 2008. ISSN 0301-9322. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.10.004>.
- 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*, v. 34, n. 3, p. 283 – 302, 2008. ISSN 0301-9322. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.10.004>.
- WANG, Z. et al. A coupled level set and volume-of-fluid method for sharp interface simulation of plunging breaking waves. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 35, n. 3, p. 227–246, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2008.11.004>.
- WILCOX, D. C. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA Journal*, v. 26, n. 11, p. 1299–1310, 1988. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/3.10041>.
- WILCOX, D. C. Formulation of the k-w turbulence model revisited. *AIAA*, v. 46, n. 11, p. 2823 – 2838, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/1.36541>.
- WILCOX, D. C. et al. *Turbulence modeling for CFD*. [S.l.]: DCW industries La Canada, CA, 1998. v. 2. ISBN 9780963605108.
- WOLFSHTEIN, M. The velocity and temperature distribution in one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 12, n. 3, p. 301–318, 1969. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(69\)90012-X](https://doi.org/10.1016/0017-9310(69)90012-X).
- YAGMUR, S. et al. Experimental and numerical investigation of flow structures around cylindrical bluff bodies. In: EDP SCIENCES. *EPJ Web of Conferences*. 2015. v. 92, p. 02113. Disponível em: <https://doi.org/10.1051/epjconf/20159202113>.
- YAKHOT, V. et al. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 4, n. 7, p. 1510–1520, 1992. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.858424>.
- YOUNG, M.; OOI, A. Comparative assessment of les and urans for flow over a cylinder at a reynolds number of 3900. School of Engineering, The University

of Queensland, 2007. Disponível em: <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.927.411&rep=rep1&type=pdf>.

YOUNGS, D. L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*, Academic Press, 1982. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/249970655_Time-Dependent_Multi-material_Flow_with_Large_Fluid_Distortion.