

ESTEVAN BONADIO AUGUSTO REZENDE

**MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL DE
CONVERSÃO LAGRANGE-EULER NA SIMULAÇÃO DE
ESCOAMENTOS BIFÁSICOS**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
2023

ESTEVAN BONADIO AUGUSTO REZENDE

**MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL DE CONVERSÃO
LAGRANGE-EULER NA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS**

PROJETO DE CONCLUSÃO DE CURSO

apresentado ao Programa de graduação em Engenharia Aeronáutica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **BACHAREL EM ENGENHARIA AERONÁUTICA**.

Área de concentração: Mecânica dos Fluidos e Simulação Numérica.

Orientador: Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto

Uberlândia - MG

2023

Aos que estiveram ao meu lado, família, amigos e professores.

AGRADECIMENTOS

Dedico meus agradecimentos à aqueles que estiveram ao meu lado na faculdade, na vida e nesse momento. A minha família, apesar de longe, sempre perto. Aos meus amigos, que sempre apoiaram minhas escolhas e visões. E em especial ao Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto, Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto, por me guiarem com grande conhecimento e paciência na área de Fluido Dinâmica Computacional (CFD), pela oportunidade de trabalhar juntamente ao Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab) e pela orientação do presente trabalho.

À Equipe de Propulsão e Tecnologia Aeroespacial (EPTA), local o qual tive primeiro contato com CFD e iniciou-se tal paixão. Agradecimento especial ao Prof. Dr. Alexandre Zuquete Guarato, pelo apoio incondicional à equipe, possibilitando todas as conquistas da mesma e de seus membro, dos quais sou também grato.

Agradeço aos meus avós Orides e Márcia pelo apoio e suporte, tanto quanto meus pais Enoch e Paula, juntamente a minha irmã Barbara e todos meus tios, tias e primos, à família que sempre esteve perto de mim e os quais colocaram sua fé no meu caminho trilhado.

Dedicação especial aos amigos feitos nessa jornada: Meres, Enrico, João Lucas, Bizinotto, Zuquete, Zeitoum, Giovana, Lira, Tiago, Bruno, Aline, Maria, Samuel e muitos outros.

Aos professores, diretores, técnicos, reitor, equipe de limpeza, equipe de manutenção e todos os quais fazem de seu trabalho a melhoria e manutenção da Universidade Federal de Uberlândia (UFU), em especial ao núcleo da Faculdade de Engenharia Mecânica (FEMEC). Tanto quanto à empresa Petróleo Brasileiro S.A. (PETROBRAS), pelo apoio não só ao meu projeto, mas ao MFLab e todos os colegas que fiz dentro de ambos.

“Normal people . . . believe that if it ain’t broke, don’t fix it. Engineers believe that if it ain’t broke, it doesn’t have enough features yet.”

(Scott Adams)

REZENDE, E. B. A., **Modelagem matemática e computacional de conversão Lagrange-Euler na simulação de escoamentos bifásicos** '2023'. 88 p. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Aeronáutica) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia - MG, 2023.

RESUMO

Simulações computacionais de fluidos através do método de dinâmica dos fluidos computacional (CFD), estão cada vez mais implementadas em problemas industriais e de design: Asas, escoamentos internos, tubulações, refrigeração, ciclones químicos, meteorologia e várias outras áreas. O presente trabalho aborda a indústria petrolífera e processos de corrosão em tubulações, com o intuito de adicionar à simulação uma metodologia de transformação de partículas discretas através do método de partículas discretas (DPM) lagrangianas para o referencial euleriano de volume de fluido (VOF) do escoamento de interesse, tendo em vista, no presente trabalho, uma interação com fronteira imersa (IB) de uma tubulação em cotovelo simples e escoamentos bifásico de ar e água. Com o objetivo de simplificação do escoamento de partículas da fase discreta e sua eventual conversão para a fase contínua, aumentando então a velocidade da simulação em troca de uma perda pequena em sua acurácia enquanto tal partícula se encontra distante do escoamento da VOF e das IB presentes no domínio, quando próximo, retorna-se à ser resolvido como um escoamento contínuo. O projeto teve sua implementação no código comercial MFSim com sucesso, e resultados, em maior parte qualitativos, são expostos no presente texto.

Palavras-chave: Escoamentos bifásicos, conversão, Lagrange-Euler, Fronteira imersa, Método de partícula discreta.

REZENDE, E. B. A., **Mathematical and computational modeling of the Lagrange-Euler conversion in two-phase flow simulations** '2023'. 88 p. Graduation Conclusion Project (Aeronautical Engineering Degree) – University of Mechanical Engineering, Federal University of Uberlândia, Uberlândia - MG, 2023.

ABSTRACT

Computational fluid dynamics (CFD) simulations are increasingly applied to industrial and design problems, including wings, internal flows, pipelines, cooling systems, chemical cyclones, meteorology, and various other areas. This study focuses on the petroleum industry and corrosion processes in pipelines. The aim is to enhance the simulation by incorporating a methodology for discrete particle transformation using the Lagrangian discrete particle method (DPM) into the Eulerian volume of fluid (VOF) framework of the flow of interest. Specifically, the study involves interaction with the immersed boundary (IB) of a simple elbow pipe and two-phase flows of air and water. The goal is to simplify the particle flow from the discrete phase and eventually convert it to the continuous phase, thereby increasing the simulation speed at the expense of a minor loss in accuracy when the particle is far from the VOF flow and IB present in the domain. When it approaches these boundaries, it is then converted into the VOF continuous flow. The project was successfully implemented in the commercial code MFSim, and the results, predominantly qualitative, are presented in this text.

Keywords: Two-phase flow, Lagrange-Euler, Conversion, Immersed Boundary, Discrete Particle Method DPM.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Ilustração exemplificativa de topo de refinaria: (a) Parte da Esquemática de uma coluna de destilação; (b) Foto de um cotovelo da tubulação.	2
2.1	Definição-limite de massa específica de um fluido contínuo: massa específica calculada em função do tamanho do volume elementar.	6
2.2	Amostra de volume de uma mistura formada por fluido e partículas.	8
2.3	Efeito do número de Stokes na dispersão de partículas em estruturas turbilhonares.	10
2.4	Regimes de um escoamento de fase dispersa em termos do transporte das partículas.	11
2.5	Diagrama esquemático dos tipos de acoplamentos entre as fases contínua e dispersa.	11
2.6	Representação das malhas eulerianas e lagrangianas em um duto imerso.	12
2.7	Ilustração das escalas turbulentas resolvidas em cada um dos métodos de modelagem da turbulência.	14
2.8	Ilustração do método VOF e suas frações para cada célula da malha 3x3.	14
2.9	Ilustração do método VOF.	16
2.10	Representação do gatilho em função da distância entre a partícula e a VOF.	19
2.11	Erro máximo para o cálculo da média de volume finito do valor da célula, em função de $2\delta/\Delta x$ e n_q , o número de pontos de integração em cada direção. Através da metodologia de <i>midpoint integration</i>	20
2.12	Representação do gatilho em função da distância entre a partícula e a IB.	22
3.1	Fluxograma do algoritmo de conversão Lagrange-Euler.	32
3.2	Imagens da sensibilidade da razão entre o diâmetro da partícula e o tamanho da malha computacional S^*	33
4.1	Simulação WTD1: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 1 s$ (direita)	37
4.2	Simulação WTD2: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 1 s$ (direita)	38
4.3	Simulação WTD3: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 0,53 s$ (direita)	38
4.4	Simulação WTD4: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 1 s$ (direita)	39

4.5	Simulação WTD5: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 0,65$ s (direita)	40
4.6	Simulação WTD6.5: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)	41
4.7	Simulação WTD6.a: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)	41
4.8	Simulação WTD7: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)	42
4.9	Simulação WTD8: Contorno volumétrico de viscosidade com blocos de viscosidade de acompanhamento da esteira turbulenta em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)	42
4.10	Simulação WTC1: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 2,54$ s (direita) . . .	44
4.11	Simulação WTC2: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda), $t = 0,59$ s (direita) e partícula adicionada de cor branca.	44
4.12	Simulação WTC2: <i>Zoom</i> da partícula na iteração da conversão (esquerda) e logo após a conversão (direita).	45
4.13	Simulação WTC3: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 0,19$ s (direita) e partículas adicionadas de cor branca.	45
4.14	Simulação WTC4: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda), $t = 1$ s (direita) e partículas adicionadas de cor roxa.	46
4.15	Simulação WTC5: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 5$ s (direita) e partículas adicionadas de cor branca.	47
4.16	Simulação WTC5: Integral da função coloração entre valores 0,1 e 1,0 em função da iteração da simulação.	48
4.17	Malha bidimensional criada utilizando Gmsh e <i>zoom</i> de uma seção retangular plana.	49
4.18	Simulação da tubulação simplificada com conversão para função coloração igual a 0,2 em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 2,9$ s (direita).	50
4.19	Simulação da tubulação simplificada com conversão para função coloração igual a 0,2 em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1,3$ s (direita).	51
4.20	Simulação da tubulação simplificada com conversão em $2\Delta x$ para função coloração igual a 0,2 em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1,3$ s (direita).	52
4.21	Simulação da tubulação simplificada com conversão em $1\Delta x$ para função coloração igual a 0,2 em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1,3$ s (direita).	52
5.1	WTD1	55

5.2	WTD2	56
5.3	WTD3	57
5.4	WTD4	58
5.5	WTD5	59
5.6	WTD6a	60
5.7	WTD65	61
5.8	WTD7	62
5.9	WTD8	63
5.10	WTC1	64
5.11	WTC2	65
5.12	WTC3	66
5.13	WTC4	67
5.14	WTC5	68
5.15	WTC6	69
5.16	Simulação final 1	70
5.17	Simulação final 2	71

LISTA DE TABELAS

2.1	Alguns processos técnicos e industriais envolvendo escoamentos bifásicos dispersos.	7
2.2	Exemplos das principais forças e torques atuantes em um escoamento bifásico. . .	18
4.1	Descrições e objetivos das simulações WTD.	35
4.2	Descrições e objetivos das simulações WTC.	36

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	ii
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Motivação pelo tema	1
1.1.1 Processo de controle de Corrosão	3
1.2 Objetivos	3
1.3 Metodologia	4
1.4 Estrutura do trabalho	4
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1 Hipótese do Contínuo	5
2.2 Escoamentos bifásicos dispersos	7
2.2.1 Escoamentos dispersos: Variáveis de interesse	7
2.2.2 Número de Stokes	9
2.2.3 Número de Weber e regimes densos	9
2.2.4 Tipos de acoplamento	11
2.2.5 Esquema de forçagem direta para IB	12
2.3 Abordagem numérica para escoamentos turbulentos multifásicos	12
2.3.1 Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos dispersos: Euler-Euler	13
2.3.1.1 Metodologia de Volume de Fluido	14
2.3.2 Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos dispersos: Euler-Lagrange	15
2.3.2.1 Transporte de partículas lagrangianas	17
2.3.3 Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos dispersos: Lagrange-Euler	18
2.3.3.1 Metodologia da conversão	18
2.3.3.2 Filtragem das variáveis	19
2.3.3.3 Distância para conversão	20
2.3.3.4 Conversão	21
2.4 MFSim	22
2.5 Fechamento do capítulo	23

3	MODELAGEM MATEMÁTICA E NUMÉRICO-COMPUTACIONAL	24
3.1	Modelagem da fase contínua	24
3.1.1	Formulação fluidodinâmica	24
3.1.2	Modelo de fechamento da turbulência	25
3.1.3	Modelo dinâmico	26
3.1.4	Modelo para escoamentos bifásicos densos incompressíveis e turbulentos	27
3.1.5	Tratamento da fase Euleriana com presença de IB	28
3.2	Modelagem matemática da fase dispersa	28
3.3	Modelagem matemática da conversão Lagrange-Euler	30
3.3.1	Algoritmo	30
3.4	Fechamento do Capítulo	31
4	RESULTADOS E DICUSSÕES	34
4.1	Simulações corroborantes	34
4.2	Resultados das simulações WTD	37
4.2.1	Simulação WTD1	37
4.2.2	Simulação WTD2	37
4.2.3	Simulação WTD3	38
4.2.4	Simulação WTD4 e WTD5	39
4.2.5	Simulação WTD6.5 e WTD6.a	40
4.2.6	Simulação WTD7	41
4.2.7	Simulação WTD8	42
4.2.8	Conclusão da análises WTD	43
4.3	Resultados das simulações WTC	43
4.3.1	Simulação WTC1	43
4.3.2	Simulação WTC2	44
4.3.3	Simulação WTC3	45
4.3.4	Simulação WTC4	46
4.3.5	Simulação WTC5	46
4.3.6	Conclusão das análises WTC	48
4.4	Resultados das simulações finais	48
4.4.1	Adição de IB	48
4.4.2	Resultados	49
4.4.3	Sensibilidade das variáveis definidas pelo usuário	51
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	53
	APÊNDICE A	54

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Atualmente as diversas indústrias do mundo estão cada vez menos utilizando a prototipagem como método de design ou resolução de problemas em relação as simulações numéricas (AL-SHEBEEB, 2016), o alto custo associado com os materiais, a mão de obra e instrumentação estão sendo substituídos por ferramentas essas ferramentas computacionais de simulação, de tal forma que é possível prever os movimentos das nuvens, o escoamento sobre um avião inteiro e bombeamento de petróleo em refinarias de alto mar com profundidades além do pré-sal, com custos muito inferiores aos associados com a prototipagem.

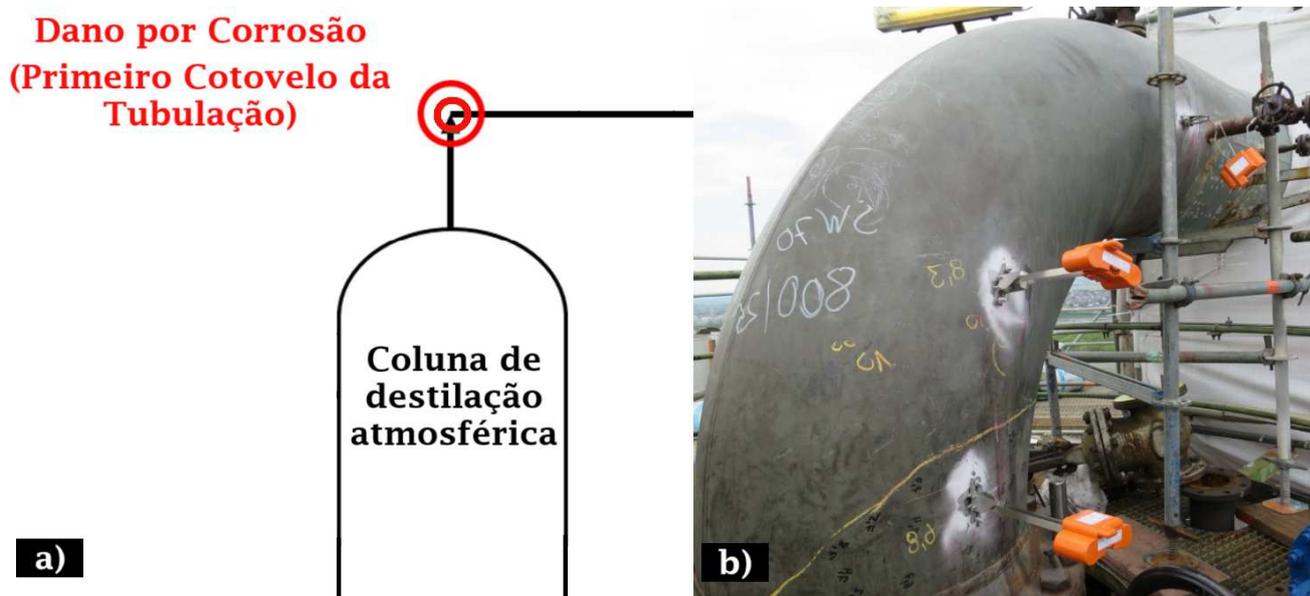
As melhorias em velocidade, acurácia e custo de simulações CFD são distribuídas em 2 grandes vertentes, as melhorias relacionadas aos hardwares, a qual novas arquiteturas de processadores, placas de vídeo mais potentes, placas de RAM com maior frequência e capacidade, o aumento do armazenamento de discos rígidos entre outros fatores, tanto quanto as melhorias de software e metodologias de simulação, métodos de inversão de matrizes mais acurados e rápidos, modelos de fechamento da turbulência com maior acurácia e menor custo para uma família de aplicações, paralelização de núcleos na malha computacional, discretização de partículas de fluido em função de seu tamanho relativo. A soma das duas vertentes é essencial para o futuro das simulações de engenharia (KRAUSE, 2023; ZEIGLER *et al.*, 2023), a qual abrange cada vez mais problemas complexos e multi físicos, o presente trabalho visa a implementação e melhoria da utilização da metodologia Lagrange-Euler dentro do código MFSim.

1.1 Motivação pelo tema

Um escoamento multifásico no topo de torre de destilação, como exemplificado na Fig. 1.1, em uma refinaria petrolífera é sujeita à corrosão nas tubulações, já que há presença de HCl , H_2S , CO_2 e seus subprodutos químicos em altas concentrações (MARQUES, 2022), a predição das interações entre os fluidos, as concentrações dos solutos e da parede no processo corrosivo de forma

puramente analítica é impraticável, a prototipagem para problemas em tempo real não podem ser verificados com rapidez e grandes mudanças, portanto a simulação numérica com sua maleabilidade e velocidade são as mais indicadas para resolução deste problema.

Figura 1.1: Ilustração exemplificativa de topo de refinaria: (a) Parte da Esquemática de uma coluna de destilação; (b) Foto de um cotovelo da tubulação.



Fonte: Local de interesse das análises. Adaptado de SCHEMPP *et al.* (2017).

Os produtos da indústria de óleo e gás são fundamentais para os setores de transporte, representando fontes essenciais de energia para as atividades diárias da população e o desenvolvimento industrial. Eles são utilizados na produção de uma ampla gama de itens, como fertilizantes, medicamentos, tintas, tecidos industriais e plásticos, obtidos a partir do refinamento de produtos petroquímicos e seus subprodutos, como amônia e enxofre.

Entretanto, o processo de refino do petróleo é intrinsecamente arriscado. As refinarias operam em condições elevadas de pressão e temperatura, conduzindo inúmeras operações complexas. Essa combinação de fatores expõe as refinarias a diversos fenômenos corrosivos, podendo resultar em acidentes significativos. Tais incidentes não apenas causam a perda de contenção do fluido de processo, mas também impactam trabalhadores, o meio ambiente e a economia (ALMOUBARAKI; OBOT, 2021).

A abordagem do presente texto tem como objetivo a melhoria do código MFSim com a implementação da conversão Lagrange-Euler para essa família de simulações multifásicas. Com o objetivo primário sendo a diminuição do poder e do tempo computacional requerido, mesmo com uma perda de acurácia pela modelagem em DPM da parcela do fluido e não resolução dela, mesmo que através dos modelos de fechamento, até que um gatilho seja acionado e a transformação Lagrange-Euler aconteça.

1.1.1 Processo de controle de Corrosão

Segundo Ossai (2012), o processo de corrosão e desgaste está associado à maioria das falhas da indústria petrolífera, esse fenômeno decorrente da presença de substâncias corrosivas no fluxo das tubulações metálicas ao longo das diversas fases do processo de refino. O processo de corrosão devido aos contaminantes podem ocorre em qualquer tipo de unidade de destilação de petróleo bruto, mas o composto processado em unidades de refino gera um ambiente ainda mais corrosivo, pela presença de, mas não exclusivo, sais inorgânicos, compostos de enxofre, nitrogênio e ácidos orgânicos, aumentando a taxa corrosiva em comparação.

O funcionamento de uma refinaria começa no bombeamento do óleo cru através de trocadores de calor para o pré-aquecimento e resfriamento da parte dos fluidos reintroduzidos depois das torres de fracionamento de volta à mistura. Essa mistura poderá ser aquecida até aproximadamente 160°C, retirando toda a água e sais, dentre também outros componentes químicos não especificados, essa etapa é denominada dessalgação. Novamente a mistura é repassada por pré-aquecedores e pelo forno atmosférico, antes de então ser transportado à torre de destilação atmosférica, onde o óleo é então separado em: gases, diesel leve e diesel pesado, pela sua massa específica baixa os gases flutam até o primeiro cotovelo da tubulação que os transportaria aos condensadores, então sendo finalmente separados as partes de água, nafta e gases dissolvidos (AL, 2017). SCHEMPP *et al.* (2017) apresenta esquemas e fluxogramas de uma refinaria completa de destilação, para o presente trabalho somente o dano por corrosão no cotovelo de topo de refinaria, através de mudança das variáveis termodinâmicas local, será avaliado para melhoria de simulação.

Com esses estudos e futuras adições de mecanismos que contribuam a corrosão, a simulação de CFD multi física terá possibilidade de localizar possibilidades de melhoras, tanto em um sentido geral, para diferentes topos de refinarias, tanto quanto para a de interesse específica da empresa PETROBRAS.

Cada via de redução da corrosão apresenta variáveis de interesse, como limites de temperatura e pressão, para a redução do ponto de orvalho de NH_4CL , por exemplo. O presente trabalho segue como variáveis de interesse a melhor localização de áreas contendo filmes de fluido, criados através de sprays de partículas da fase líquida, e suas eventuais mudanças de propriedades locais de transferência de calor, massa e velocidade.

1.2 Objetivos

O objetivo principal do trabalho é a implementação, otimização de parâmetros e das análises tanto quanto a validação do modelo numérico-computacional para a transformação Lagrange-Euler de partículas, primordialmente para escoamentos bifásicos. Resume-se os pontos elencados em:

1. Realizar uma revisão bibliográfica externa sobre implementações do algoritmo em códigos, tanto quanto uma revisão bibliográfica interna de documentos do criados para uso exclusivo do laboratório MFLab;

- (a) Metodologias base implementadas no MFSim: VOF, IB, transporte lagrangiano de partículas em DPM e transformações Euler-Lagrange;
 - (b) Estudo do tipo de análise a ser feita, elencar pontos a serem cumpridos e melhorias para o usuário final do produto;
 - (c) Comparação do produto final com outros estudos.
2. Implementação do algoritmo Lagrange-Euler, elencar as melhores metodologias à serem utilizadas das já disponíveis no MFSim e realizar o pós-processamento de simulações.
 3. Validar se a quantidade de massa foi conservada na transformação.

1.3 Metodologia

Para o melhor entendimento dos fenômenos envolvidos já existentes no código, e para a implementação desejada, realizou-se uma revisão bibliográfica. A revisão se estendeu para todos os tipos de trabalhos científicos presentes de forma pública e de forma privada dentro dos projetos sendo realizados ou já realizados do laboratório, do quais foram feitos em conjunto à PETROBRAS e outras empresas.

O código CFD utilizado foi o MFSim, o qual surgiu no laboratório MFLab com o trabalho de VILLAR (2007), abordando escoamentos bifásicos e hoje em dia se estendendo para numerosas aplicações envolvendo análise de escoamentos de fluidos. O código, predominantemente, está escrito em Fortran, C, Shell e C++, o presente trabalho abrangeu em especial as linguagens Fortran e C.

A metodologia utilizada para implementação da transformação Lagrange-Euler é da implementação de uma *bounding box* para conversão seguindo Evrard (2019), a qual define que, caso uma partícula Lagrangiana esteja próximo de uma IB ou de uma interface gás-líquido ou líquido-líquido, através de VOF, a partícula deverá ser convertida para o referencial Euleriano.

1.4 Estrutura do trabalho

A divisão escolhida para melhor representação do trabalho feito consiste em 5 capítulos. O primeiro consiste na introdução ao problema e metodologia utilizada para realização do mesmo, o capítulo 2 descreve a revisão bibliográfica dos estudos públicos utilizados e as ideias gerais dos estudos privados do laboratório. No capítulo 3, a modelagem numérica e computacional utilizada, com ênfase na conversão Lagrange-Euler. O capítulo 4, a divisão dos passos de simulação, para melhor estruturação possível do caso, de forma que a simulação final fosse bem estruturada, juntamente com a validação acerca do problema e seu pós-processamento. Por fim, o capítulo 5, a conclusão do trabalho, explicitando pontos positivos da implementação e pontos-chaves para melhoria futura da mesma e futuras eventuais validações extras elencadas. O Apêndice A apresenta os vídeos das simulações feitas.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O entendimento de escoamentos multifásicos, tanto dispersos ou densos, é o principal pilar para a implementação do trabalho. Por tanto, para melhor abordagem numérico computacional, será a parte mais detalhada no presente capítulo.

Os conceitos fundamentais, embasamento teórico, suas características gerais, os fenômenos presentes e as abordagens numéricas desse tipo de escoamento serão explicitadas a seguir.

2.1 Hipótese do Contínuo

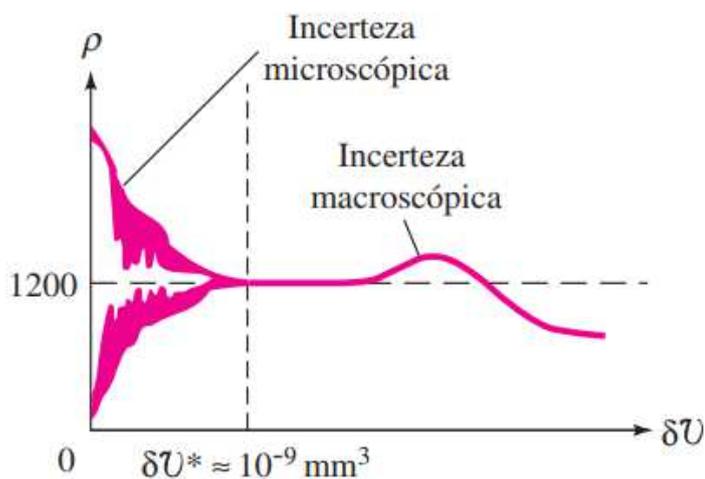
A modelagem dos escoamentos de fluidos newtonianos é de extrema dificuldade, em especial pela característica das incertezas tanto microscópicas quanto macroscópicas ao se estudar volumes de fluidos. Na primeira, a necessidade de se calcular a interação entre todas as moléculas no meio é impraticável pela quantidade de moléculas presentes em 1 mol de água, equivalente a 18 mililitros, seria necessário uma ordem de grandeza de 10^{23} cálculos para uma variável para um volume tão pequeno, o que é infactível. Já para um volume muito grande de fluido, as diferenças de propriedades e outras variáveis, como velocidade, ficam sensíveis à mudança da posição, em outras palavras, não se pode fazer uma média dessas propriedades, em um exemplo concreto, não se pode calcular a temperatura do mar em todos os pontos a partir da mensura em um ponto específico.

A metodologia elencada para abordar esse problema é a hipótese do contínuo, a qual define que, se uma quantidade de fluido for definida por um volume maior que o livre caminho médio das moléculas, o qual apresentará massa específica constantes de forma estatística, sendo esse volume também menor que o comprimento de transformação viscosa e menor que um volume suficientemente grande, o qual apresentaria valores estatísticos não constantes. Calcula-se então a massa específica de um fluido através de:

$$\rho = \lim_{\delta V \rightarrow \delta V^*} \frac{\delta m}{\delta V}, \quad (2.1)$$

de forma que, δm é a massa molecular e δV o volume elementar dessa parcela. White (2011) resume a análise com a figura Fig. 2.1, de forma que o valor da massa específica acima de 10^{-9} mm^3 tende a se estabilizar, portanto esse valor, definido como δV^* , é conhecido por volume-limite. Com isso, a massa específica passa a ser modeladas através de uma função pontual e todas as propriedades variam de forma contínua no espaço.

Figura 2.1: Definição-limite de massa específica de um fluido contínuo: massa específica calculada em função do tamanho do volume elementar.



Fonte: Retirado de White (2011).

Aplicações industriais de engenharia se encontram na faixa do contínuo, já que as dimensões físicas são muito maiores que o espaçamento molecular, o número de Mach é menor que 15 que categoriza um comprimento de transformação viscosa muito próximo ou menor que o livre caminho médio das moléculas, portanto essa simplificação é condizente com as aplicações desejadas. De acordo com a hipótese do contínuo:

- Não há espaços vazios no interior do fluido e a menor fração material é uma partícula de fluido;
- As propriedades, como massa específica, velocidade e temperatura, variam de forma contínua no fluido, isso acarreta em partículas suficientemente pequenas de forma que propriedades do cálculo diferencial é válido.

Para o intuito de escoamento multifásicos, todas as fases são modeladas por meios contínuos, tanto quanto podem ser modeladas por fases contínuas e por fases dispersas.

2.2 Escoamentos bifásicos dispersos

Modela-se escoamentos bifásicos, ou também multifásicos, de forma dispersa quando há necessidade de modelar escoamentos, por exemplo, gás-sólidos, líquido-sólidos, gás-gotículas, líquido-gotículas ou líquido-bolha de forma não materialmente conexa. Santos (2019) adapta de Sommerfeld (2017) a Tabela 2.1 de aplicações industriais.

Tabela 2.1: Alguns processos técnicos e industriais envolvendo escoamentos bifásicos dispersos.

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

Fonte: Santos (2019).

A aplicação de fase dispersa em escoamentos multifásicos depende de vários fatores, como descrito pelo segundo capítulo de Crowe (2011) e por Sommerfeld (2017), os quais serão resumidamente explícitos a seguir. Dessa maneira, necessita-se definir alguns parâmetros e propriedades, levando em conta também outros fenômenos, tanto como colisão quanto coalescência de gotículas e bolhas no escoamento. Como usualmente utilizado, o termo “partículas” será utilizado para referenciar qualquer tipo de partícula sólida, gotas, gotículas ou bolhas, de forma não específica de sua composição.

2.2.1 Escoamentos dispersos: Variáveis de interesse

Em um escoamento disperso qualquer, um volume de fluido contém partículas espalhadas, conforme a Fig. 2.2, sua fração volumétrica da fase dispersa é calculada através da Eq. (2.2).

$$\alpha_d = \frac{V_d}{V_m} = \frac{1}{V_m} \sum_{n=1}^{N_p} V_{p_n}. \quad (2.2)$$

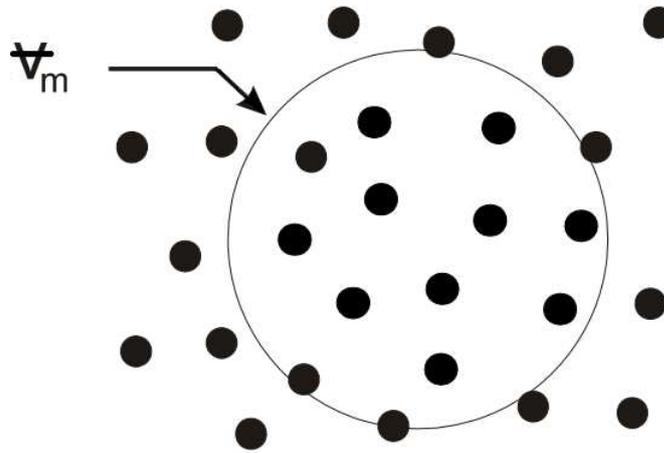
Compreendendo N_p como o número de partículas no interior de um volume de mistura V_m e o volume da fase dispersa V_p . Analogamente pode ser calculada a fração volumétrica da fase contínua, de forma que V_c representa este volume, através das equações:

$$\alpha_c = \frac{V_c}{V_m}, \quad (2.3)$$

$$\alpha_c + \alpha_d = 1, \quad (2.4)$$

como ambas frações modelam o todo de um volume fixo do meio, a soma das duas frações V_c e V_d descrevem o todo, ou, no caso de uma razão com o volume deste meio, a unidade.

Figura 2.2: Amostra de volume de uma mistura formada por fluido e partículas.



Fonte: Adaptado de Crowe (2011).

A concentração do particulado é obtida através da razão entre a quantidade da substância de interesse, como, por exemplo, o número de partículas e seu volume de amostra, descrito matematicamente como:

$$n_p = \frac{N_p}{V_m}, \quad (2.5)$$

Sommerfeld (2017) explicita que, para o cálculo da carga mássica de um escoamento η , deve-se calcular a razão entre as vazões mássicas das partículas \dot{m}_p e de fluido \dot{m}_f :

$$\eta = \frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_f} = \frac{\alpha_d \rho_p U_p}{(1 - \alpha_d) \rho U_f}, \quad (2.6)$$

de forma que, ρ_p é a massa específica das partículas e ρ a massa específica do fluido, as velocidades das partículas U_p e do fluido U_f são velocidades médias em uma dada seção transversal.

2.2.2 Número de Stokes

O número de Stokes St é uma grandeza adimensional que descreve o comportamento das partículas em relação ao fluxo de fluido no qual estão suspensas. Em outras palavras, ele é determinado pela relação entre o tempo de resposta da partícula τ_p e o tempo característico associado ao fluxo do fluido τ_f (CROWE, 2011).

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f}. \quad (2.7)$$

O cálculo do tempo de resposta da partícula está intimamente ligado ao tipo de escoamento, especialmente ao estado da matéria que compõe a fase dispersa. Porém, é possível resolver o tempo característico do escoamento da seguinte maneira:

$$\tau_f = \frac{l}{U_\infty}, \quad (2.8)$$

representando o comprimento característico do escoamento l e a velocidade da corrente livre U_∞ . No entanto, caso as partículas estejam imersas em um escoamento turbulento, o tempo característico é associado à escala de tempo integral da turbulência, que é expressa em termos da energia cinética turbulenta k e da potência específica de transformação viscosa ε (SOMMERFELD, 2017).

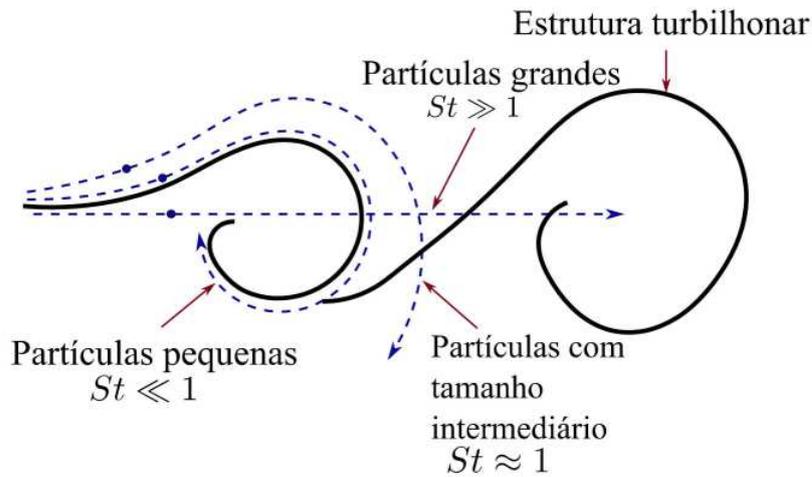
$$\tau_t = \frac{k}{\varepsilon}. \quad (2.9)$$

Quando $St \ll 1$, o tempo de resposta das partículas é significativamente inferior ao tempo característico do escoamento, permitindo que as partículas reajam às alterações de velocidade no escoamento. Assim, as partículas acompanham as estruturas turbilhonares do escoamento. Em contraste, quando $St \gg 1$, as partículas não têm o tempo necessário para reagir às variações de velocidade no escoamento, resultando em trajetórias praticamente lineares através das estruturas turbilhonares. Em conclusão, outra situação possível ocorre quando $St \approx 1$, resultando em um tempo de resposta da partícula aproximadamente igual ao tempo característico do escoamento. Isso leva as partículas a seguir quase completamente a trajetória das estruturas turbilhonares. Nessa situação, o deslocamento das partículas é minimamente influenciado pelo escoamento, e devido à sua inércia, as partículas não conseguem acompanhar integralmente as estruturas turbilhonares (CROWE, 2011). A Fig. 2.3 ilustra as trajetórias das partículas, considerando essas diversas possibilidades para os diferentes números de Stokes.

2.2.3 Número de Weber e regimes densos

O número de Weber representa fisicamente a relação entre os efeitos inerciais e os efeitos gerados pela tensão superficial nas gotas (ou bolhas), tornando-se um parâmetro valioso para an-

Figura 2.3: Efeito do número de Stokes na dispersão de partículas em estruturas turbilhonares.



Fonte: Retirado de Freitas (2023), adaptado de Crowe (2011).

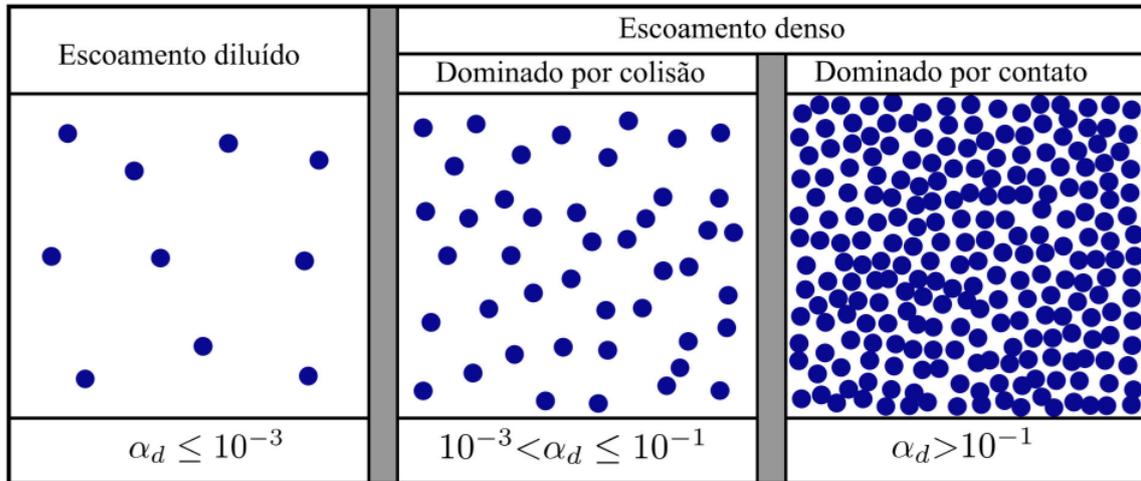
tecipar o resultado de um processo de colisão. O cálculo do número de Weber pode ser realizado mediante a seguinte expressão:

$$We = \frac{\rho_c d_2 v_{prel}^2}{\sigma}, \quad (2.10)$$

na Eq. (2.10), ρ_c representa a massa específica da fase contínua, d_2 é o diâmetro da menor gota (ou bolha), v_{prel} é a velocidade relativa entre as gotas (ou bolhas) envolvidas na colisão, e σ é a tensão superficial que atua sobre a gota (ou bolha) em análise. O intuito do trabalho é explicitar o futuro uso do número de Weber, em especial o caso dos seus valores críticos, quando o valor crítico é atingido há a quebra das gotas (ou bolhas) pelo grande efeito dos efeitos inerciais, para uma melhor explicitação desses valores críticos de Weber, consulte Lau *et al.* (2014).

Uma sugestão proposta por Crowe *et al.* (2011) para determinar se o escoamento deve ser abordado como diluído ou denso é avaliar a fração volumétrica da fase dispersa. Como ilustrado na Fig. 2.4, os escoamentos são classificados como diluídos quando a fração volumétrica é inferior a 0,001. Para frações volumétricas superiores a esse valor, os escoamentos são considerados densos, e podem ser categorizados em dois regimes distintos: dominado por colisão e dominado por contato. Se as partículas se chocarem umas com as outras, mas o tempo de contato for inferior ao intervalo de tempo entre as colisões, o escoamento é caracterizado como dominado por colisão. Contudo, se as partículas mantiverem um contato constante, o escoamento é caracterizado como dominado por contato, e os valores da fração volumétrica da fase dispersa são superiores a 0,1. Os escoamentos densos serão os utilizados pelo trabalho, já que o objetivo da aplicação é para tais escoamentos.

Figura 2.4: Regimes de um escoamento de fase dispersa em termos do transporte das partículas.

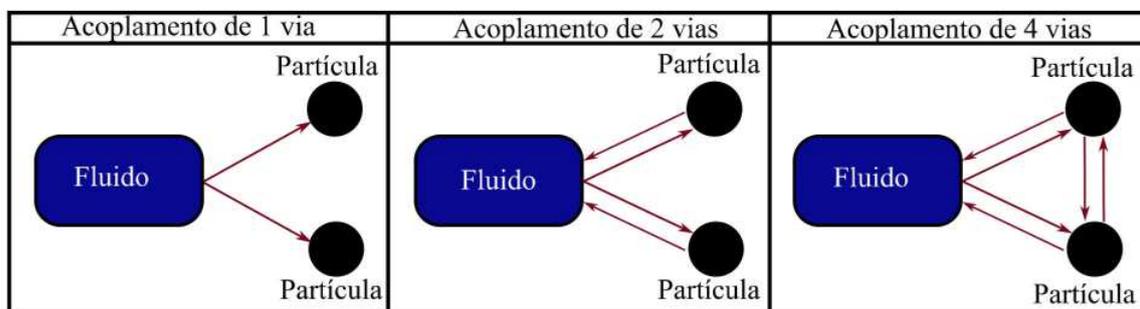


Fonte: Retirado de Freitas (2023), adaptado de Crowe (2011).

2.2.4 Tipos de acoplamento

A existência de diversas fases dita que elas terão influência entre si, a interação entre elas pode ou não ser modelada na totalidade em função da fração volumétrica da fase dispersa (ELGHOBASHI, 1994). O acoplamento de uma via acontece quando a fase contínua influencia a fase dispersa, sem que essa fase dispersa cause influência na fase contínua. Por outro lado, no acoplamento de duas vias, os efeitos de uma fase sobre a outra são considerados de maneira mútua, mas não há influência das partículas entre si próprias. Já no acoplamento de quatro vias, a influência de todas as partes, fase dispersa, fase contínua e partículas são modeladas. A Fig. 2.5 exemplifica cada tipo de acoplamento.

Figura 2.5: Diagrama esquemático dos tipos de acoplamentos entre a fase contínua e dispersa.



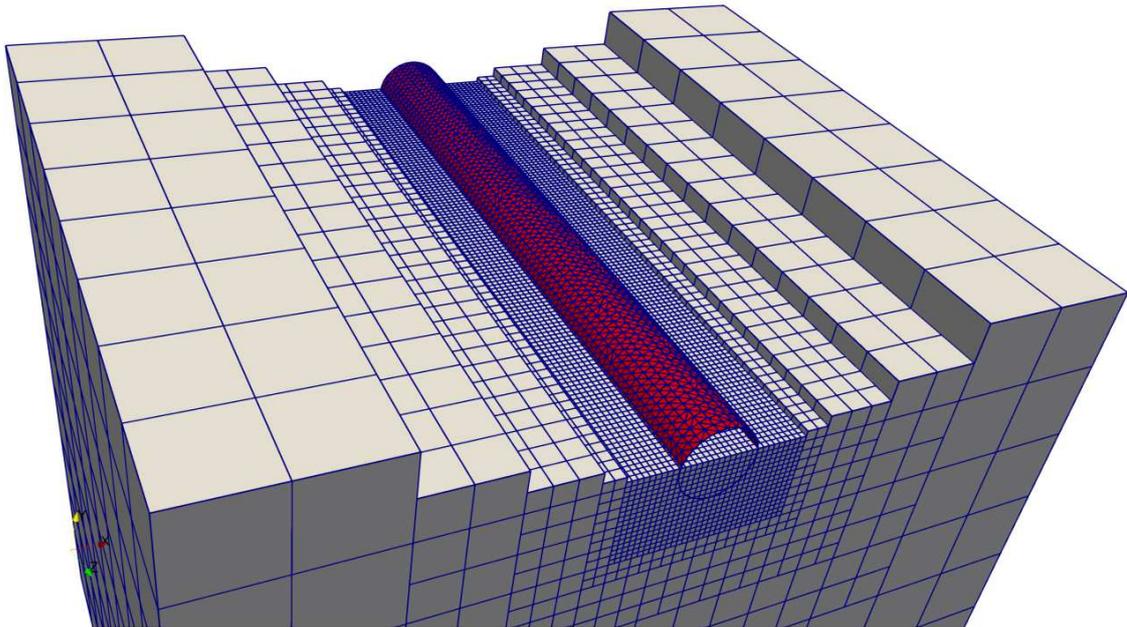
Fonte: Retirado de Freitas (2023), adaptado de Santos (2019) e Elghobashi (1994).

Os diversos tipos de acoplamentos presente na literatura e no código são explicitados mas não influenciam na criação do trabalho, pois como será explícito nos próximos capítulos, não se utiliza nenhuma variável advinda do tipo de acoplamento escolhido no código.

2.2.5 Esquema de forçagem direta para IB

A adição de paredes com condição de contorno de não deslizamento no domínio computacional é feita através da correspondência da parede, no referencial Lagrangiano, e o escoamento, na fase Euleriana. Duas malhas independentes são utilizadas, a malha do próprio domínio computacional e uma malha bidimensional representativa da geometria imersa, exemplificada pela Fig. 2.6.

Figura 2.6: Representação das malhas eulerianas e lagrangianas em um duto imerso.



Fonte: Adaptado de Santos (2019).

No código MFSim a malha bidimensional é tratada a partir de malhas triangulares, a abordagem utilizada pelo código é baseado na metodologia multi-forçagem de Wang, Fan e Luo (2008), adaptado do método de forçagem direta (DFS) proposto por Uhlmann (2005), implementada no MFSim através de Vedovoto, Serfaty e Neto (2015) e Melo (2007).

2.3 Abordagem numérica para escoamentos turbulentos multifásicos

Os modelos atuais de modelagem do fechamento da turbulência podem ser divididos em três classes principais, sendo eles: Simulação Computacional Direta (DNS), Simulação das Grandes Estruturas (LES) e Equações via Média de Boussinesq-Reynolds (RANS) ou Equações Transientes via Média de Boussinesq-Reynolds (URANS) (NETO, 2020). As quais são escolhidas pela necessidade das variáveis a serem colhidas, em função das frequências associadas da distribuição da densidade espectral de energia específica turbulenta e quais podem ser modeladas ou calculadas para o problema em questão.

As metodologias da classe DNS requerem malhas e passos de tempo menores que o comprimento e o tempo característicos de Kolmogorov, “Com essa metodologia, calcula-se diretamente

100 % da física do escoamento modelado."(NETO, 2020), portanto são extremamente pesadas computacionalmente mas apresentam resultados com a maior acurácia possível em relação aos escoamentos reais.

Já os modelos LES apresentam os modelos conhecidos como modelos sub-malha, de forma que modela-se a interação entre duas partes do espectro,

“Na banda de baixas frequências ou de baixos números de onda, todas as grandes estruturas turbilhonares são calculadas diretamente, e a interação dessa banda das maiores estruturas com a banda das menores estruturas é modelada com os chamados modelos sub-malha. Quanto mais refinada for a malha espacial e quanto menor for o passo de tempo, mais larga se tornará a banda resolvida e menores serão as interações a serem modeladas com os chamados modelos sub-malha."(NETO, 2020),

portanto a modelagem em LES apresenta uma certa maleabilidade com o interesse de sua aplicação, pode-se modelar mais as maiores frequências ao invés de as calcular, portanto a demanda computacional pode ser reduzida significativamente, apesar da perda de acurácia. Elenca-se a comparação entre DNS e LES, de forma que a última tende a primeira enquanto o tamanho da malha e passo de tempo tende aos valores característicos de Kolmogorov.

Por fim, as metodologias da classe RANS/URANS segundo (NETO, 2020) “Com essa metodologia, diz-se que calcula-se pouco (...) e modela-se muito...”, o que corrobora com o tipo de filtragem feita, a média temporal, de forma que uma única frequência é calculada em todo o espectro de energia. Apesar dessa grande limitação e a necessidade de métodos numéricos robustos para evitar a baixa taxa de convergência do método, o baixo custo computacional associado à análise ainda trás dados sobre o escoamento de grande importância.

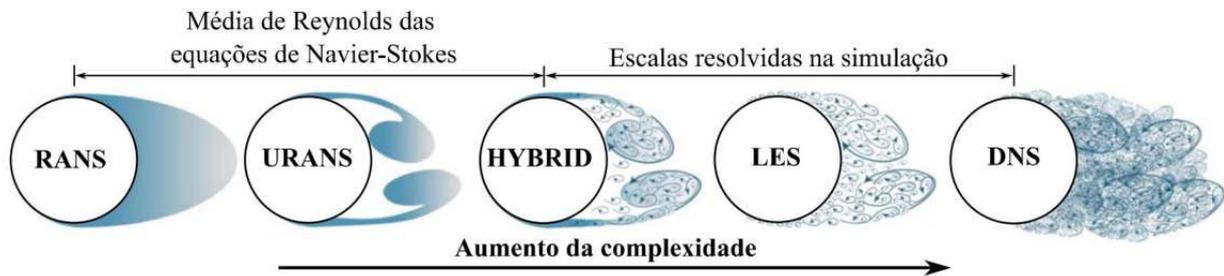
Entre as metodologias, existem uma gama de modelos de fechamento da turbulência, desde modelos a zero equações de balanço como o modelo do Comprimento de Mistura de Prandtl, até o modelo baseado nas Tensões de Boussinesq-Reynolds, o qual apresenta 17 equações de balanço completamente acopladas. No presente trabalho será utilizado e descrito de forma mais aprofundada a metodologia LES, enquanto os restantes modelos serão somente explicitados. Os modelos são representados pela Fig. 2.7.

Num contexto de escoamentos multifásicos, a utilização exclusiva de uma das metodologias mencionadas anteriormente não é adequada, uma vez que é necessário lidar com fases distintas. Assim, surgem duas preocupações adicionais: o tratamento da fase dispersa do escoamento e a forma de conectar as duas fases, considerando a possibilidade de uma fase influenciar a outra. Nesse contexto, três abordagens numéricas podem ser empregadas: Euler-Euler, Euler-Lagrange e, o foco do presente trabalho, Lagrange-Euler.

2.3.1 Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos dispersos: Euler-Euler

Na abordagem Euler-Euler ou modelagem de dois fluidos (TFM), as duas fases do escoamento apresentam o seu comportamento através de dois meios contínuos interpenetrantes, dessa forma são tratadas no referencial euleriano. A abordagem se ramifica para as modelagens: Vo-

Figura 2.7: Ilustração das escalas turbulentas resolvidas em cada um dos métodos de modelagem da turbulência.



Fonte: Retirado de Freitas (2023), adaptado de Hart (2016).

lume of Fluid (VOF), *Level-Set Method* (LSM). As quais descrevem propriedades como a massa das partículas por unidade de seu volume são tratadas como propriedades contínuas, enquanto a velocidade das partículas são consideradas como a velocidade média ao longo de um volume de controle ou célula computacional. Adicionalmente, a transferência de massa, momento ou energia através da interface entre as fases demanda uma média sobre os volumes de controle, conforme destacado por Sommerfeld (2017).

2.3.1.1 Metodologia de Volume de Fluido

O presente trabalho utiliza somente a metodologia VOF por requerimento de projeto e sua aplicação, os demais métodos podem ser consultados de uma melhor forma através de (SOMMERFELD, 2017; OSHER; SETHIAN, 1988; SETHIAN; SMEREKA, 2003). Tanto quanto de forma resumida através de (SANTOS, 2019; FREITAS, 2023).

Os métodos baseados em VOF acompanham as interfaces móveis e registram o volume fracionário de uma célula computacional preenchida com fluido, exemplificado através da Fig. 2.8.

Figura 2.8: Ilustração do método VOF e suas frações para cada célula da malha 3x3.

0.0	0.0	0.0
0.7	0.5	0.3
1.0	1.0	1.0

Fonte: Adaptado de Freitas (2023).

A metodologia VOF conserva a massa e permite alterações topológicas que surgem durante a quebra e coalescência (SOMMERFELD, 2017). No entanto, a VOF pressupõe que a coalescência ocorre sempre que bolhas ou gotas se aproximam, o que representa um desafio. Outra questão

desafiadora na aplicação da metodologia VOF é a necessidade de reconstrução geométrica da interface para assegurar uma topologia contínua. Diversos métodos para essa reconstrução de interface são discutidos por Rudman (1997).

O método VOF faz uso de uma função indicadora $\phi(x, y, z, t)$, que representa a fração volumétrica de fluido presente em uma posição específica (x, y, z) no tempo t . Essa função pode ser interpretada como a fração volumétrica de uma fase, variando de zero (indicando a ausência total da fase em questão) a um (indicando que o volume está completamente preenchido pela fase de interesse). Assume-se que a interface está localizada em um valor diferente de zero e um. Através da quantidade fracionária de líquido, é possível determinar a posição e orientação da interface em uma célula computacional específica. Portanto, a função indicadora é descrita por:

$$\phi = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_f}, \quad (2.11)$$

na expressão, ε representa a fração volumétrica, enquanto os índices 1, 2 e f correspondem às fases um, dois e à fase que contém a mistura das duas fases anteriores, denominada fase fluida. O deslocamento da fase fluida é descrito por uma equação de advecção:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\delta\phi}{\delta t} + \mathbf{u}_f \cdot \nabla\phi = 0. \quad (2.12)$$

de forma que a densidade da fase fluida ρ_c é definida por:

$$\rho_c = \phi\rho_1 + (1 - \phi)\rho_2. \quad (2.13)$$

Jain, Kuipers e Deen (2014) definem que o cálculo da viscosidade média local do fluido μ_c seja calculada a partir de uma média harmônica da viscosidade cinemática das fases envolvidas μ_1 e μ_2 , seguindo a expressão:

$$\frac{\rho_c}{\mu_c} = \phi \frac{\rho_1}{\mu_1} + (1 - \phi) \frac{\rho_2}{\mu_2}. \quad (2.14)$$

2.3.2 Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos dispersos: Euler-Lagrange

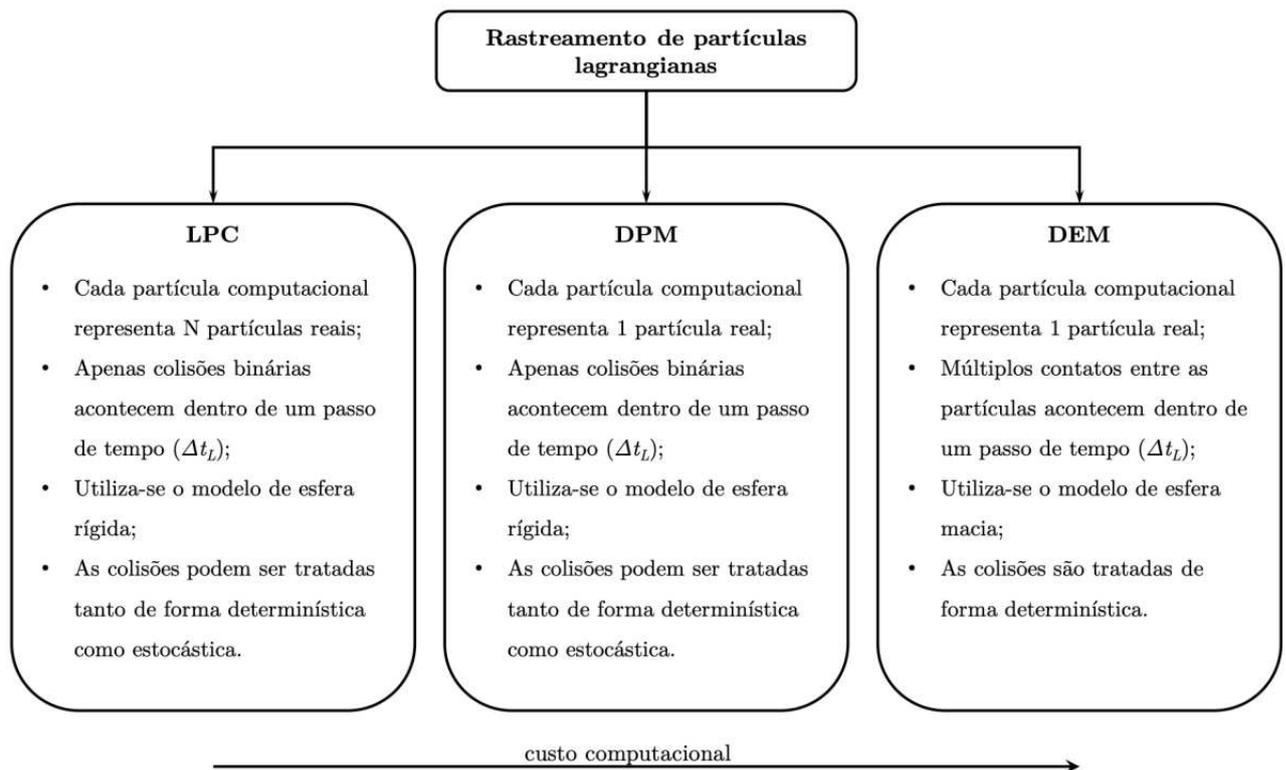
Para a abordagem Euler-Lagrange, a fase contínua é tratada no referencial euleriano, enquanto que a fase dispersa é tratada no referencial lagrangiano. Existem duas grandes classes para modelagem da fase dispersa lagrangiana, a primeira é utilizando de métodos de fronteira imersa (IBM) e a segunda através da modelagem como pontos materiais.

A primeira classe aborda o uso da, como o nome implica, fronteira imersa (IB), assim resolvendo o campo do escoamento ao redor de cada partícula e sua interface. Para escoamentos

denso Kempe e Fröhlich (2012), Maitri *et al.* (2018) explicitam que o custo computacional aumenta drasticamente com o número alto de partículas, quando utilizado o IBM, portanto é inviável seu uso para a presente aplicação.

Já a segunda classe descreve a fase discreta a partir da aproximação ponto-partícula ou esferas perfeitas tanto rígidas quanto macias, o que é exemplificado pela Fig. 2.9. Em contraste à classe de IBM, o escoamento não é resolvido ao redor das partículas, as partículas são rastreadas no campo previamente resolvido, de forma que seu movimento é governado através da segunda lei de Newton. Isso infere um menor custo computacional, já que se modela as forças que a partícula sofre e não as calcula, deferindo um ganho computacional significativo em relação ao outro método. Todas as interações dessas parcelas estão resumidas na Fig. 2.9 seguindo Sommerfeld (2017) e serão demonstradas mas não equacionadas doravante.

Figura 2.9: Ilustração do método VOF.



Fonte: Retirado de Santos (2019).

No modelo de parcela lagrangiana (LPC) as partículas computacionais representam um certo número de partículas reais, sendo assim denominadas de parcelas, para casos em que as partículas reais apresentam um diâmetro médio várias vezes menor que o menor tamanho da malha, o rastreamento de todas elas torna-se viável através desse método.

Para o método da partícula discreta (DPM), todas as partículas reais do sistema são rastreadas e modeladas, analogamente ao modelo LPC essas partículas são modeladas a partir de uma esfera rígida, o que implica que apenas colisões instantâneas ocorrem. Recomenda-se o uso desse

modelo para escoamentos com fração de volumétrica da fase dispersa é menor que 0,1 e não haja contato prolongado entre as partículas.

O método do elemento discreto (DEM) também parte do princípio do rastreamento das partículas no domínio computacional. Em contraste com o método da DPM, o modelo de esfera macia é utilizado, portanto deformáveis, o que utiliza da possibilidade de haver mais de um contato para uma mesma partícula. Esse postulado abre caminho para seu uso em escoamentos com qualquer valor de fração volumétrica da fase dispersa. Mais informações sobre os métodos podem ser consultadas em Santos (2019), Norouzi (2016), Sommerfeld (2017).

2.3.2.1 Transporte de partículas lagrangianas

O presente trabalho aborda em específico as abordagens DPM e DEM, com sua aplicação feita em DPM mas com facilidade para portação ou já direta utilização da metodologia DEM, a qual não será explicitada.

A abordagem lagrangiana ponto-partícula descreve que, a trajetória de cada partícula deve ser resolvida de forma que, a partir da segunda lei de Newton, uma série de equações diferenciais ordinárias sejam calculadas. As forças e torques atuantes nessas partículas promovem uma alteração nas velocidades lineares das mesmas, respectivamente. A forma vetorial das equações advindas da segunda lei de Newton são:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \quad (2.15a)$$

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = \sum \vec{F}, \quad (2.15b)$$

$$I_p \frac{d\vec{\omega}_p}{dt} = \vec{T}, \quad (2.15c)$$

da forma que m_p e I_p são a massa e o momento de inércia da partícula, \vec{x}_p é a posição da partícula, e \vec{u}_p e $\vec{\omega}_p$ são as velocidades linear e angular da partícula. \vec{F} representa as diferentes forças que podem estar atuando na partícula e \vec{T} corresponde ao torque. As forças e torques comumente presentes em escoamentos bifásicos podem ser divididas em classes: forças devido ao campo ou externas, forças fluidodinâmicas, torques fluidodinâmicos e torques e forças devido à colisão, essa divisão é exemplificada através da Tabela 2.2:

A modelagem dessas forças e torques não será apresentada no presente texto, caso seja necessário um maior detalhamento destas aplicações, refere-se à Santos (2019). As forças e torques presentes e atuantes na partícula discreta não são utilizadas para o processo de conversão Lagrange-Euler, mas sim o resultado das mesmas em meio de quantidade de movimento linear e angular, o

Tabela 2.2: Exemplos das principais forças e torques atuantes em um escoamento bifásico.

Classe	Exemplos
Forças de campo	Força Peso, força empuxo, força eletromagnética
Forças fluidodinâmicas	Força de arrasto, força de sustentação devido ao cisalhamento (Saffman), força de sustentação devido à rotação (efeito Magnus), força devido ao gradiente de pressão, força devido à massa adicionada força devido à colisão e força de Basset
Torque	Torque advindo das interações viscosas entre parede e escoamento

Fonte: Santos (2019).

qual é somente traduzido ao referencial Euleriano sem a necessidade de uma nova interação do cálculo das mesmas.

2.3.3 *Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos dispersos: Lagrange-Euler*

A presença de duas fases no escoamento apresenta significativos desafios para sua modelagem, como explicito anteriormente, a simplificação dos particulados a partir da fase lagrangiana apresenta uma diminuição do tempo computacional necessário para a simulação, apesar das restrições e perdas de acurácia. Próximo de paredes ou das próprias fases contínuas, a transferência de massa e de calor se tornam problemas de grande importância, a presença ou não desses filmes de fluido mudam esses parâmetros drasticamente, portanto a redução da acurácia nesse contexto se torna detrimental, portanto, a conversão dessas partícula para o referencial euleriano é necessário. Abordagens para utilização dessa conversão serão explícitos neste subcapítulo.

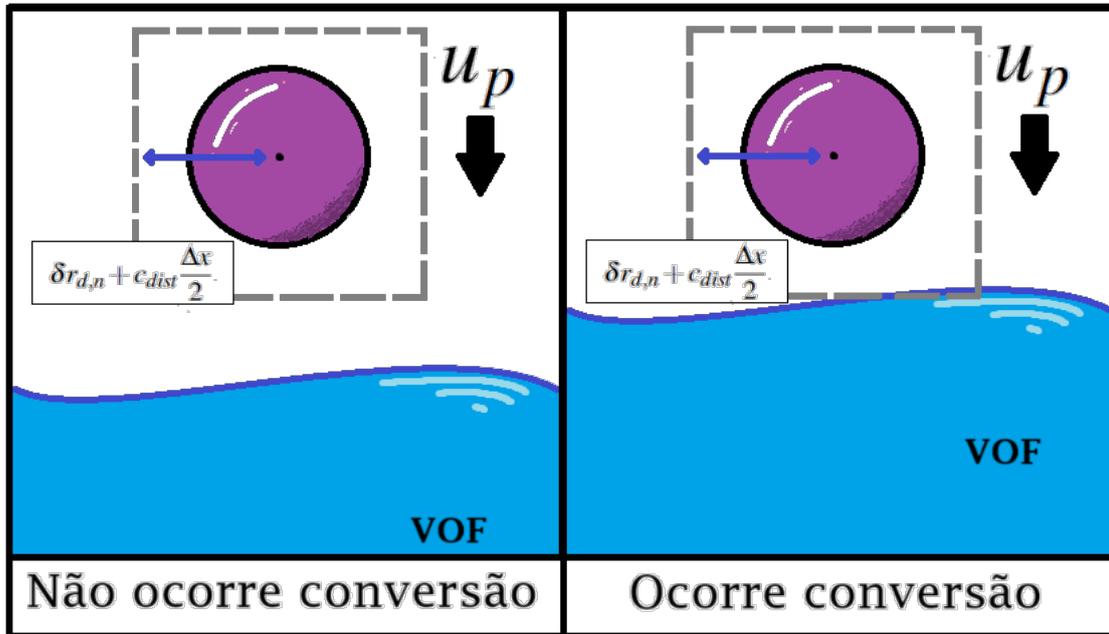
2.3.3.1 *Metodologia da conversão*

Para que ocorra a conversão entre os referenciais, elenca-se inicialmente as propriedades das quais se deseja conservar na conversão. Parte-se do princípio que, de forma análoga à DPM, deve haver invariância da quantidade de massa, da quantidade de movimento linear e de movimento na conversão, portanto serão as variáveis de interesse.

Para que haja conversão, deverá também existir um gatilho para que ela ocorra, de forma que a partícula lagrangiana exista em locais do escoamento dos quais não haja detrimento em função da perda de acurácia, mas, onde há necessidade dessa acurácia, ela esteja presente no referencial euleriano, dessa forma van Wachem et al. (2019) elenca o uso de uma função coloração, a qual será utilizada no presente trabalho, analogamente à referência, ao invés de fração volumétrica da fase dispersa para evitar possíveis confusões de nomenclatura. Os locais de interesse são definidos

como a fronteira de qualquer condição de contorno de IB e locais com existência de VOF, ou função coloração diferente de zero, como exemplificado pela Fig. 2.10.

Figura 2.10: Representação do gatilho em função da distância entre a partícula e a VOF.



2.3.3.2 Filtragem das variáveis

Um simples algoritmo pode ser inferido das condições citadas, apesar disso ainda necessita-se definir um valor de distância entre a DPM e os locais de interesse para que haja conversão dessa partícula, de forma que ela não esteja tão distante e também não esteja imersa ou em contato direto com os locais. van Wachem et al. (2019) descreve um filtro denominado δ o qual descreve uma distância, entre o centro da partícula lagrangiana e a casca e uma esfera, dessa forma pode-se usar a função coloração dentro desse domínio, para identificar a existência de IB ou VOF. Também é citado que a escolha dessa distância é um problema complexo, nota-se pela Fig. 2.11 que o erro de integração da função de filtro no volume de malha diminui com o aumento do tamanho desse filtro. Normalmente para análises lagrangianas o filtro é criado a partir de uma função gaussiana (MAXEY et al., 1997; CAPECELATRO; DESJARDINS, 2013), mas van Wachem et al. (2019) adota uma função Wendland, pela sua eficiência computacional, com extensão radial δ :

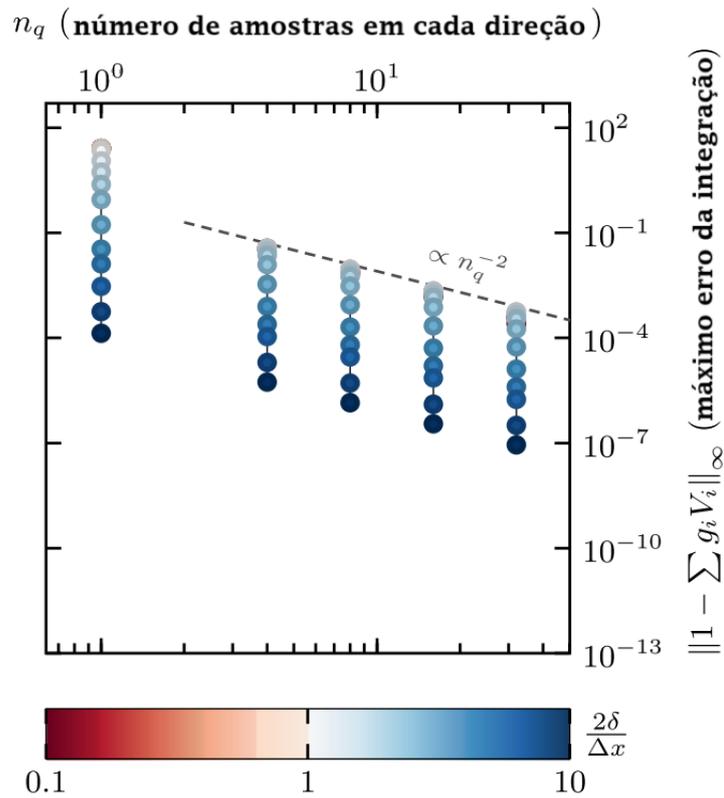
$$\phi_1^w\left(\frac{x}{\delta}\right) = \begin{cases} (4x+1)(1-x)^4 & \text{if } 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{if } x > 1 \end{cases}, \quad (2.16)$$

o filtro é utilizado para haver consistência na conservação de massa e quantidade de movimento linear local. Pela já presença desse processo de filtragem o cálculo do raio do *kernel* é definido por:

$$\delta = f_{ext} r_d, \quad (2.17)$$

com f_{ext} sendo um fator de multiplicação já definido no código MFSim, no presente texto sendo igual a 1,5 e o mesmo valor adotado por Capecelatro e Desjardins (2013). Enquanto o r_d é o raio da partícula lagrangiana. Dessa forma, elenca-se que, se a partícula lagrangiana apresentar um raio maior que um terço do tamanho característico do menor volume da malha, o erro da integração sempre apresentará valores pequenos, em função da Fig. 2.11. Como a atual aplicação prevê o uso de partículas discretas maiores que o volume da menor célula, a análise apresentará baixos erros.

Figura 2.11: Erro máximo para o cálculo da média de volume finito do valor da célula, em função de $2\delta/\Delta x$ e n_q , o número de pontos de integração em cada direção. Através da metodologia de *midpoint integration*.



Fonte: Adaptado de van Wachem et al. (2019).

2.3.3.3 Distância para conversão

Com o pré-processamento das informações necessárias para a conversão, o último fator necessário é a distância a qual as partículas irão se converter do referencial Lagrangiano para o Euleriano. O trabalho de van Wachem et al. (2019) propõe utilizar a seguinte equação para a distância de conversão:

$$\|x_d - x_\Gamma\| > \delta + \frac{3\sqrt{3}}{2}\Delta x, \quad (2.18)$$

a qual propõe x_d sendo o centro de massa da partícula e x_Γ o centro de todas os volumes de malha eulerianas com a função coloração diferente de zero.

A implicação dessa equação é de que, quando uma partícula lagrangiana está a uma distância menor que a soma entre o raio do filtro e o tamanho característico do menor volume da malha multiplicado por um fator constante, essa célula poderá ser convertida.

2.3.3.4 Conversão

Caso todos os gatilhos sejam positivos, o algoritmo para a conversão Lagrange-Euler, adaptando de van Wachem et al. (2019), seguirá os seguintes passos:

1. A função coloração deverá ser atualizada com a contribuição da partícula de fluido.
2. A partícula é removida do referencial lagrangiano.
3. A contribuição em fração de volume da partícula lagrangiana é removida do referencial euleriano. Para estabilidade numérica, a “antiga” fração de volume é atualizada no seu campo, através da remoção de sua contribuição no local.
4. A contribuição de momento linear da partícula é transferida ao referencial euleriano, através da atualização do campo de velocidade seguindo:

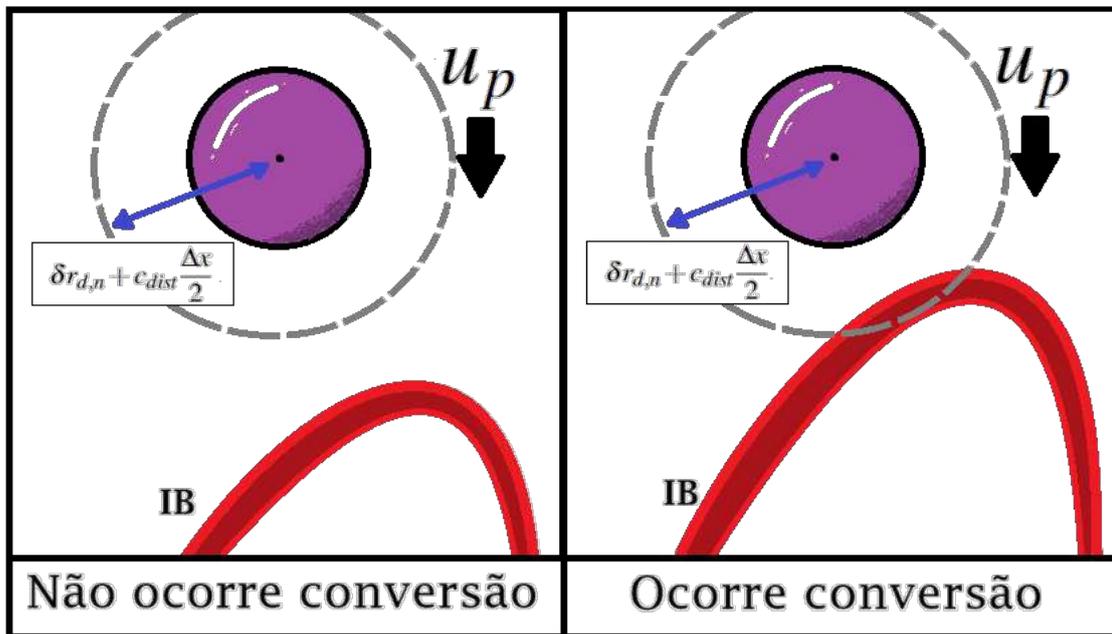
$$u_{i,\text{new}} = \frac{\rho_c u_i + \rho_p \gamma_i u_p}{(1 - \gamma_i)\rho_c + \gamma_i \rho_p}, \quad (2.19)$$

Da equação presente no item 4, têm-se que para a célula de número i , a letra γ é a função coloração, da qual advêm da integral da função filtro em todas as células no volume total K normalizado pelo volume da célula computacional K :

$$\gamma = \frac{1}{V_K} \iiint_K \chi(x_i, t) dx_i, \quad (2.20)$$

o que finaliza a metodologia de conversão Lagrange-Euler, apesar dessa metodologia só explicitar a conversão utilizando a função coloração sem IB, a metodologia é facilmente portada com a única diferença sendo a própria função coloração, a qual deverá indicar a presença da parede. Assim elenca que, a presença da parede poderá ser indicada através de uma nova função coloração γ_w , a qual adquire o valor nulo quando há a presença de uma IB, assim podendo modificar a Eq. (2.18) para a distância entre x_d e uma nova variável x_w da qual representa o centro de todos os volumes de malha euleriana com a função coloração igual ao valor representativo da presença de uma IB, numericamente avaliado através de um valor menor ou igual a $\gamma_w \leq 10^{-6}$.

Figura 2.12: Representação do gatilho em função da distância entre a partícula e a IB.



2.4 MFSim

A presente estrutura de desenvolvimento computacional utilizada é o MFSim, um software desenvolvido pelo Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia, Brasil. Essa plataforma iniciou o seu desenvolvimento em meados de 2007 através da tese de Doutorado de VILLAR (2007), a qual vem continuamente sendo desenvolvido através dos anos, se tornando um código multi-disciplinar. Presentemente, essa plataforma permite aplicações de simulações 3D de problemas envolvendo, mas não só restrito a: escoamentos turbulentos (VEDOVOTO; SERFATY; NETO, 2015; DAMASCENO; VEDOVOTO; SILVEIRA-NETO, 2015), interação fluido-estrutura (FSI) (NETO *et al.*, 2019; SOUZA *et al.*, 2022; STIVAL *et al.*, 2022), escoamentos multifásicos (PIVELLO *et al.*, 2014; BARBI *et al.*, 2018; PINHEIRO *et al.*, 2019; PINHEIRO *et al.*, 2021), escoamentos gás-sólido e gás-líquido (SANTOS, 2019), escoamentos reativos (DAMASCENO; SANTOS; VEDOVOTO, 2018a; CASTRO *et al.*, 2021) e também apresenta modelagens do fechamento da turbulência com metodologias LES para escoamentos isotrópicos e anisotrópicos. Recentemente o código MFSim foi utilizado para a avaliação das operações de descarte de soluções hipersalinas, sendo essencial o uso das regulamentações ambientais locais para minimizar o impacto nos ecossistemas marinhos (MOTA; VEDOVOTTO; ARISTEU, 2023).

A partir da base de dados já presente no código, nas teses, nas dissertações e nos trabalhos criados dentro do MFLab, as simulações serão feitas e expostas, de forma a corroborar a implementação da conversão Lagrange-Euler, tanto quanto auxiliar na evolução do próprio MFSim.

2.5 Fechamento do capítulo

O presente capítulo serve como introdução à metodologias abordadas já no código MFSim e a conversão a ser implementada. Conceitos relacionados a escoamentos multifásicos e em especial os escoamentos bifásicos dispersos foram apresentados, tanto quanto as abordagens numéricas existentes na literatura. A abordagem ponto-partícula de escoamentos Euler-Lagrange e a metodologia de conversão Lagrange-Euler (van Wachem et al., 2019), com o intuito de sua inserção no código MFSim, tanto quanto um melhor estudo da mesma. Explicita o uso da metodologia DPM na fase dispersa e a possibilidade de importação do algoritmo Lagrange-Euler para o modelo DEM. A necessidade e implementação de filtros, as variáveis de importância, os gatilhos necessários a serem implementados e a conservação da quantidade de momento linear são os pontos-chaves resumidos para possibilitar a implementação da conversão Lagrange-Euler.

CAPÍTULO III

MODELAGEM MATEMÁTICA E NUMÉRICO-COMPUTACIONAL

juntamente com a modelagem matemática da metodologia de LES com modelo de fechamento de turbulência sub-malha dinâmico de Smagorinsky adaptado por Germano (GERMANO *et al.*, 1991) e Lilly (LILLY, 1992), o qual não será usado de forma rigorosa, mas sim como um precedente para futuras análises que o utilizarão.

3.1 Modelagem da fase contínua

A modelagem matemática utilizada no presente trabalho, para a fase contínua do escoamento, será apresentada pelas equações de continuidade e as de Navier-Stokes no referencial cartesiano. Posteriormente, a modelagem do problema de fechamento da turbulência, utilizado no presente trabalho, é descrito e detalhado.

3.1.1 *Formulação fluidodinâmica*

As equações de Navier-Stokes acopladas à equação da continuidade representam matematicamente a modelagem completa de escoamentos isotérmicos e incompressíveis, tanto para regimes laminares como regimes turbulentos. Ao descrever essas equações na modelagem discreta e depois em algoritmos computacionais, ou modelagem computacional, atribui-se o nome de DNS, o qual requer malhas extremamente refinadas para que se possa resolver todas as estruturas turbilhonares formadas. O alto custo computacional associado limita a praticidade da aplicação de tais simulações, portanto opta-se por modelar uma banda representativa das altas frequências associadas à distribuição de densidade espectral de energia específica turbulenta do escoamento, utilizando de modelos sub-malha. As equações da continuidade e as de Navier-Stokes cartesianas, em notação indicial, respectivamente são representadas:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + f_i, \quad (3.2)$$

de forma que i e $j = 1, 2, 3$ correspondem às componentes das três direções coordenadas (x, y, z), u é a velocidade instantânea do fluido, ρ descreve a massa específica do fluido monofásico, p representa a pressão local e f_i são as forças externas de campo ou de superfície não explicitadas.

Apesar da implementação prevista no trabalho ser suficientemente generalista para ser aplicável em qualquer modelo de fechamento de turbulência, o modelo escolhido para as implementações será o de LES. A base de tal modelo é a separação em duas bandas as escalas de frequência a serem analisadas, a primeira, para frequências baixas, que é resolvida por inteiro e a segunda, para altas frequências, que é modelada por modelos de sub-malha. O primeiro passo consiste na filtração das equações de continuidade e de Navier-Stokes, através da filtração do sinal, representada por $(\bar{\quad})$ e a simplificação de escoamento incompressível (NETO, 2020):

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\bar{f}_i}{\rho_0}. \quad (3.4)$$

3.1.2 Modelo de fechamento da turbulência

Seguindo a decomposição do termo não linear $\bar{u}_i \bar{u}_j$, resulta-se nas Equações Médias de Boussinesq-Reynolds da quantidade de movimento linear, mas, como proposto por Germano (1986), pode-se utilizar o tensor global sub-malha para obter as seguintes equações:

$$\tau_{ij} \equiv \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \tau_{ij} \right] + \frac{\bar{f}_i}{\rho_0}. \quad (3.6)$$

Boussinesq (1877) utilizando da hipótese do primeiro gradiente, o escalonamento do tensor τ_{ij} em função do gradientes do campo de velocidade, propôs o seguinte modelo de fechamento das equações filtradas, para o Tensor Boussinesq-Reynolds:

$$-\tau_{ij} = \nu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij}, \quad (3.7)$$

$$k \equiv \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}. \quad (3.8)$$

De forma que k é a energia cinética específica turbulenta, o fechamento da metodologia LES se faz da mesma forma, a partir da Hipótese de Boussinesq. Smagorinsky propôs a modelagem sub-malha através do cálculo da viscosidade turbulenta da forma:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 \overline{S_{ij} S_{ij}}}. \quad (3.9)$$

A equação acima apresenta Δ como o tamanho característico da malha de discretização, C_s é a Constante de Smagorinsky e $\sqrt{2 \overline{S_{ij} S_{ij}}}$ é o tensor taxa de deformação. O modelo não se adéqua a presença de paredes, já que existe um alto valor da derivada das componentes de velocidade, elevando de forma não física a viscosidade turbulenta nas camadas próximas a parede.

3.1.3 Modelo dinâmico

Para mitigar o problema de inclusão de paredes no escoamento, Germano *et al.* (1991) propôs utilizar um modelo de fechamento sub-malha dinâmico, o qual relaciona uma função proporcionalidade para o cálculo da viscosidade turbulenta, através de uma segunda filtragem \widehat{G} de largura $\widehat{\Delta} > \overline{\Delta}$, comumente utilizada como o dobro do tamanho original pela comunidade científica. Juntamente com a aplicação do Tensor de Leonard L_{ij} e a nova Hipótese do Primeiro Gradiente resultando em T_{ij} com a nova filtragem têm-se:

$$L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{ij} = -2c(\vec{x}, t) \left[(\widehat{\Delta})^2 \|\widehat{S}_{ij}\| \widehat{S}_{ij} - (\overline{\Delta})^2 \|\overline{S}_{ij}\| \overline{S}_{ij} \right]. \quad (3.10)$$

Lilly (1992) aborda a definição da função $2c(\vec{x}, t)$ através da utilização do método dos mínimos quadrados aplicado à Eq. (3.10), de forma a minimizar o erro advindo do ajuste, o que resulta no seguinte coeficiente dinâmico:

$$c(\vec{x}, t) = -\frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}. \quad (3.11)$$

3.1.4 Modelo para escoamentos bifásicos densos incompressíveis e turbulentos

Catta Preta (2023) propõe um avanço do modelo de fechamento LES dinâmico através de uma tripla decomposição do campo de velocidade euleriana, de forma a captar as flutuações causadas entre o movimento relativo de tanto a a fase contínua e dispersa, tanto quanto a mudança da viscosidade aparente do escoamento pela inserção de partículas. As equações de balanço de massa, de o balanço de quantidade de movimento linear, de transporte da interface, da força de tensão interfacial e o termo de arrasto generalizado e a fração de volume da partícula serão explícitos, respectivamente, mas não deduzidos, para isso refere-se à mesma tese.

$$\frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \bar{u}_i) = -\frac{\Gamma}{\tilde{\rho}^k}, \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) = & -\varepsilon^k \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2\varepsilon^k \mu_{ef} \bar{S}_{ij}^d \right) + M_i^d - u_{s,i} \Gamma + \\ & \varepsilon^k \rho g_i + \varepsilon^k f_{\sigma_i}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + u_i \frac{\partial \gamma}{\partial x_i} = 0, \quad (3.14)$$

$$f_{\sigma_i} = \sigma \kappa \frac{\partial \gamma}{\partial x_i}, \quad (3.15)$$

$$M_i^d = -\sum_d g(x_i - x_i^d) f_{di}, \quad (3.16)$$

$$\varepsilon^k = 1 - \sum_d g(x_i - x_i^d) V_d. \quad (3.17)$$

O superíndice k representa as variáveis da fase contínua, enquanto o superíndice d a fase discreta. A fração volumétrica da fase contínua é representado por ε^k que é descrito pela filtragem passa baixo da função coloração χ^k , a letra Γ é um termo de balanço, mais comumente conhecido como termo fonte, que relaciona as velocidades entre os termos de velocidade das duas fases de forma análoga à equação da continuidade de escoamentos monofásicos. O termo $\tilde{\rho}^k$ representa a massa específica da fase contínua filtrada usando o filtro de Favre, a p^* representa a pressão modificada, a qual engloba todas as parcelas representativas de pressão do escoamento. A viscosidade efetiva μ_{ef} engloba as viscosidades turbulenta, modificada pela presença de fase discreta e da fase

k , enquanto a $u_{s,i}$ é a junção dos componentes da média da velocidade interfacial da fase k . Os demais termos da equação do balanço de quantidade de movimento linear representam as forças advindas de campo ou externas. O termo M_i^d é o termo do arrasto generalizado da partícula.

Elenca-se que, apesar da utilização deste modelo de fechamento da turbulência no presente trabalho, a associação com os demais modelos e metodologias do código trazem mudanças em certos termos, para devidas aplicações, portanto só explicita-se o modelo base da turbulência e não suas interações com as demais parcelas do código.

3.1.5 Tratamento da fase Euleriana com presença de IB

Uhlmann (2005) propõe a criação da metodologia de DFS a partir da imposição de forças no domínio euleriano provenientes da velocidade da fronteira imersa. A partir da avaliação em pontos lagrangianos elenca-se as forças calculadas nestes pontos:

$$F_i = \frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + RHS_i, \quad (3.18)$$

$$RHS_i = \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial X_j} + \frac{\partial p}{\partial X_i} - \frac{\partial}{\partial X_j} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial X_j} + \frac{\partial U_j}{\partial X_i} \right) \right]. \quad (3.19)$$

As componentes da força, da velocidade do campo do escoamento e da posição avaliadas na malha lagrangiana são referenciadas pelas letras maiúsculas, respectivamente, F_i , U_i e X_i . As respectivas letras minúsculas representam as mesmas variáveis no referencial euleriano. A descrição da discretização das equações para o modelo de volumes finitos poderá ser consultada através de Vedovoto, Serfaty e Neto (2015).

A metodologia da multi-forçagem direta utiliza da discretização das equações da DFS em função de um critério de parada. No ambiente MFSim esse critério baseia-se na convergência da nova velocidade para um valor de erro baseado em resíduo mínimo pré definido, o qual deverá convergir para todo passo de tempo. A modelagem a partir da metodologia iterativa aumenta a precisão dos cálculos obtidos pelo modelo DFS padrão.

3.2 Modelagem matemática da fase dispersa

Dentro do ambiente MFSIM, e por consequente no presente trabalho, a fase dispersa é tratada no referencial lagrangiano. As partículas dispostas no escoamento gás-líquido tera seu movimento descrito pela segunda lei de Newton seguindo a metodologia ponto-partícula de DPM esféricas.

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\vec{u}_p}{dt} = & \vec{g} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right) + \frac{\pi\rho}{8m_p} D_p^2 C_d \|\vec{u} - \vec{u}_p\| (\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\pi\rho}{8m_p} D_p^3 C_{ls} [(\vec{u} - \vec{u}_p) \times \vec{\omega}] + \\
& \frac{\pi\rho}{8m_p} D_p^2 \|\vec{u} - \vec{u}_p\| \frac{\vec{\Omega} \times (\vec{u} - \vec{u}_p)}{\|\vec{\Omega}\|} + \frac{\pi\rho}{6} D_p^3 \left(\frac{D\vec{u}}{Dt} - \vec{g} \right) + \frac{\pi\rho}{12} D_p^3 C_a \left(\frac{D\vec{u}}{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt} \right) + \\
& \frac{3}{2} \sqrt{\pi\rho\mu} C_B \int_0^t \frac{\overline{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt}}{\sqrt{t-t'}} dt',
\end{aligned} \tag{3.21}$$

$$\frac{d\vec{\omega}_p}{dt} = \frac{\rho}{64} \frac{D_p^5}{I_p} C_r \|\vec{\Omega}\| \vec{\Omega}, \tag{3.22}$$

$$m_p = \frac{\pi}{6} \rho_p D_p^3, \tag{3.23}$$

$$I_p = 0,1 m_p D_p^2. \tag{3.24}$$

A Eq. (3.21) apresenta todas as forças aplicáveis à partícula discreta, nota-se também que, no ambiente MFSim, o usuário poderá escolher quais forças serão calculadas e quais poderão ser negligenciadas, em função da modelagem e suas simplificações. O resumo de todas as forças são descritas na Subseção 2.3.2. O presente texto utiliza todas as forças descritas por Santos (2019).

Santos (2019) também explicita que para o uso de um acoplamento através de 2 vias, utilizadas neste trabalho, necessitam do cálculo de um termo que avalie a influência do transporte das partículas no escoamento. O termo é adicionada como uma força nas equações de quantidade de movimento linear da fase contínua, a qual é calculada através de:

$$\vec{f}_{u,p} = \frac{1}{\mathbb{V}_{VC}} \sum_{n=1}^{N_p} m_{p_n} \left[\frac{d\vec{u}_{p_n}}{dt} - \vec{g} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_{p_n}} \right) \right], \tag{3.25}$$

de forma que o somatório engloba todas as partículas computacionais presentes dentro de um volume de controle especificado através de \mathbb{V}_{VC} .

Para melhor abrangência de fenômenos dos regimes de colisão, a modelagem matemática para coalescência de gotas e bolhas é feita através do modelo adaptado de (SOMMERFELD; BOURLOUTSKI; BRÖD, 2003).

3.3 Modelagem matemática da conversão Lagrange-Euler

O algoritmo implementado para conversão do referencial Lagrangiano para o Euleriano será descrito abaixo, juntamente com um fluxograma de decisões para a conversão ou não da partícula. Nota-se que, apesar do software MFSim apresentar a possibilidade de paralelização de cores, o algoritmo de conversão é disposto de forma serial, portanto, itera-se através de uma tabela *hash* todas as partículas uma a uma em todo o volume da simulação.

3.3.1 Algoritmo

Os passos do algoritmo serão disposto em uma lista, de forma que cada passo ocorre após o próximo menos quando especificado a presença de uma função iterativa:

1. Inicia-se o algoritmo a cada ct_{LE} iterações do passo de tempo da simulação, a qual é uma variável definida pelo usuário, dessa forma é possível reduzir o número de vezes que o código irá realizar a checagem dos gatilhos, reduzindo então a exigência computacional, mas podendo acarretar em conversões atrasadas e problemas procedurais pela imersão dessas partículas no escoamento contínuo.
2. Ao inicializar o algoritmo, é chamada um função iterativa linear com n_p passos, a qual, em cada passo, apontará a partícula com mesma identificação (ID), criando então um vetor com todas as variáveis de interesse: posição indicial tridimensional, diâmetro, velocidades nos eixos cartesianos.
3. Os gatilhos então serão checados, o primeiro sendo a distância entre a partícula e a VOF das malha adjacentes com valor de função coloração diferente de zero. Os índices do volume de malha contendo o ponto do centro de massa da partícula $x_{d,n}$ são salvos. Uma nova lista é feita e iterada através de uma busca indicial a fim de comparar todas as células do nível mais refinado da malha, em função da sua presença ou não de VOF, e a célula contendo $x_{d,n}$.

$$\|x_{d,n} - x_{\Gamma}\| > \delta r_{d,n} + c_{dist} \frac{\Delta x}{2}. \quad (3.26)$$

Caso a inequação modificada seja satisfeita, a qual utiliza o fator de proporção c_{dist} definida pelo usuário, a partícula adquire a *flag* para conversão e o código então conclui o laço de maneira preemptiva. Reitera-se o uso de δ numericamente igual a 1,5.

4. Caso nenhuma VOF esteja presente radialmente para satisfazer a Eq. (3.26), o mesmo procedimento é feito em relação a IB:

$$\|x_{d,n} - x_W\|_{\square} > \delta r_{d,n} + c_{dist} \frac{\Delta x}{2}, \quad (3.27)$$

o subíndice \square referencia que a busca é feita não de forma radial, mas sim através de uma *bounding box*, um volume de controle em formato de paralelepípedo é criado, com arestas proporcionais ao valor da parte direita da Eq. (3.27) à cada tamanho da menor célula da malha, em respeito aos 3 eixos cartesianos. Caso exista a presença de IB dentro da *bounding box*, a partícula adquire a *flag* para conversão e o código então conclui o laço de maneira preemptiva.

5. Caso a partícula satisfaça algum gatilho da conversão ela é pré-processada através dos filtros de conversão, a partícula é removida do referencial Lagrangiano, as parcelas Eulerianas em VOF são adicionadas em cada volume de malha que continha a partícula e as velocidades locais Eulerianas são atualizadas para conservação de movimento linear total.
6. Caso a partícula não tenha satisfeito nenhum critério para conversão, ou o item anterior tenha sido finalizado, o valor n é atualizado e a próxima partícula avaliada.
7. O algoritmo finaliza quando todas as partículas presentes no escoamento sejam iteradas.

O procedimento seguido pelo algoritmo é explicitado pela Fig. 3.1, um fluxograma representativo do algoritmo. A conversão Lagrange-Euler ocorre somente no nível mais fino da malha, pois é neste o qual reside a VOF, portanto, é de alta importância satisfazer um critério extra de refinamento adaptativo de malha.

O tamanho da malha mais refinada afeta diretamente a acurácia e resolução da VOF após a conversão, Evrard, Denner e van Wachem (2019) demonstra o impacto da utilização de malhas suficientemente pequenas para que a conversão não acarrete em perdas expressivas de informação. Este fato é demonstrado de forma ilustrativa pela Fig. 3.2.

3.4 Fechamento do Capítulo

O objetivo do presente capítulo é de exprimir todas as equações, formulações e algoritmos utilizados. A utilização do modelo de fechamento da turbulência segundo Catta Preta (2023), as formulações necessárias para descrever a utilização da DPM segundo Santos (2019) e, por fim, a metodologia de conversão proposta a ser aplicada, a junção de todos os pontos supracitados apresenta a base de todas as análises que serão feitas, suas divisões em problemas menores e a eventual análise final proposta do cotovelo da tubulação da refinaria.

Figura 3.1: Fluxograma do algoritmo de conversão Lagrange-Euler.

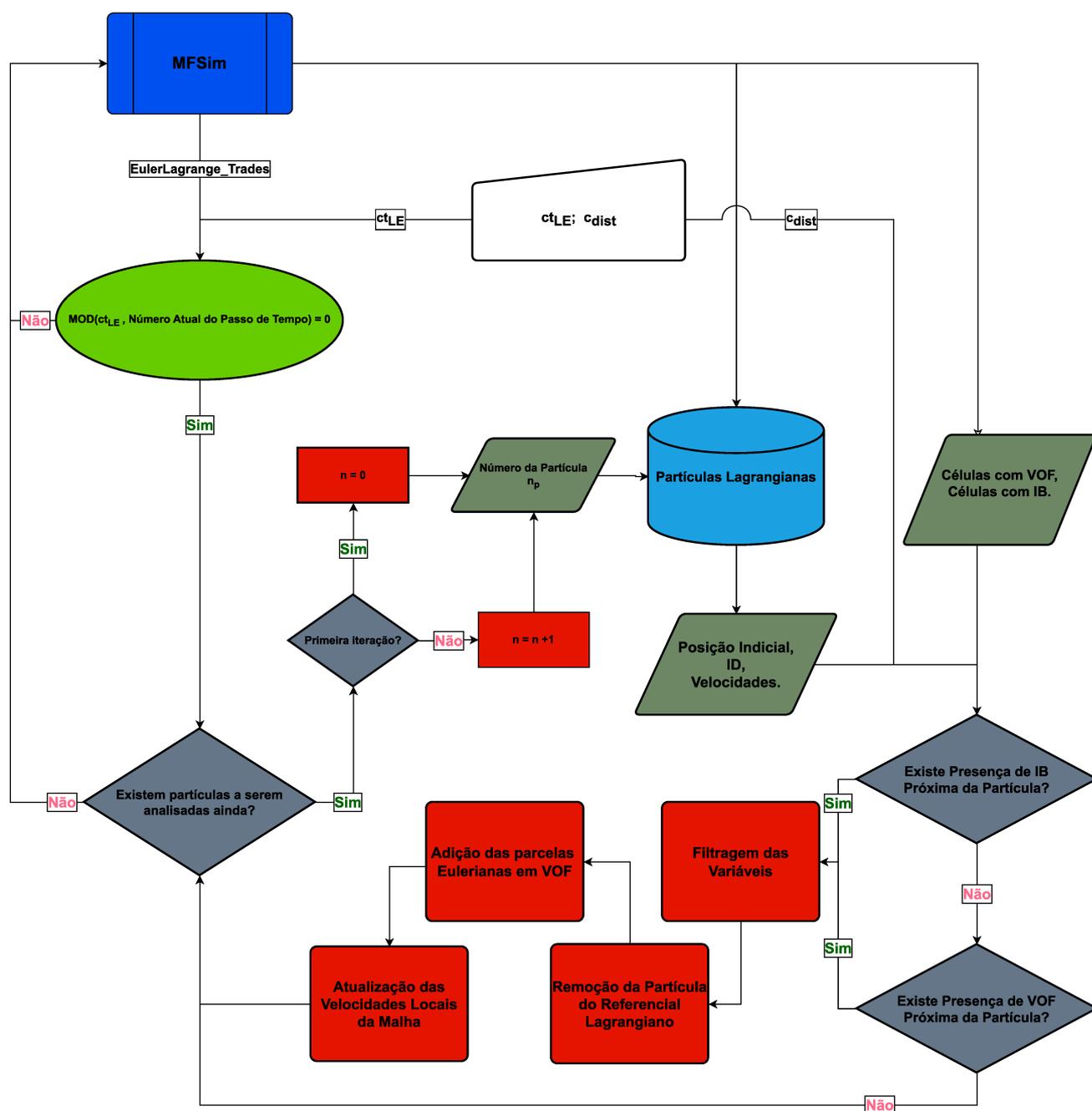
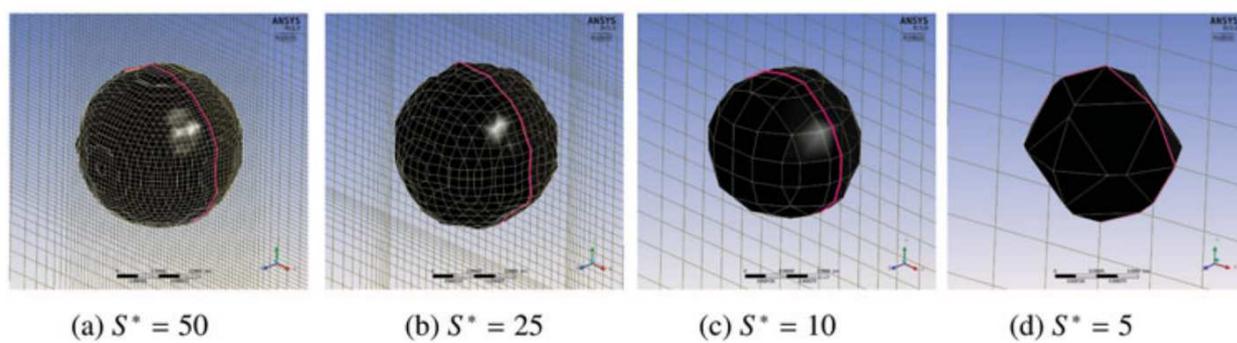


Figura 3.2: Imagens da sensibilidade da razão entre o diâmetro da partícula e o tamanho da malha computacional S^* .



Fonte: Evrard, Denner e van Wachem (2019).

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E DICUSSÕES

Em função da aplicação da metodologia em termos de códigos no MFSim, a etapa final da implementação é a própria simulação de interesse e análise dos resultados. A Subseção 3.3.1 detalha as necessidades e o procedimento para que haja a conversão Lagrange-Euler dentro de um ambiente CFD, mas ele não exprime a dificuldade de se utilizar ferramentas com uma gama de aplicações, em outras palavras, a dificuldade associada à utilização de uma ferramenta sensível aos *inputs* definidos pelo usuário. Utilizando a analogia de George Fuechsel, “*Garbage In, Garbage Out*”, retira-se que para uma simulação em CFD, os *inputs* deverão ser condizentes com a análise, portanto uma sequência de lógica de simulações é elencada, assim é adicionado incrementalmente novas análises e modelagens, objetivando a maior acurácia da simulação final. Essa divisão será explícita, os seus resultados demonstrados e discutidos, por fim a análise do cotovelo da tubulação será apresentada e discutida. Todas as análises serão feitas a partir de um escoamento gás-líquido de ar e água, com propriedades usuais para condições normais de temperatura e pressão (CNTP). O anexo A apresentará os vídeos criados, caso o arquivo PDF não tenha sido alterado¹.

4.1 Simulações corroborantes

Para melhor familiarização com o código MFSim, o aumento da acurácia das simulações e diminuição do tempo computacional, uma lista de simulações fora elaborada, com intuito qualitativo, de forma a obter respostas físicas consistentes de forma visual dentro de uma caixa fechada. Três categorias são elencadas, com nomes arbitrários, das quais: *What to do* (WTD), *What to Check* (WTC) e as simulações finais, as simulações WTD se referem ao uso do ambiente DPM, com 9 casos, enquanto o WTC compreende as análises utilizando VOF juntamente com DPM, com 5 casos, sendo as simulações finais o objetivo do texto. A separação de cada caso é dado pelas tabelas 4.1 e 4.2:

¹Link dos vídeos associados ao trabalho: *Hyperlink* <Acesso em: 30 dez. 2023>

Tabela 4.1: Descrições e objetivos das simulações WTD.

WTD	Simulação a ser feita	Objetivo
1	$n_p = 1$ em queda livre, malha com 1 nível, sem malha adaptativa	Compreensão do ambiente DPM e inicialização da mesma
2	$n_p = 10$ em queda livre, malha com 1 nível, sem malha adaptativa	Adição de várias DPM, compreensão das possíveis metodologias de inserção de partículas
3	$n_p = 10$ velocidades de queda com desvio padrão definida, malha com 1 nível, sem malha adaptativa	Compreensão da inicialização de DPM com velocidades diferentes através de metodologias estatísticas
4	$n_p = 1$ com velocidade definida, malha com 2 níveis, sem malha adaptativa	Adição de 2 níveis de malha à análise
5	$n_p = 1$ com velocidade definida, malha com 3 níveis, sem malha adaptativa	Adição de 3 níveis de malha à análise
6.5	$n_p = 1$ com velocidade definida, malha com 3 níveis, com malha adaptativa em função do gradiente de vorticidade (5)	Adição da malha adaptativa e investigação do melhor critério para refinamento
6.a	$n_p = 1$ com velocidade definida, malha com 3 níveis, com malha adaptativa em função do gradiente de presença de partículas (a)	Adição da malha adaptativa e investigação do melhor critério para refinamento
7	$n_p = 1$ com velocidade definida, malha com 3 níveis, com malha adaptativa 5a, paralelizado em 4 cores	Inicialização de simulação a partir de paralelização
8	$n_p = 10$ com velocidade definida, malha com 3 níveis, com malha adaptativa 5a, paralelizado em 4 cores	Definição das melhores opções a serem usadas para a simulação da fase discreta

O conjunto WTD de simulações tem como principal objetivo a compreensão das ferramentas associadas à DPM, tanto quanto, como adicionar a paralelização de cores para aumento de velocidade computacional, a utilização da malha adaptativa, a qual, a partir de gradientes de variáveis definidas pelo usuário, refina localmente a malha da simulação e aumenta então a eficiência da simulação pela redução do número de células da malha em relação a uma malha com todas as células refinadas. Apesar da simulação completa de um cotovelo de refinaria apresentar a criação de partículas Lagrangianas através da conversão Euler-Lagrange, a onerosidade de simular um escoamento que proporciona essa conversão apresenta um desafio, portanto optou-se pela inserção artificial de partículas, através de coordenada fixa, plano ou volume de inserção.

Tabela 4.2: Descrições e objetivos das simulações WTC.

WTC	Simulação a ser feita	Objetivo
1	Inicialização do caso de quebra de barragem, malha com 3 níveis, com malha adaptativa a partir do gradiente de massa específica (1), sem DPM, paralelizado em 4 cores	Compreensão do ambiente VOF e inicialização de um caso já simulado dentro do MFLab
2	Inicialização de uma piscina e $n_p = 1$ para conversão, malha com 3 níveis, com malha adaptativa 1a, paralelizado em 2 cores	Primeira verificação do algoritmo de conversão, inicialização do ambiente VOF e DPM concomitantemente
3	Inicialização de uma piscina e $n_p = 10$ com velocidade definida e conversão, malha com 3 níveis, com malha adaptativa 1a	Verificação do formato serial do código de forma a cada partícula apresentar conversão separadamente
4	Inicialização de uma piscina e $n_p = 40$ adicionada a cada 100 passos de tempo, com velocidade definida e conversão, malha com 3 níveis, com malha adaptativa 1a, paralelizado em 2 cores	Verificação da adição de partículas posteriormente à inicialização da simulação e sua conversão
5	Inicialização de uma piscina e $n_p = 1$ adicionada a cada 200 passos de tempo, com velocidade definida e conversão, malha com 3 níveis, com malha adaptativa 1a, paralelizado em 2 cores	Verificação da conservação de massa e o aumento do volume de VOF no domínio

A partir do proposto para as simulações WTD, adiciona-se as análises contendo a VOF pelas simulações WTC. Os objetivos primordiais dessas simulações englobam: a utilização do ambiente de VOF, a fim de obter conversões Lagrange-Euler sem presença de IB, verificar se todas as partículas, tanto inicializadas quanto adicionadas, serão convertidas uma a uma, verificar a conservação de massa e o aumento do volume da VOF em função da adição de massa no referencial Euleriano.

Por fim as últimas simulações referem a utilização de uma IB simplificada de um cotovelo

de topo simplificado, a fim de averiguar a sensibilidade dos fatores setados pelo usuário, particularmente c_{dist} .

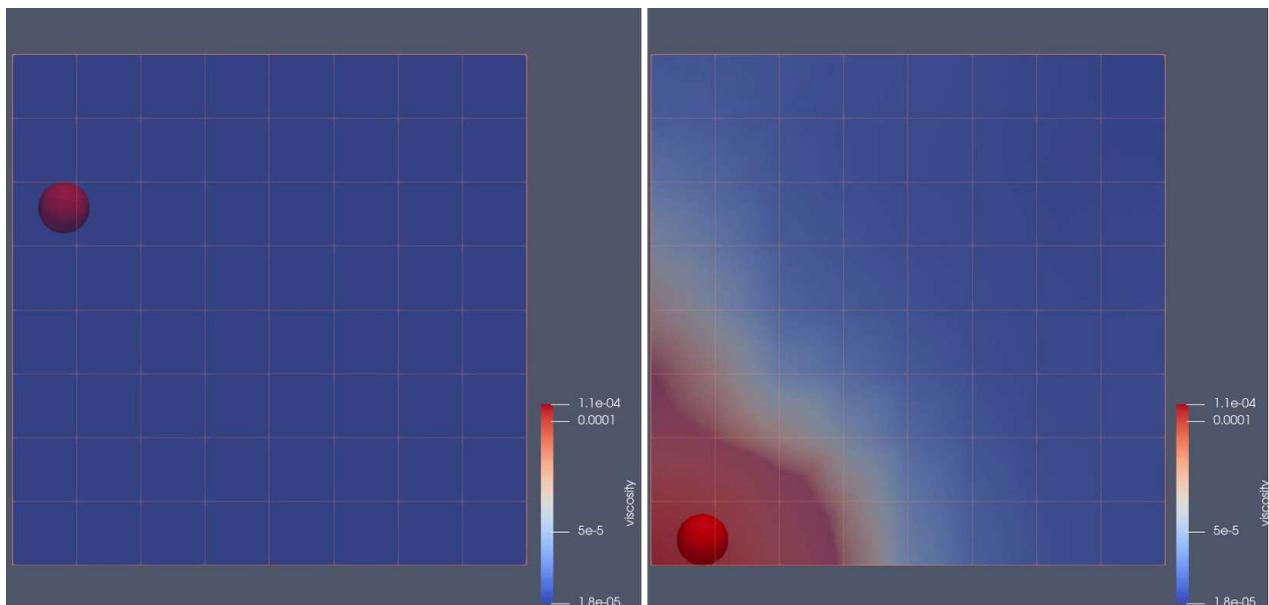
4.2 Resultados das simulações WTD

A atual seção abordará a exposição dos resultados das simulações WTD de maneira qualitativa a partir do software *open source* ParaView, com ênfase às dificuldades de implementação, a validação qualitativa do pós-processamento dos dados e lições gerais para a simulação final.

4.2.1 Simulação WTD1

Para melhor compreensão do ambiente DPM do código MFSim, inicializa uma singular partícula DPM de tamanho arbitrário em queda livre, com uma malha de 1 nível com divisões arbitrárias. Nota-se na Fig. 4.1 que a viscosidade do fluido contínuo é influenciado pelo movimento da partícula, como Catta Preta (2023) exprime no seu modelo de fechamento de turbulência, o movimento da partícula é governada pela presença de uma aceleração da gravidade adicionada.

Figura 4.1: Simulação WTD1: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)



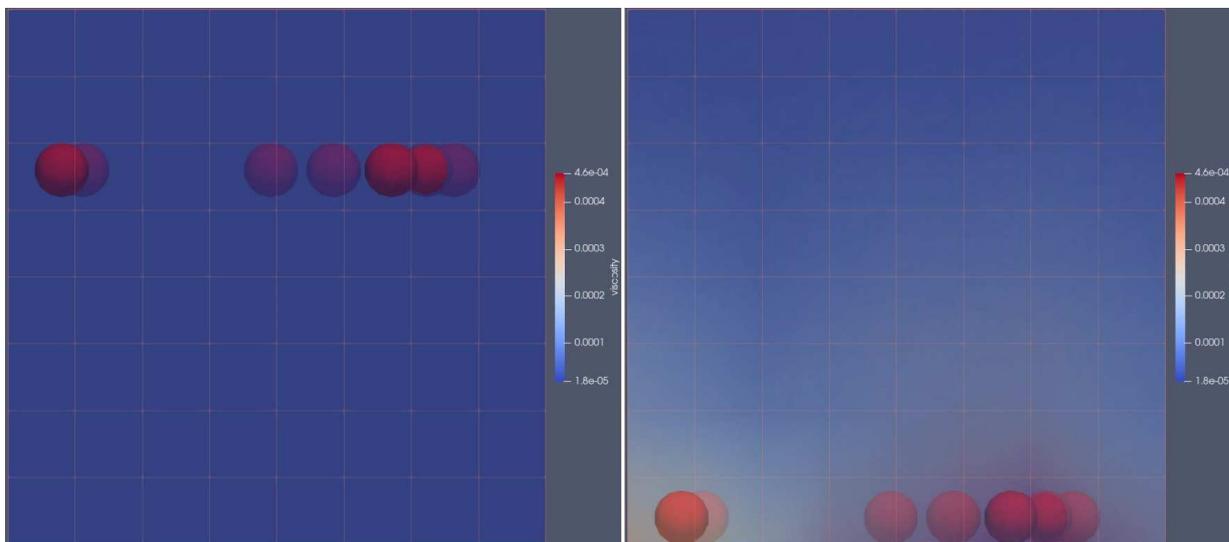
A partir da melhor compreensão da inserção de partículas no escoamento as ademais simulações são feitas.

4.2.2 Simulação WTD2

Utilizando um plano ortogonal à aceleração da gravidade 10 partículas são adicionas, seu contorno volumétrico de viscosidade através da Fig. 4.2, com isso a possibilidade de inserção de

várias partículas nas simulações é concretizada.

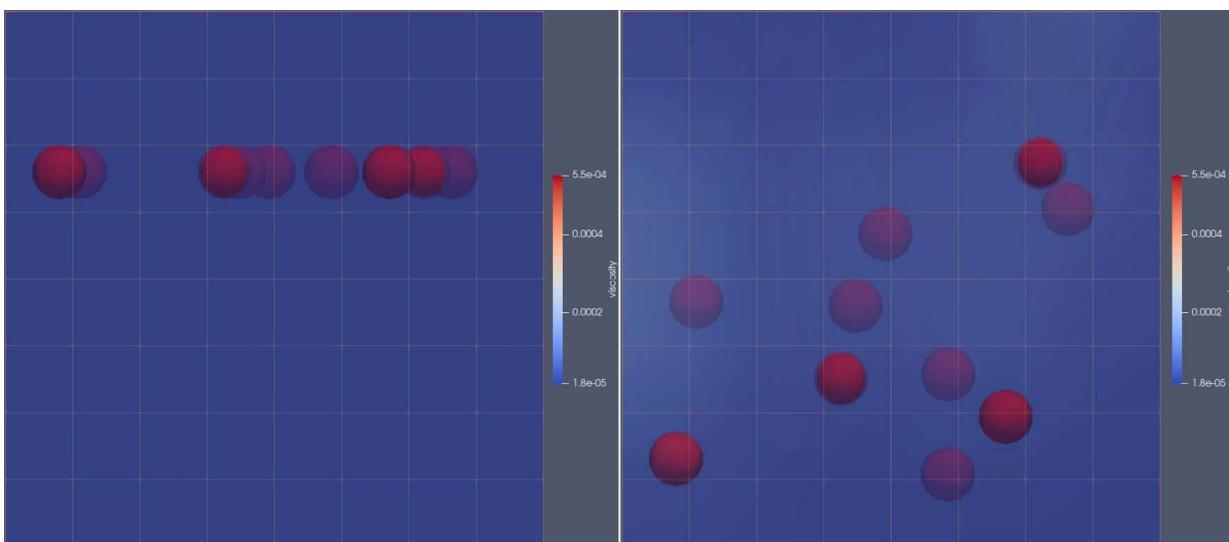
Figura 4.2: Simulação WTD2: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)



4.2.3 Simulação WTD3

Para uma melhor captura da física envolvida para escoamentos densos, as partículas devem ser adicionadas com velocidades diferentes, já que não necessariamente se tem um movimento análogo entre as partículas, os movimentos apresentam um teor caótico, portanto as velocidades das partículas serão tratadas a partir de uma modelagem estatística, a Fig. 4.3 demonstra que isso é possível através do MFSim.

Figura 4.3: Simulação WTD3: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 0,53$ s (direita)



4.2.4 Simulação WTD4 e WTD5

O refinamento de malha é um fator importante para qualquer simulação envolvendo volumes finitos, em especial para análises com modelagem LES, o maior refinamento das células dita uma maior banda de frequências da densidade espectral de energia sendo calculada ao invés de modelada, com este intuito o tratamento da malha é um ponto de alta importância. A Fig. 4.4 e Fig. 4.5 demonstram a importância deste fato, a primeira não captura a esteira turbulenta criada pela partícula da melhor forma e apresenta problemas da difusão de informação entre os níveis da malha onde existe um forte gradiente dessa informação, já no segundo, a esteira é capturada de uma melhor forma e os gradientes são mais suaves e bem difundidos nas interfaces entre malha.

Figura 4.4: Simulação WTD4: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)

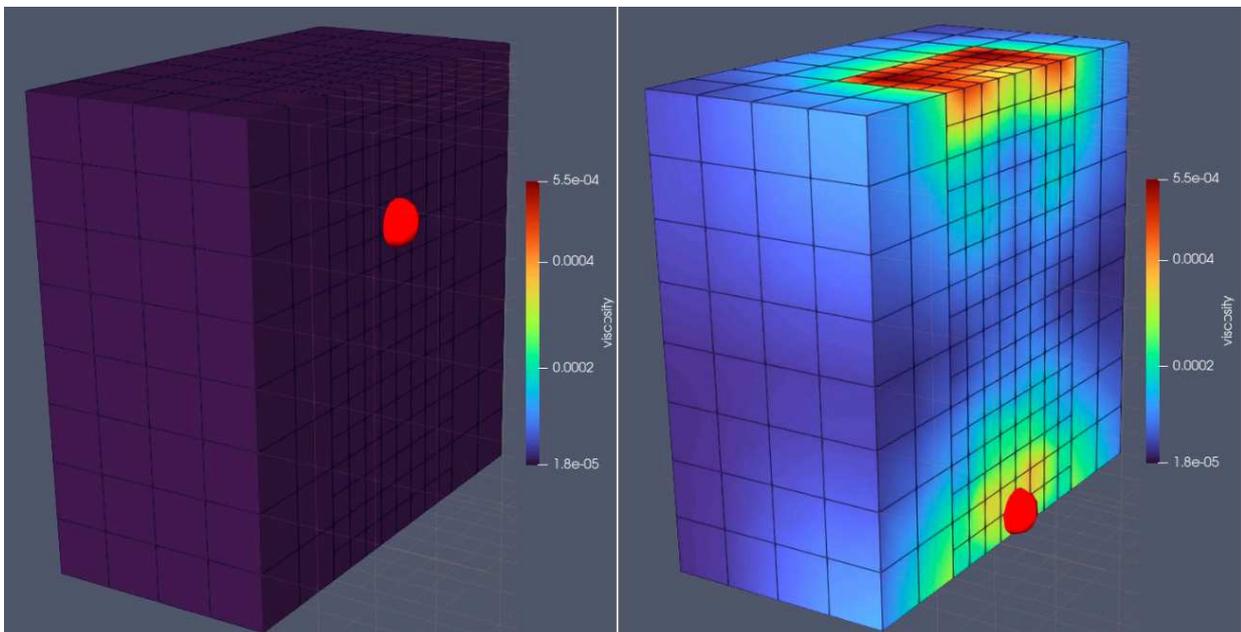
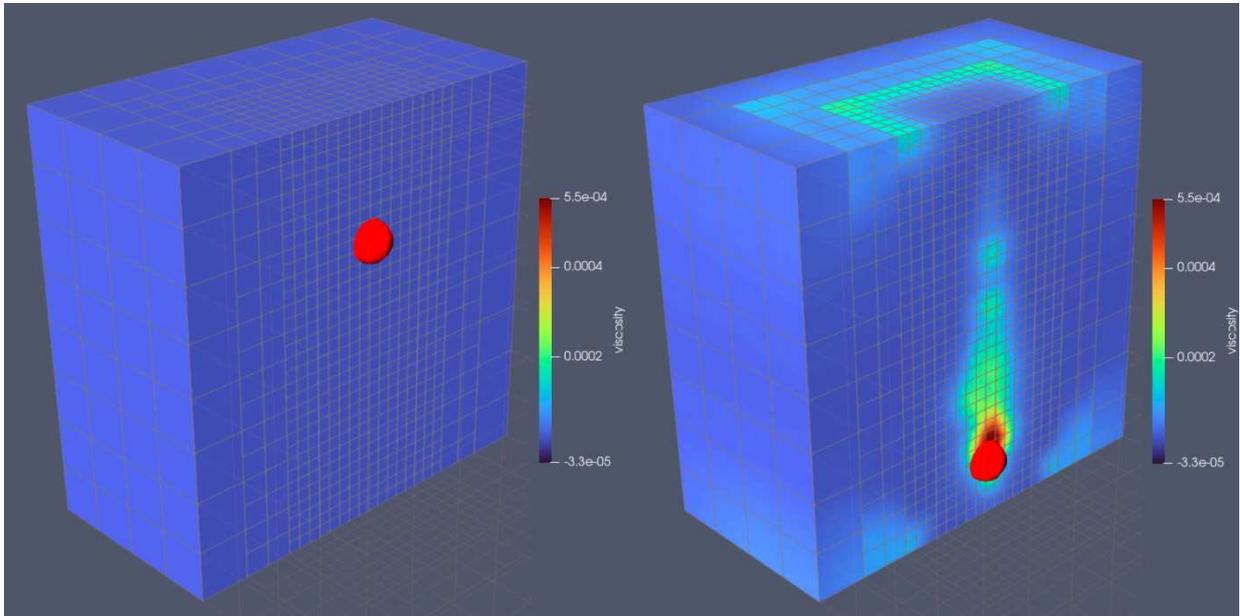


Figura 4.5: Simulação WTD5: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 0,65$ s (direita)



4.2.5 Simulação WTD6.5 e WTD6.a

Para que não haja um alto refinamento, associado à aumento da demanda computacional, e as informações sejam simuladas da melhor maneira possível, adota-se o refinamento adaptativo, o qual refina a malha em locais em que um alto gradiente de informação seja encontrado. Essa informação pode ser descrita como qualquer grandeza calculada no escoamento, a Fig. 4.6 apresenta refinamento de locais em que a vorticidade seja alta enquanto a Fig. 4.7 refina locais com alto gradiente entre as fases Eulerianas e Lagrangianas. A primeira apresenta melhoria na captura da esteira turbulenta da partícula, pela presença de vorticidade, já a segunda acompanha o movimento da partícula pelo escoamento.

Figura 4.6: Simulação WTD6.5: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)

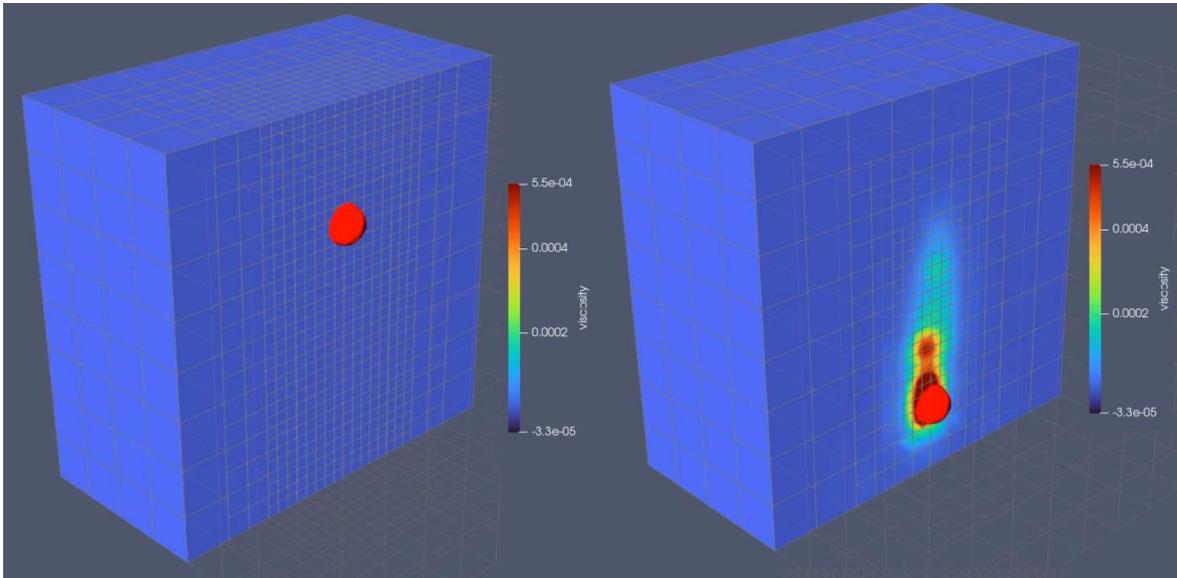
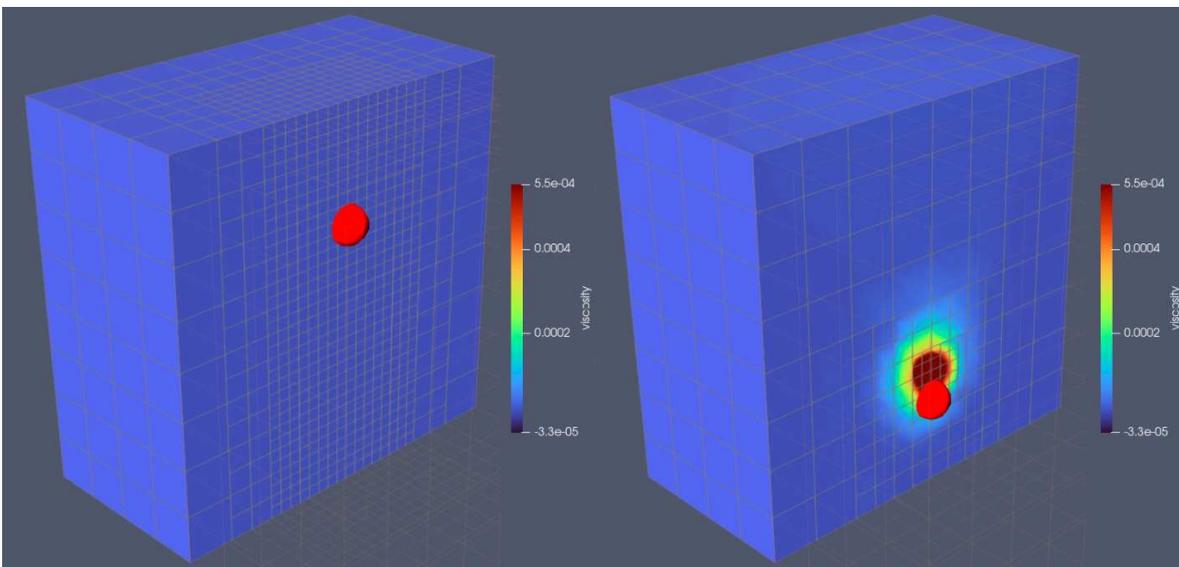


Figura 4.7: Simulação WTD6.a: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)



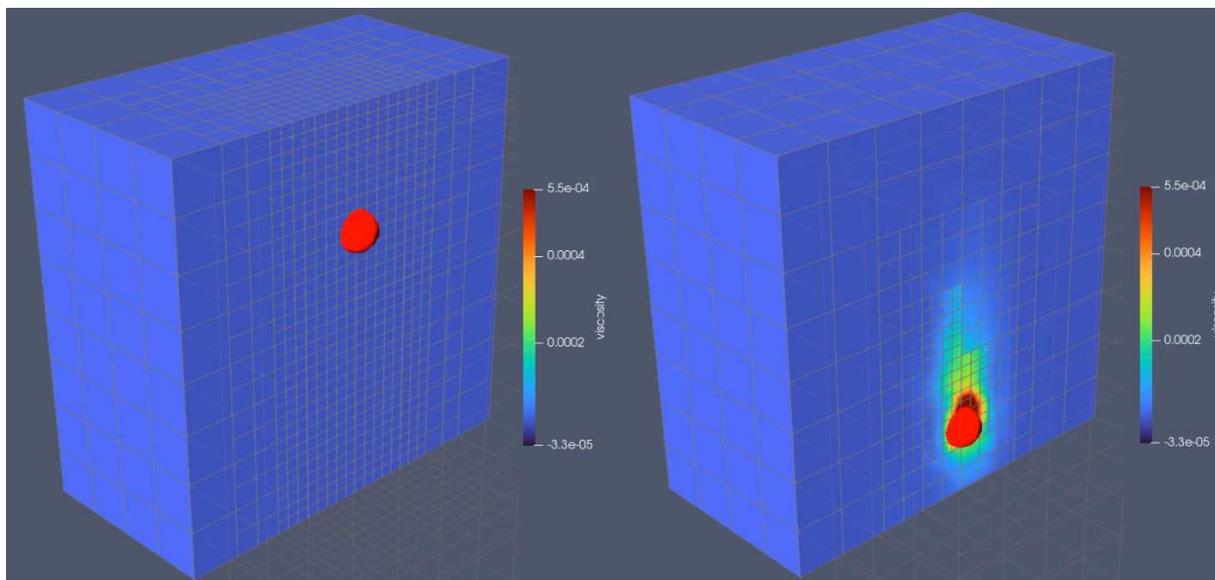
Adotando os pontos positivos de cada uma dos modelos de adaptação, elenca-se que a melhor metodologia é a utilização de ambos de forma concomitante.

4.2.6 Simulação WTD7

Simulações em CFD apresentam uma demanda computacional alta, portanto a utilização da paralelização do processamento com a criação de processadores com múltiplos *cores* é essencial para diminuição do tempo computacional, a Fig. 4.8 demonstra que é possível a implementação de

simulações com DPM e paralelização da computação.

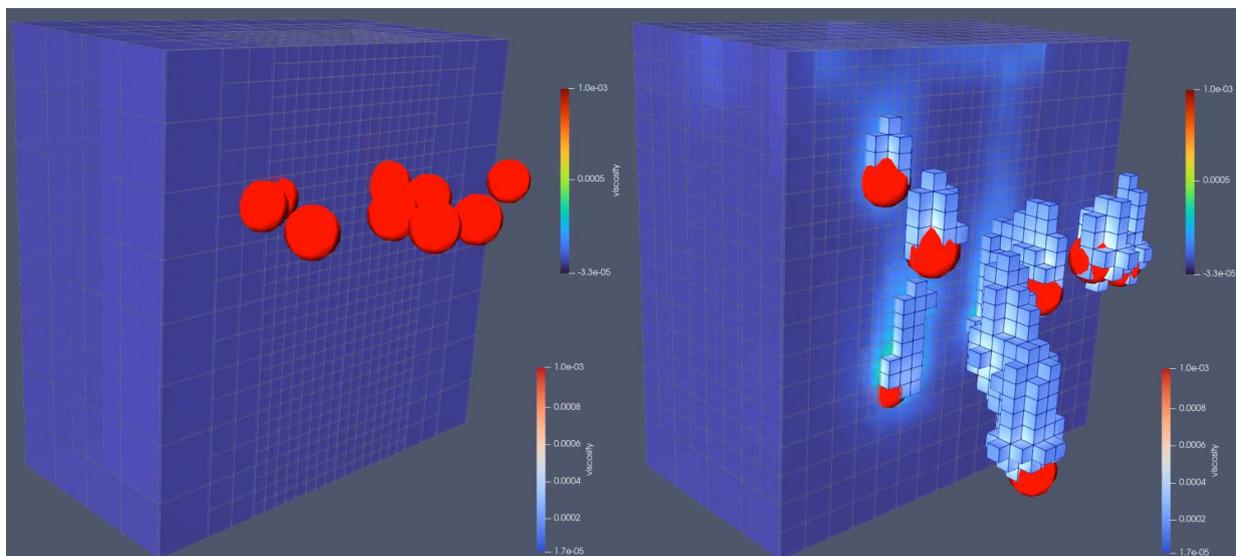
Figura 4.8: Simulação WTD7: Contorno volumétrico de viscosidade em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)



4.2.7 Simulação WTD8

Utilizando de todas os pontos elencados juntamente à inicialização volumétrica de partículas, a Fig. 4.9 demonstra que o MFSim é de fato robusto e permite simulações complexas das partículas Lagrangianas.

Figura 4.9: Simulação WTD8: Contorno volumétrico de viscosidade com blocos de viscosidade de acompanhamento da esteira turbulenta em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1$ s (direita)



4.2.8 Conclusão da análises WTD

A partir da checagem de cada ponto importante elencado associado a análise e acompanhamento de partículas Lagrangeanas, nota-se que um aumento do *buffer layer* para a malha adaptativa foi o único ponto não abordado, mas sim adicionado às análises futuras. As abordagens específicas necessárias para a fase discreta são definidas a partir dessas análises e então certificadas para implementação nas simulações WTC e finais da conversão Lagrange-Euler proposta.

4.3 Resultados das simulações WTC

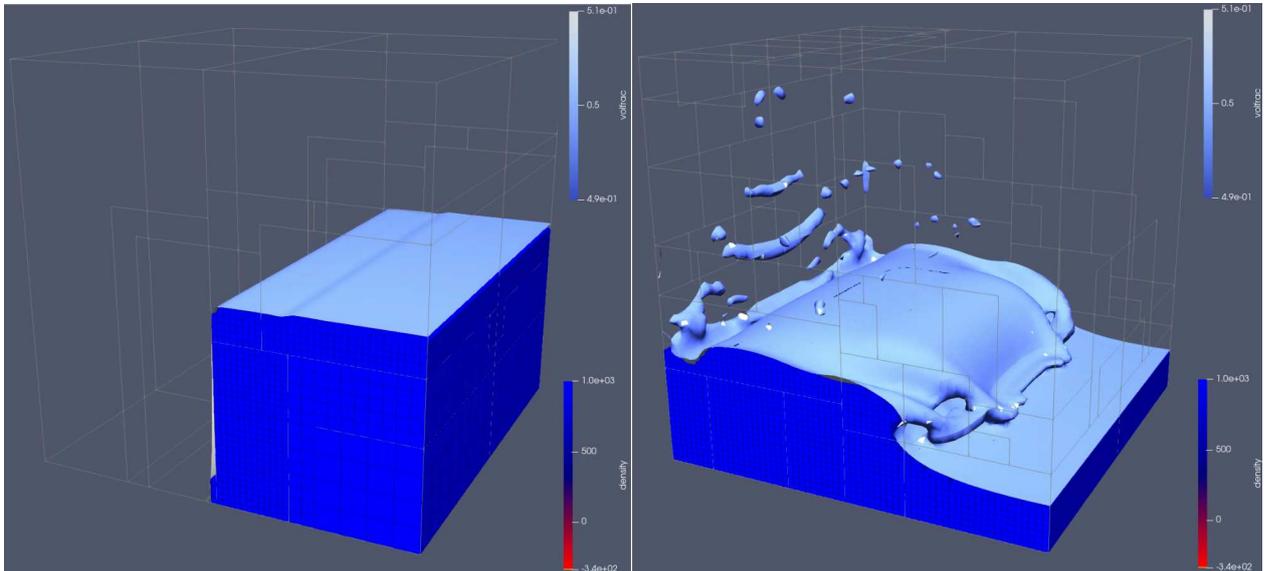
A presente seção abordará os resultados obtidos das simulações WTC de maneira qualitativa, apresentando ênfase para o pós-processamento dos dados, lições gerais para utilização da metodologia VOF e para a simulação final. Todas as análises WTC tiveram como entrada o valor $c_{dist} = 4$.

4.3.1 Simulação WTC1

Analogamente às simulações WTD, a utilização da metodologia VOF requer certas nuances, portanto, de forma a simular de forma condizente, um código pré-pronto interior ao MFLab fora baseado para a WTC1.

A análise demonstrada na Fig. 4.10 apresenta uma quebra de barragem adaptada para uma caixa fechada de 1 metro cúbico, de forma que 1 quarto do volume total é disposta de água, a primeira iteração representa o momento o qual a barragem desaparece. A malha adaptativa apresenta um refinamento para locais com alto gradiente de densidade, dessa maneira a fronteira entre a fase gás-líquido sempre estará disposta da malha mais refinada para capturar da melhor forma o escoamento. Como a interface da VOF está presente sempre no nível mais refinado, a conversão Lagrange-Euler não encontrará volumes nos quais a partícula de interesse para conversão estará fora do nível mais refinado, caso o número de *buffer layers* seja suficientemente alto.

Figura 4.10: Simulação WTC1: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 2,54$ s (direita)



4.3.2 Simulação WTC2

A primeira simulação apresentando a conversão Lagrange-Euler com sucesso é a WTC2, a Fig. 4.11 demonstra o sucesso parcial da conversão. A falta de *buffer layers* fez com que a conversão não fosse feita na totalidade do volume descrito pela partícula, portanto o volume de VOF criado feriu a conservação de massa, esse fato é demonstrado através da Fig. 4.12. Fora isso, a implementação da conversão apresentou um sucesso qualitativo.

Figura 4.11: Simulação WTC2: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda), $t = 0,59$ s (direita) e partícula adicionada de cor branca.

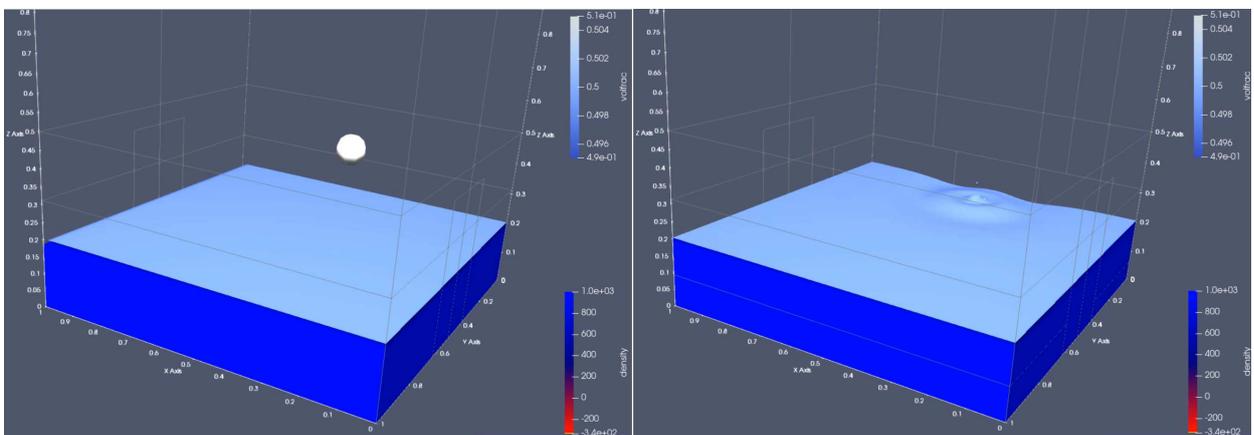
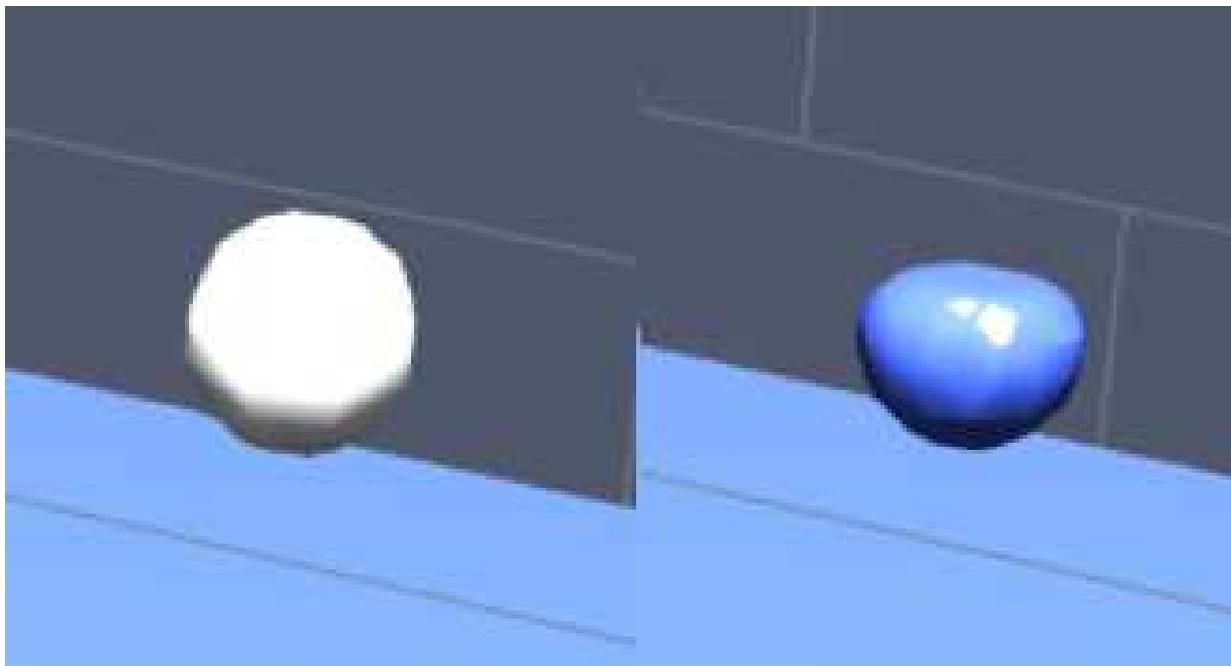


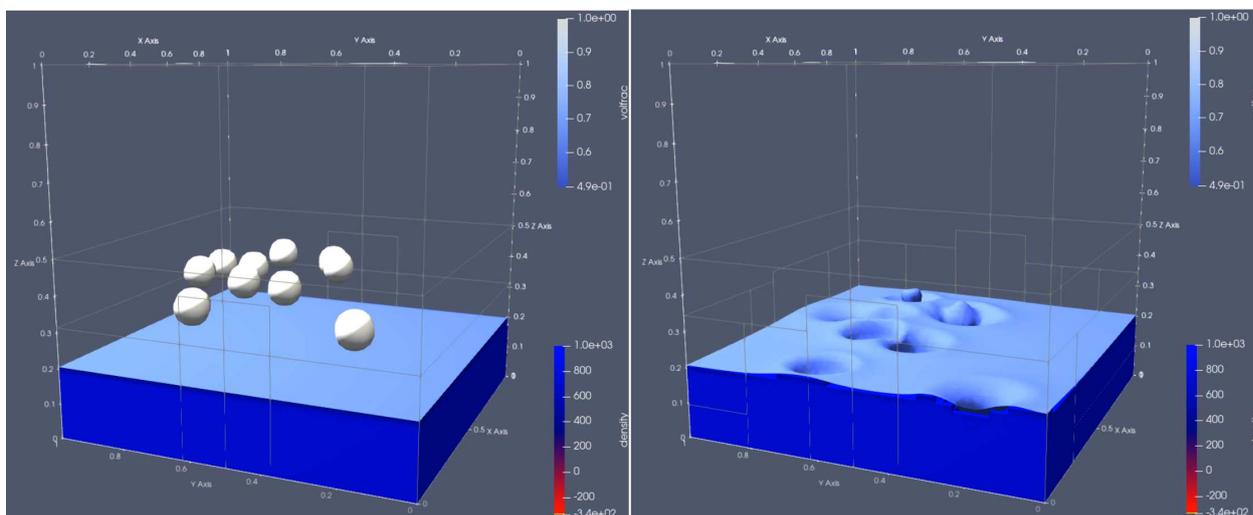
Figura 4.12: Simulação WTC2: Zoom da partícula na iteração da conversão (esquerda) e logo após a conversão (direita).



4.3.3 Simulação WTC3

Para a simulação WTC3 a única mudança foi a adição de mais partículas, no total 10, para confirmar que o algoritmo de conversão abrange todas as partículas do escoamento nos laços definidos. Pela Fig. 4.13 fica evidente que houve a conversão de todas as partículas, portanto os laços internos do algoritmo foram inseridos de forma condizente.

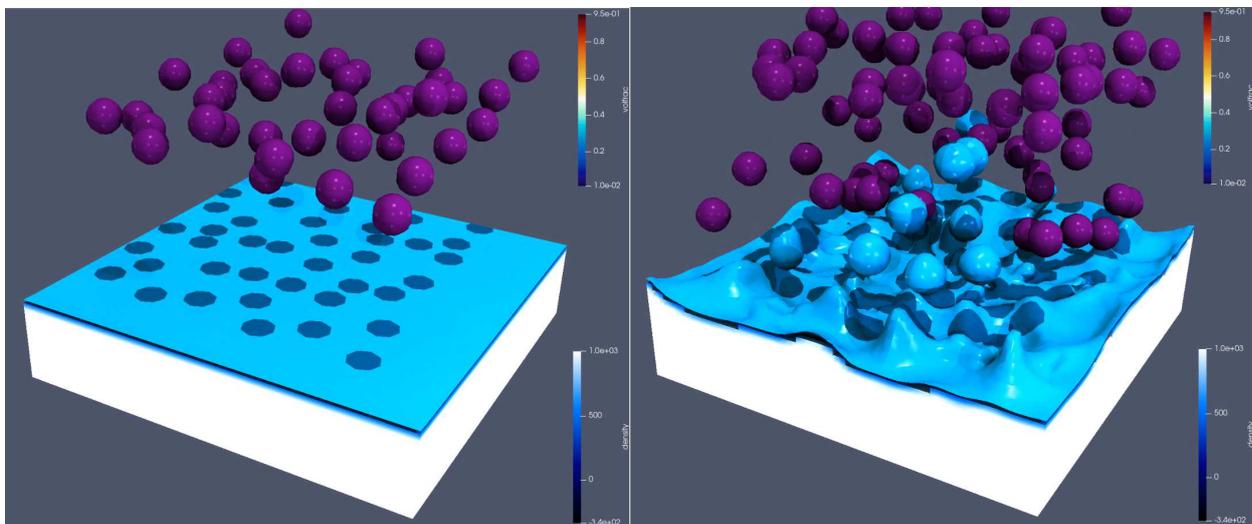
Figura 4.13: Simulação WTC3: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 0,19$ s (direita) e partículas adicionadas de cor branca.



4.3.4 Simulação WTC4

A simulação WTC4 apresenta a inserção de partículas também após a inicialização, em especial um valor de 100 iterações é definido. A presença de várias partículas, definindo então um escoamento denso, é averiguada também, somente as partículas com função coloração presente no seu arredor foram convertidas, mesmo que houve partículas, que logo após a conversão, contribuíram para conversão de partículas bem acima da interface inicialmente definida na inicialização.

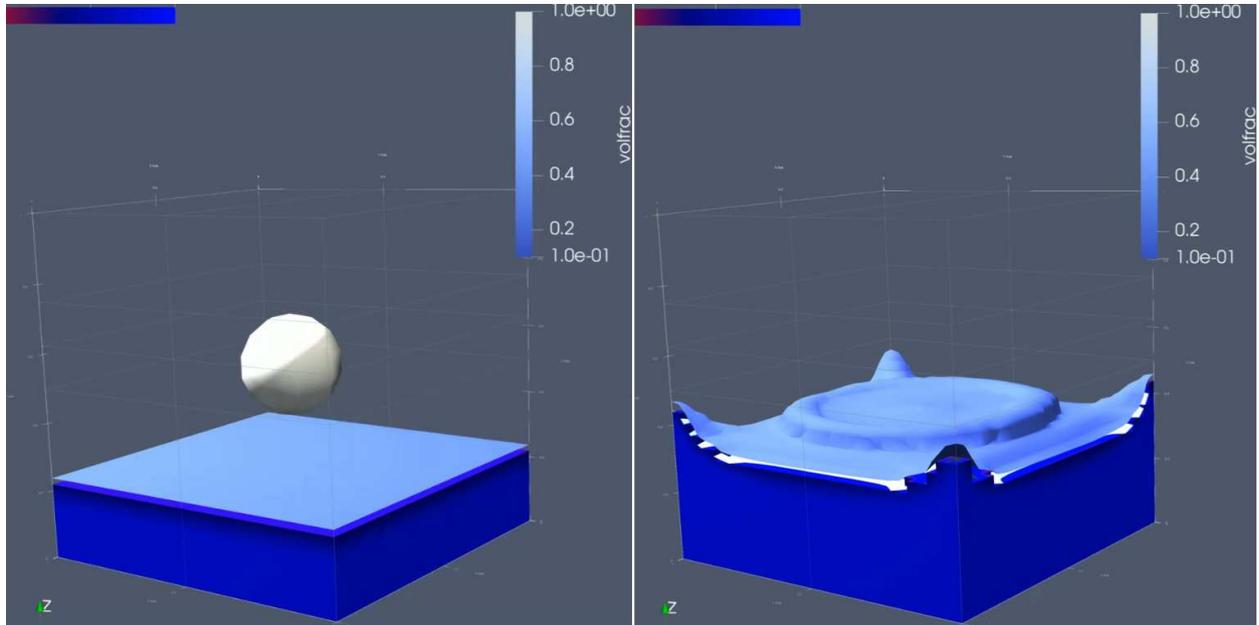
Figura 4.14: Simulação WTC4: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0$ s (esquerda), $t = 1$ s (direita) e partículas adicionadas de cor roxa.



4.3.5 Simulação WTC5

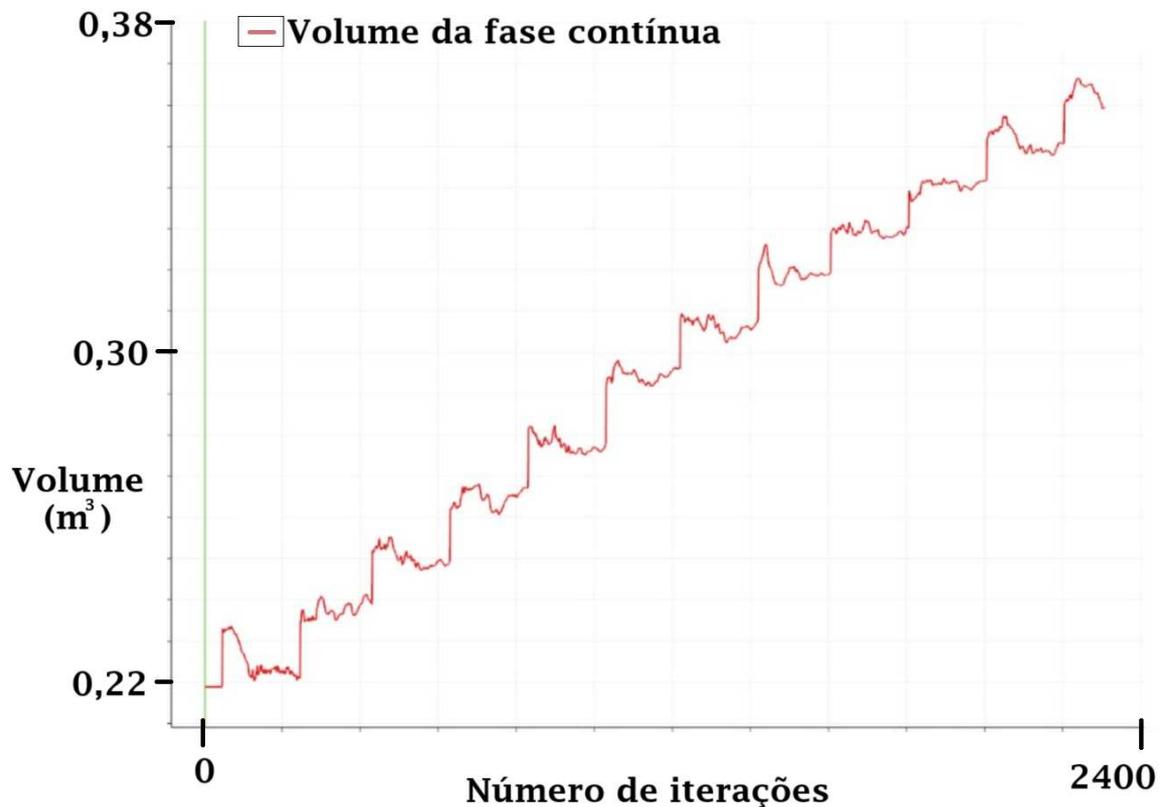
Para a primeira simulação quantitativa, WTC5 foi elencada para demonstrar a conservação de massa na conversão Lagrange-Euler. Esferas de diâmetro $d_p = 0.3$ m são adicionadas para que ocorra uma rápida mudança no volume. Nota-se a diferença do nível da água entre as imagens da Fig. 4.15.

Figura 4.15: Simulação WTC5: Contorno de superfície da função coloração e visualização por blocos da massa específica da água em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 5 s$ (direita) e partículas adicionadas de cor branca.



A integral no volume dos volumes de densidade representativas da fase contínua apresentou um aumento gradual coerente com o esperado, para a inserção de 12 partículas pelo tempo. O valor não pode ser totalmente quantificado e comparado com a inserção dos volumes das partículas pois a resolução da malha afeta o cálculo diretamente. O valor esperado para o aumento total do volume da fase contínua é de $V = 0,169 m^3$ de água, mas através da integral definida, o valor encontrado de adição foi em torno de $V = 0,136 m^3$. Outra maneira de calcular o volume presente é a integral volumétrica de uma faixa da função coloração, demonstrada pela Fig. 4.16, a qual, para uma faixa entre 0,1 e 1,0 apresenta um resultado de adição total de aproximadamente $V = 0,15$, nota-se que em função da área superficial da interface gás-líquido a integral apresentará resultados diferentes, já que a função coloração apresenta uma faixa de valores ao invés de valores fixos contáveis. A sensibilidade do volume total adicionado em função do refinamento da malha adiciona erros ao cálculo da integral, a Fig. 3.2 apresenta de forma visual o impacto do baixo refinamento para adição de VOF em uma simulação.

Figura 4.16: Simulação WTC5: Integral da função coloração entre valores 0,1 e 1,0 em função da iteração da simulação.



4.3.6 Conclusão das análises WTC

O proposto pelas análises WTC fora atingido, a inserção da VOF em simulações de CFD e da conversão Lagrange-Euler apresentaram sucessos procedimentais e do elencado pela 4.2. A partir da confirmação da conversão em função da presença de VOF a IB deverá ser adicionada à simulações e apresentar comportamento análogo. Portanto, as últimas simulações terão ênfase na adição de IB e correção de fenômenos não condizentes, as quais serão demonstradas.

4.4 Resultados das simulações finais

A utilização de todos os pontos é feita para análise final, o último passo é a inserção da fronteira imersa representativa do cotovelo de topo de refinaria e averiguar se a conversão ocorre, os pontos positivos e negativos associados à sensibilidade das variáveis definidas pelo usuário dentre outros pontos que serão elencados.

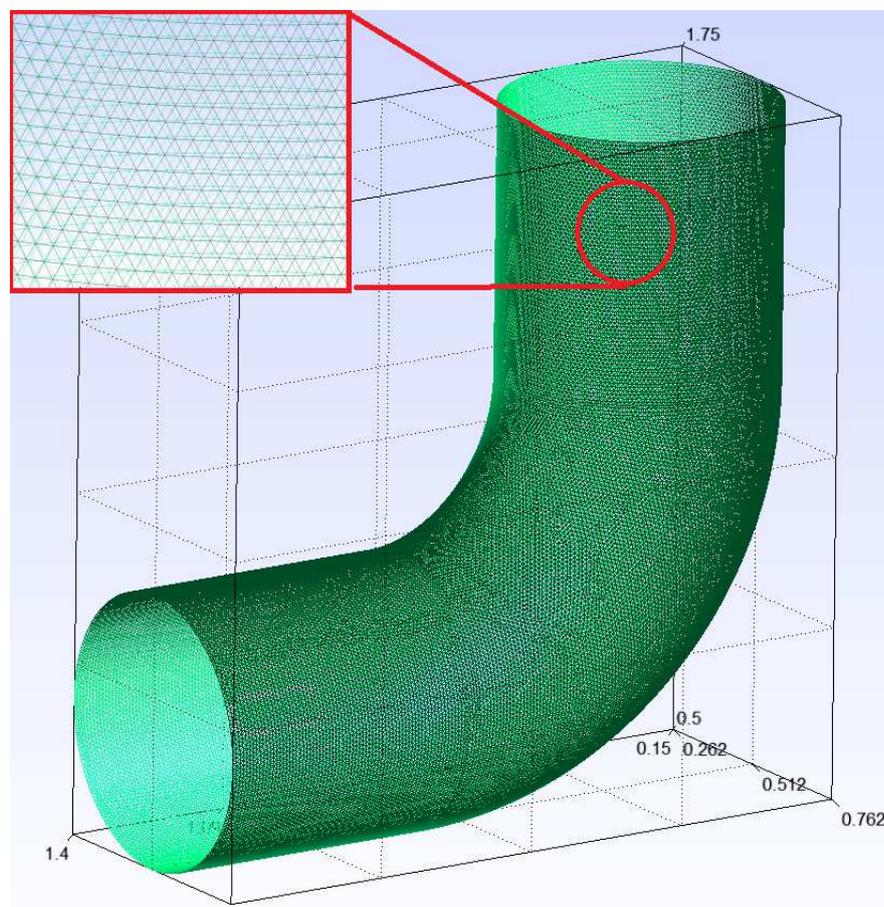
4.4.1 Adição de IB

Utilizando o modelo adaptado de DFS presente no MFSim, uma tubulação em cotovelo é criada e malhada utilizando o software grátis Gmsh, o tamanho dos elementos triangulares é

calculado para que tenham o tamanho característico igual ao nível mais refinado da malha computacional euleriana.

O paralelepípedo que contém a geometria apresenta dimensões de $1,25\text{ m}$, $1,25\text{ m}$ e $0,5\text{ m}$. O tamanho característico dos triângulos é de $0,008\text{ m}$. A malha computacional apresenta dimensões de $2,048\text{ m}$, $2,048\text{ m}$ e $1,024\text{ m}$ descritas por 32, 32 e 16 divisões no nível mais grosso e com malha adaptativa disposta até 4 níveis de refinamento. A malha mais refinada apresenta tamanho característico de aresta igual a $0,008\text{ m}$, o que corrobora com a dimensão da malha Lagrangiana, exposta pela Fig. 4.17.

Figura 4.17: Malha bidimensional criada utilizando Gmsh e *zoom* de uma seção retangular plana.



O MFSim disponibiliza a utilização o ponteiro normal dos elementos de malha da IB para restringir o escoamento, uma análise com esta restrição foi feita para evitar o vazamento da fase contínua pela fronteira imersa.

4.4.2 Resultados

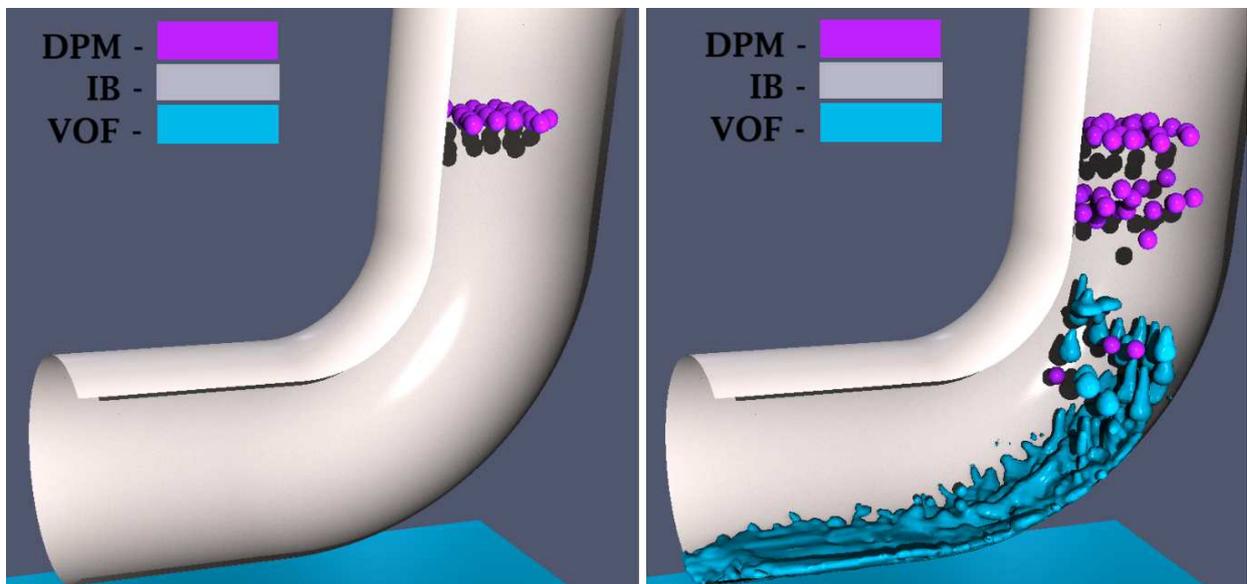
Os resultados são descritos através de duas principais simulações qualitativas, a primeira com o escoamento restrito internamente à IB e a segunda através do escoamento livre com uma piscina de água inicializada no fundo do volume computacional.

A inserção das $n_p = 20$ partículas é feita através de um plano, com inserção espacial aleatória

em um quadrado com concêntrico com o tubo superior a cada 1000 passos de tempo, as partículas apresentam variação aleatória na velocidade e apresentam diâmetro de $d_p = 0,045 m$. A variável da distância para conversão foi definida como $c_{dist} = 4$ para ambos os casos.

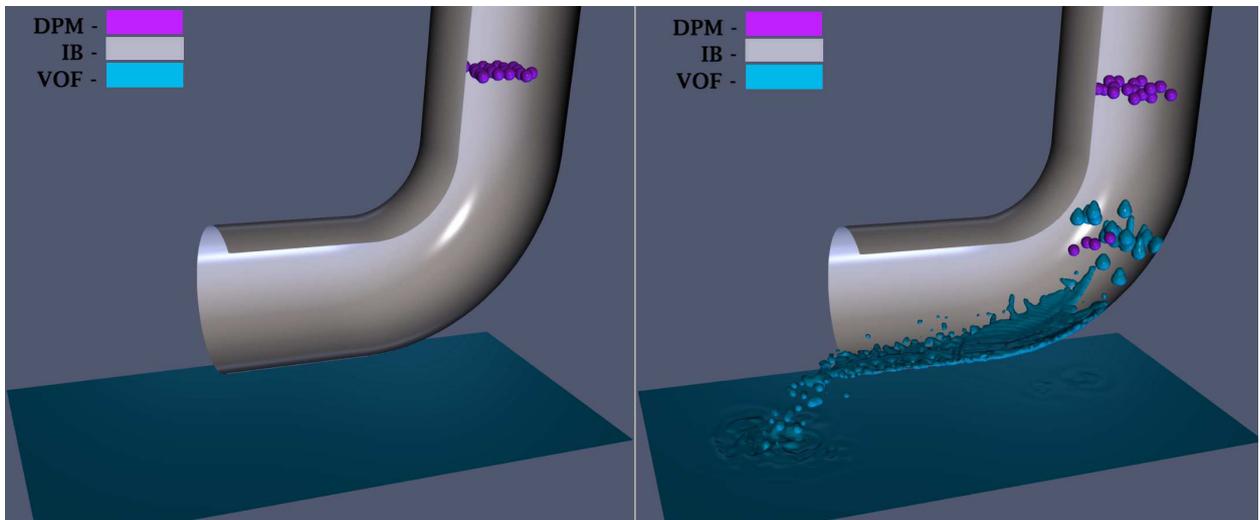
A Fig. 4.18 apresenta o primeiro caso, o qual obteve sucesso no algoritmo da conversão, apesar do escoamento restrito somente ao interior IB, as partículas apresentaram conversão tanto pela presença de VOF quanto da IB em sua proximidade. A função coloração escolhida para o pós-processamento da simulação apresenta uma esfera maior que a partícula, isso se dá ao fato do valor escolhido para a criação do vídeo, não influenciando a simulação em si.

Figura 4.18: Simulação da tubulação simplificada com conversão para função coloração igual a 0,2 em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 2,9 s$ (direita).



A Fig. 4.19 apresenta o segundo caso, apesar da presença de vazamento da IB, as partículas apresentaram conversão tanto pela presença de VOF quanto da IB em sua proximidade, da mesma forma que o primeiro, a fase contínua do escoamento após a conversão apresentou resultado satisfatório, com o despejo na piscina definida também sendo satisfatório visualmente.

Figura 4.19: Simulação da tubulação simplificada com conversão para função coloração igual a 0,2 em $t = 0$ s (esquerda) e $t = 1,3$ s (direita).



Os passos de tempo da simulação são automaticamente calculados através das condições de estabilidade de Damasceno, Santos e Vedovoto (2018b), Sommerfeld (2017) e o fator definido pelo usuário C_{CFL} (COURANT; FRIEDRICHS; LEWY, 1967). As simulações obtiveram um comportamento parecido para os passos de tempo, antes das conversões Lagrange-Euler os passos de tempo são altos, avançando rapidamente a simulação, após a conversão de qualquer partícula notou-se uma tendência da diminuição do passo de tempo, o que implica na necessidade de mais iterações para que uma mesma quantidade de tempo seja simulada, apesar disto uma maior acurácia das informações é captada nas interfaces da IB e na presença de VOF.

4.4.3 Sensibilidade das variáveis definidas pelo usuário

A utilização de um valor de c_{dist} condizente deverá ser definido pelo usuário, a importância desta variável é explícita pelas Fig. 4.21 e Fig. 4.20, dependendo do nível de refinamento da malha e seu tamanho característico, a conversão pode ocorrer bem próximo à IB ou VOF.

A conversão na extrema proximidade da IB não ocorre devido ao valor de δ definido, mas, pela possibilidade da escolha do valor ct_{LE} do usuário, o algoritmo pode não ser chamado antes da colisão da partícula Lagrangiana com a IB ou VOF. Caso o escoamento seja muito denso, o grande número de partículas pode gerar onerosidade no tempo computacional associado ao algoritmo da conversão, portanto um aumento no valor ct_{LE} poderá reduzir este custo, em detrimento da possibilidade da conversão ser feita muito próxima às interfaces de interesse.

Figura 4.20: Simulação da tubulação simplificada com conversão em $2\Delta x$ para função coloração igual a 0,2 em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 1,3 s$ (direita).

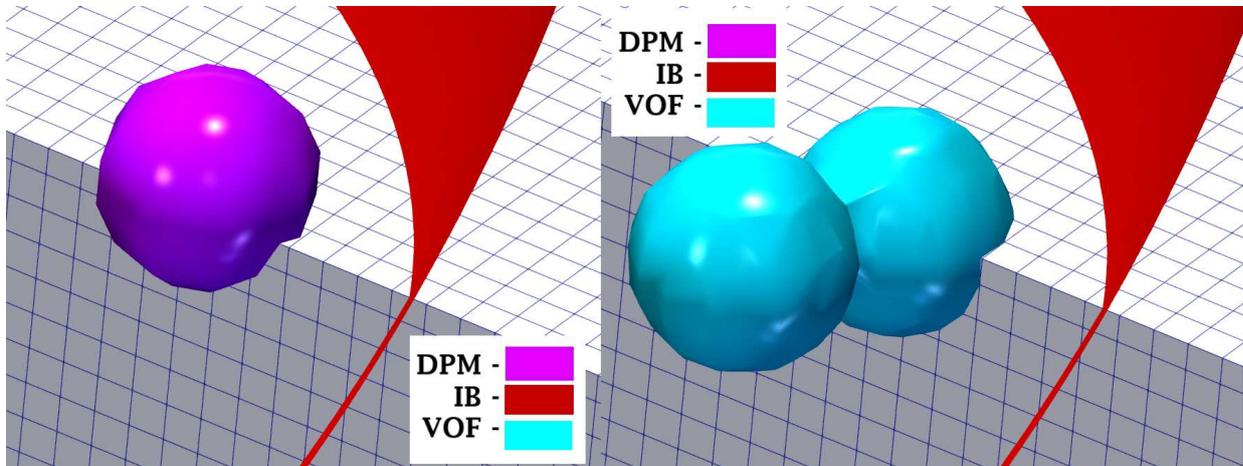
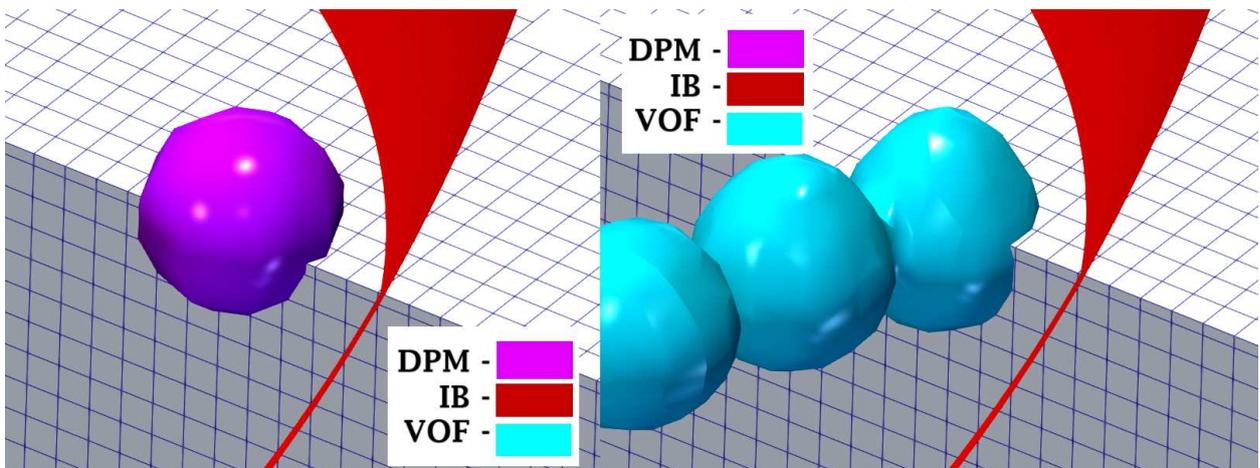


Figura 4.21: Simulação da tubulação simplificada com conversão em $1\Delta x$ para função coloração igual a 0,2 em $t = 0 s$ (esquerda) e $t = 1,3 s$ (direita).



Duas simulações com mesma *seed* do contador aleatório são comparadas, a primeira para $c_{dist} = 2$ e a segunda com $c_{dist} = 1$, ambas com $\delta = 1,0$ de forma a analisar somente a influência de c_{dist} . Apesar da dificuldade de capturar efeitos tridimensionais em imagens, as figuras apresentam distâncias visuais coerentes com o esperado, convertendo em aproximadamente 1 célula de distância na Fig. 4.21 e aproximadamente 2 células de distância na Fig. 4.20. Um outro efeito dessa escolha é a distância para a conversão em função da presença de VOF, na Fig. 4.20 uma outra partícula foi convertida além das duas capturadas na Fig. 4.21.

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

A metodologia do presente trabalho, da conversão Lagrange-Euler proposta por van Wachem et al. (2019) para escoamentos bifásicos em um código CFD com presença de fronteira imersa, teve implementação no ambiente MFSim. O algoritmo representativo da conversão e os resultados foram explícitos, tanto quanto as sensibilidades das variáveis que um futuro usuário deverá se atentar. O modelo pretende ser implementado em pesquisas futuras da taxa de corrosão em tubulações de topo de refinaria petrolífera, tanto quanto eventuais análises de teor análogo, com presença de escoamentos bifásicos e IB.

Apesar do teor qualitativo do trabalho, as análises feitas apresentaram todos os fenômenos esperados de um escoamento bifásico turbulento, tanto quanto uma metodologia de implementação, exprimindo os passos feitos entre sua concepção e adição ao código. Através da revisão bibliográfica das ferramentas presentes no código MFSim, as implementações da conversão Lagrange-Euler em outros códigos e a influência de fatores dentro de escoamentos bifásicos com IB são contextualizados, o equacionamento e algoritmo teve seu passo de implementação concluído e os resultados qualitativo das análises apresentados.

Analogamente aos resultados de van Wachem et al. (2019) os resultados são representativos dos fenômenos físicos intrínsecos de um escoamento turbulento, a redução do tempo computacional associado a utilização das partículas no referencial Lagrangiano até seu local de interesse apresenta uma melhoria do tempo de simulações expressiva, para simulações que demandam de semanas a meses, o fato de haver essa redução é atrativo.

Contudo, o trabalho apresenta lacunas ainda a serem desenvolvidas e analisadas, como mais análises quantitativas das variáveis de interesse, como um estudo para confirmação da conservação do momento angular das partículas, uma comparação entre o modelo radial e de *bounding box* para, respectivamente, a conversão com IB e VOF, se existe possibilidade de utilizar uma c_{dist} que varia automaticamente com a aplicação sem dependência de valor admitido pelo usuário, um estudo para aplicação dessa metodologia de conversão para modelos alternativos de DPM, VOF, IB

ou seus análogos como, por exemplo, DEM. Com o algoritmo aplicado e maior familiaridade com todas as ferramentas explícitas, futuros trabalhos dentro do MFLab poderão se basear e melhorar neste modelo de conversão Lagrange-Euler.

APÊNDICE A

Caso os vídeos anexos estejam indisponíveis, eles também estão disponíveis em:
<https://1drv.ms/b/s!AvYSfWyO2-eRjeN8tL-0yr5LstNAbA?e=gSkSK3> <Acesso em: 30 dez. 2023>

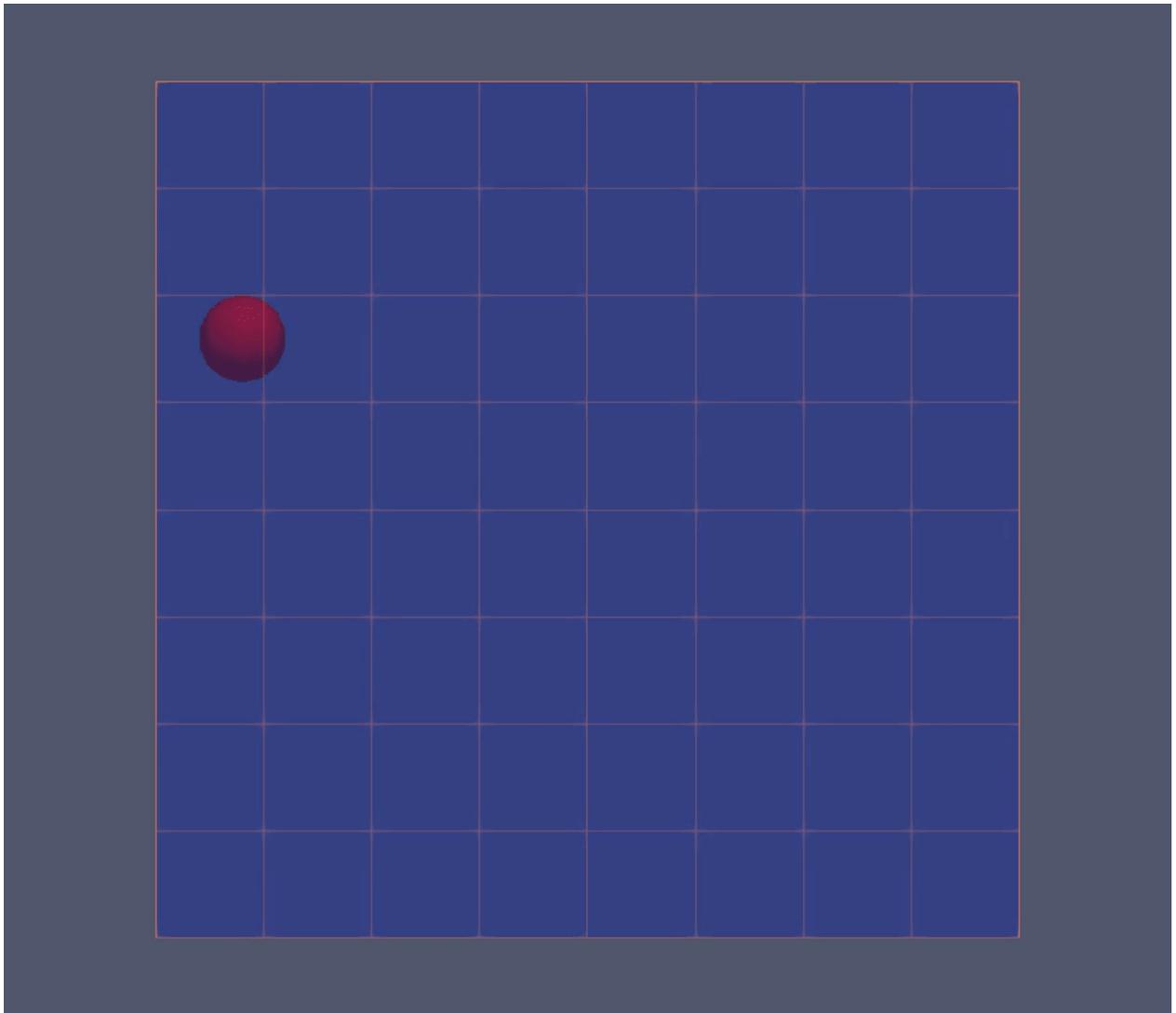


Figura 5.1: WTD1

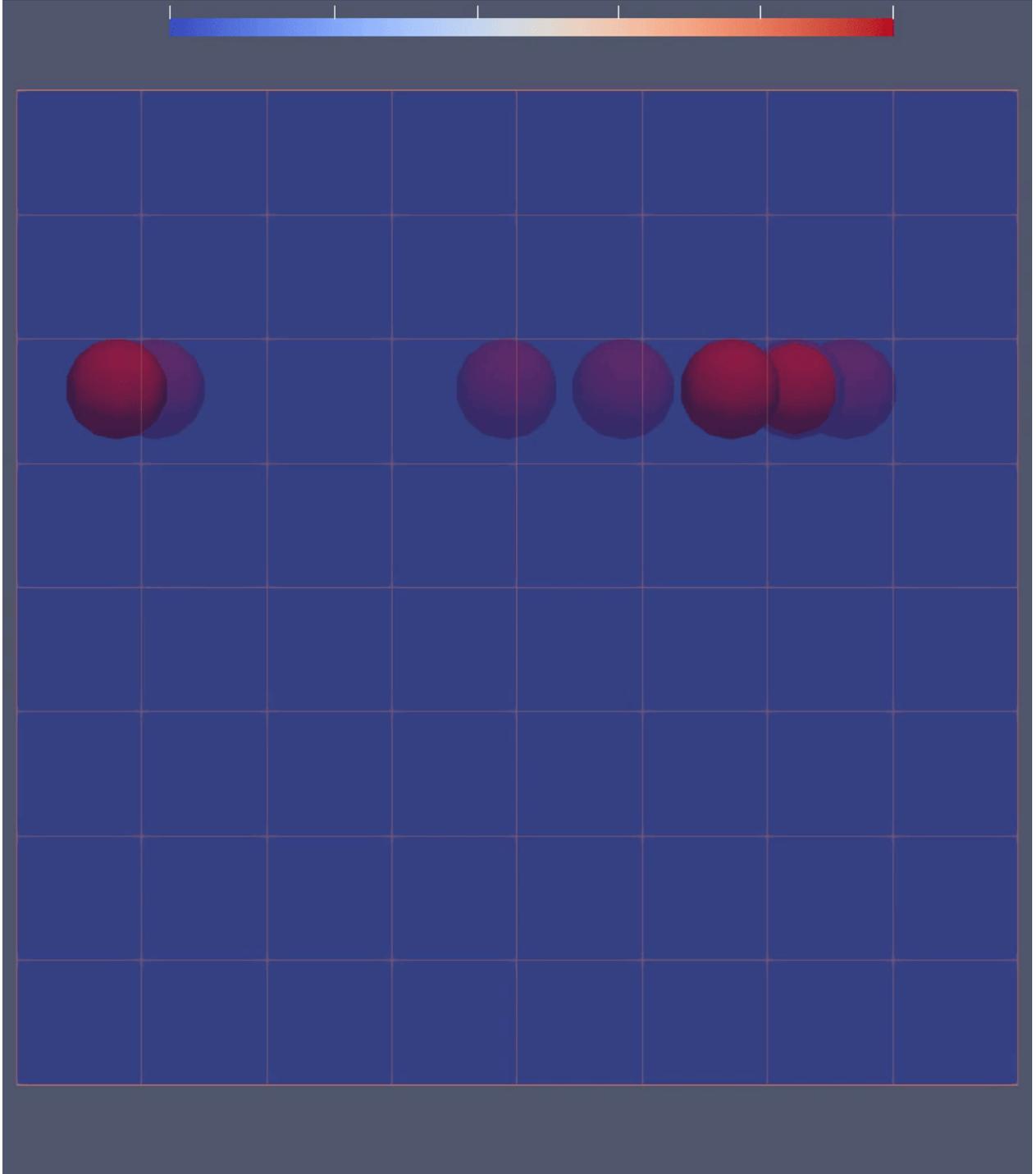


Figura 5.2: WTD2

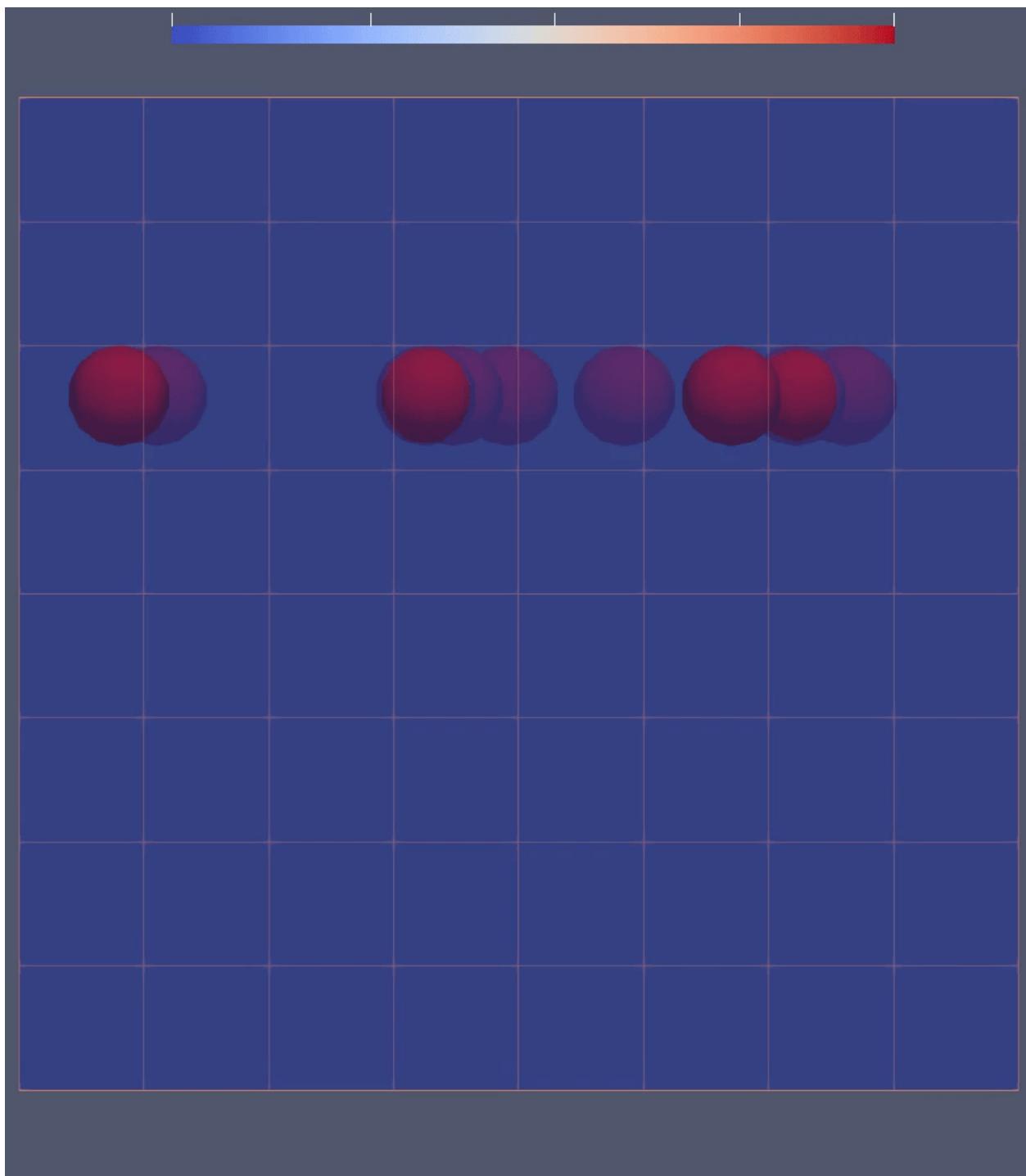


Figura 5.3: WTD3

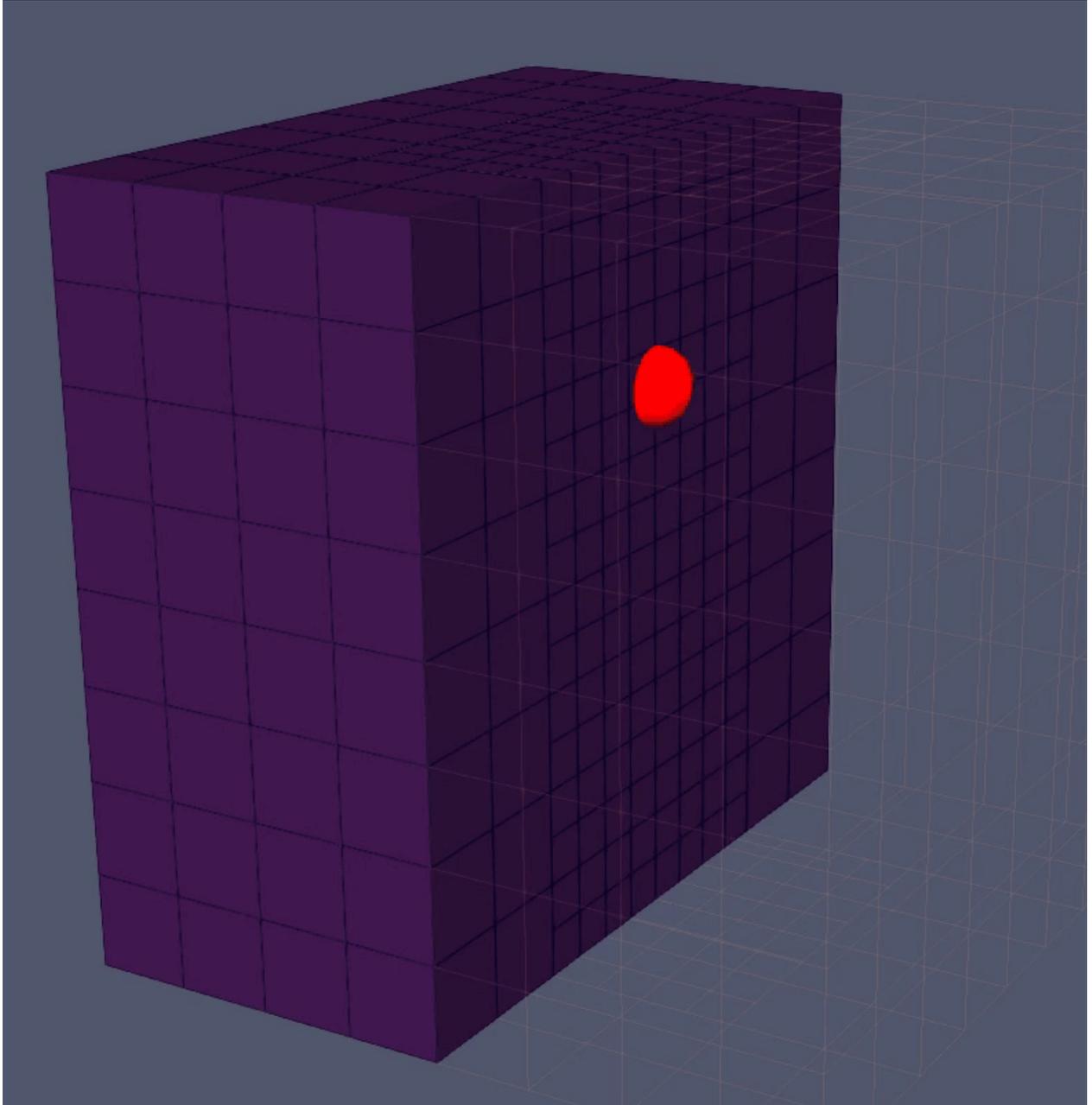


Figura 5.4: WTD4

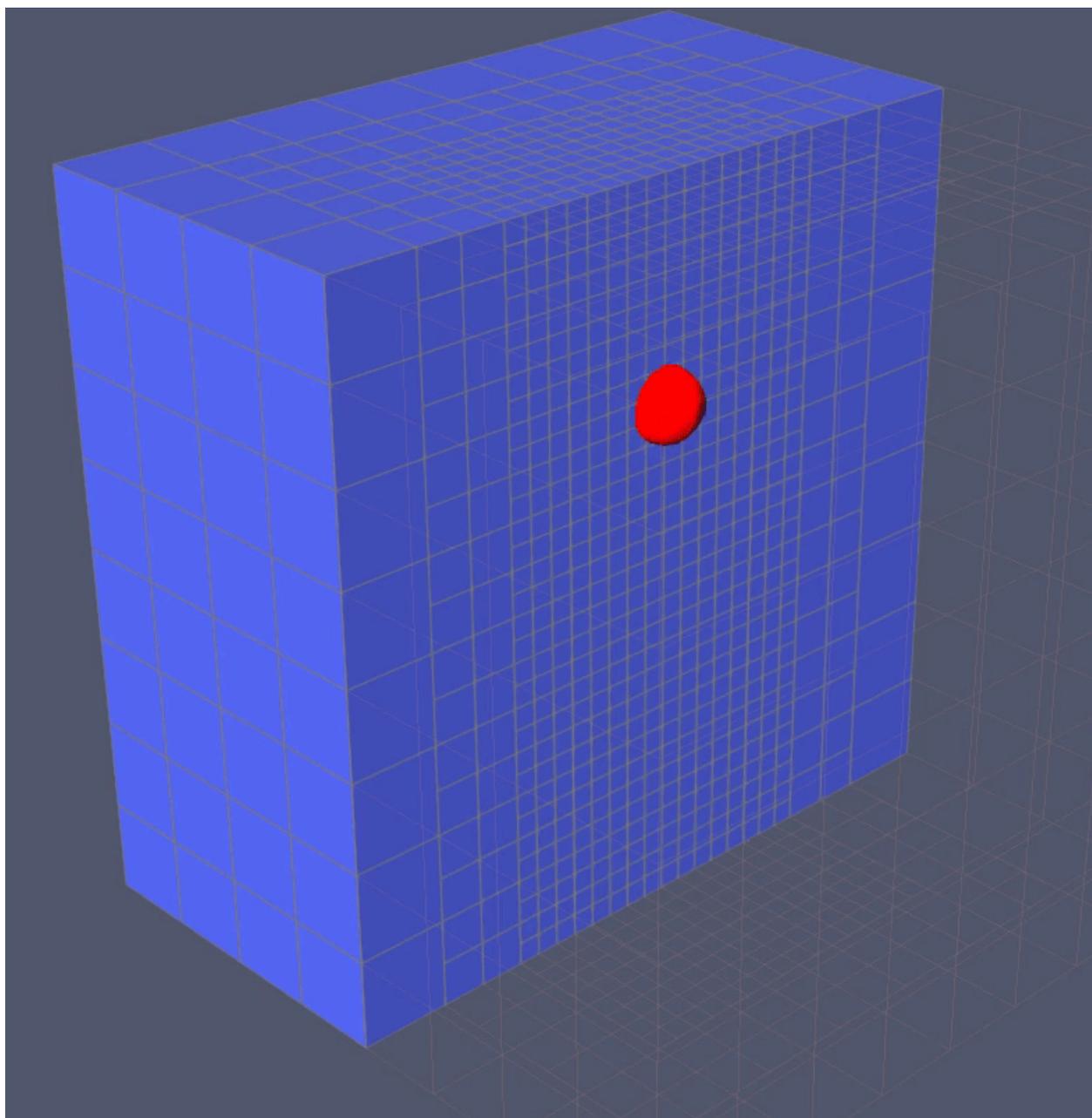


Figura 5.5: WTD5

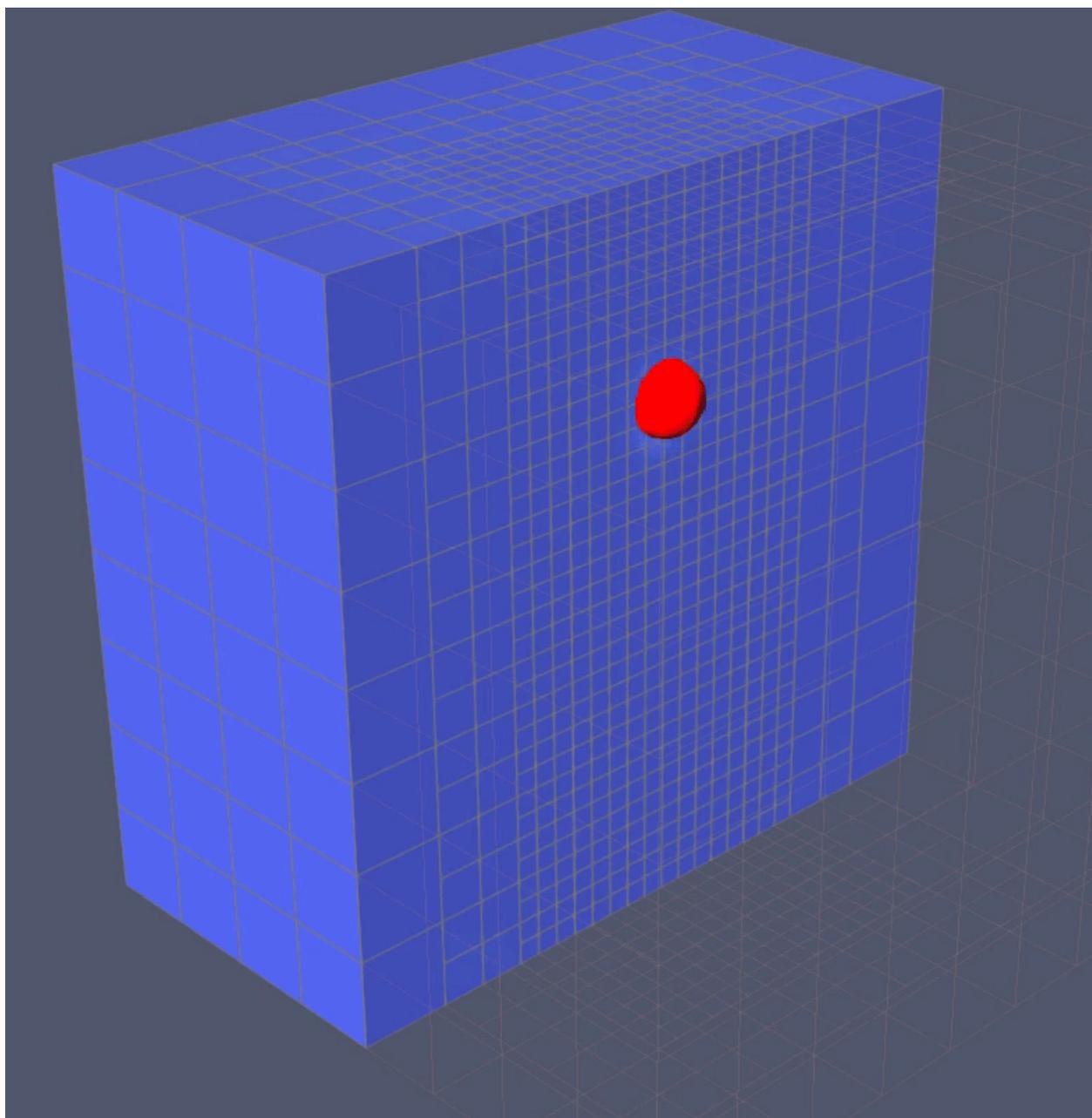


Figura 5.6: WTD6a

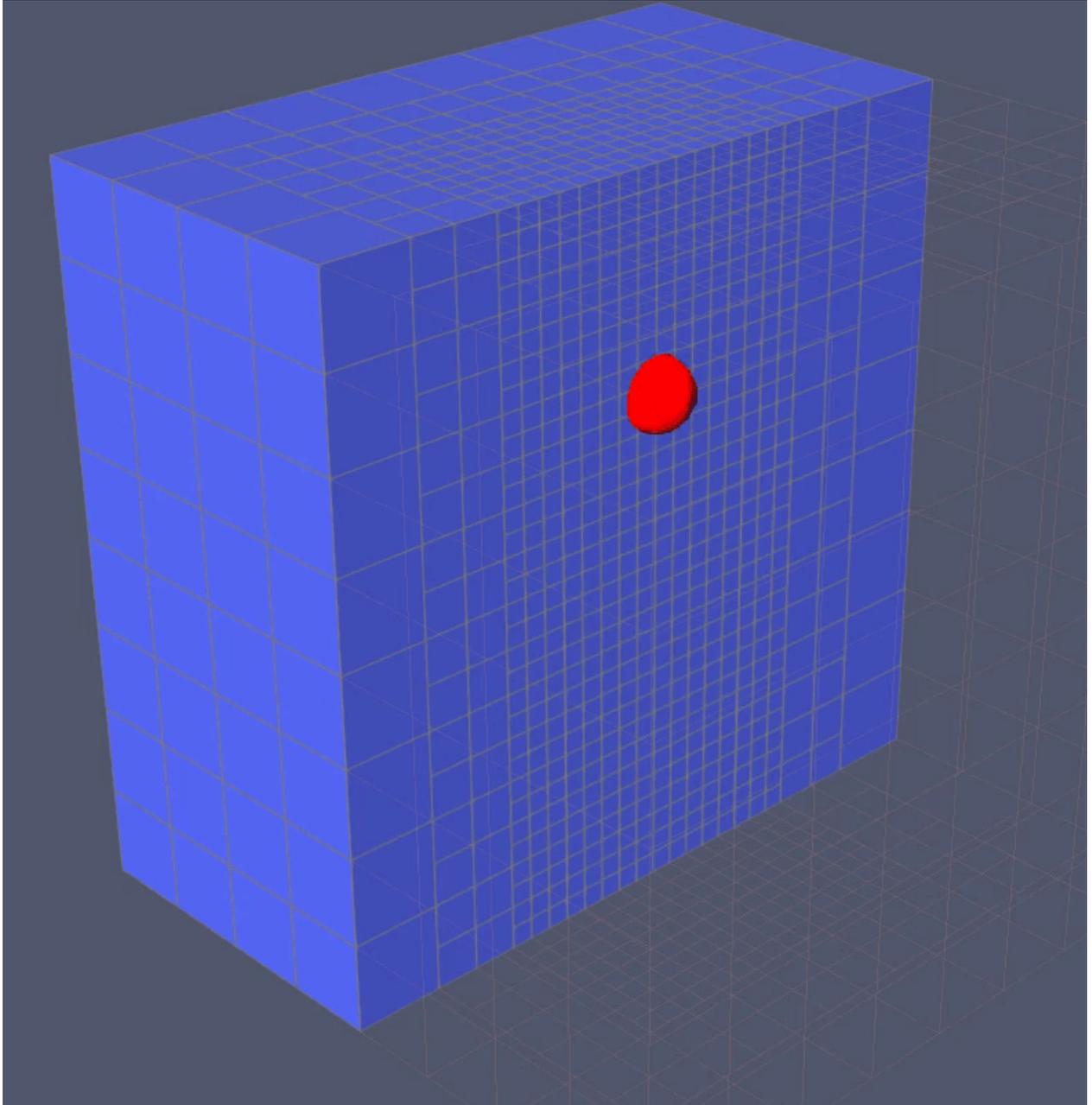


Figura 5.7: WTD65

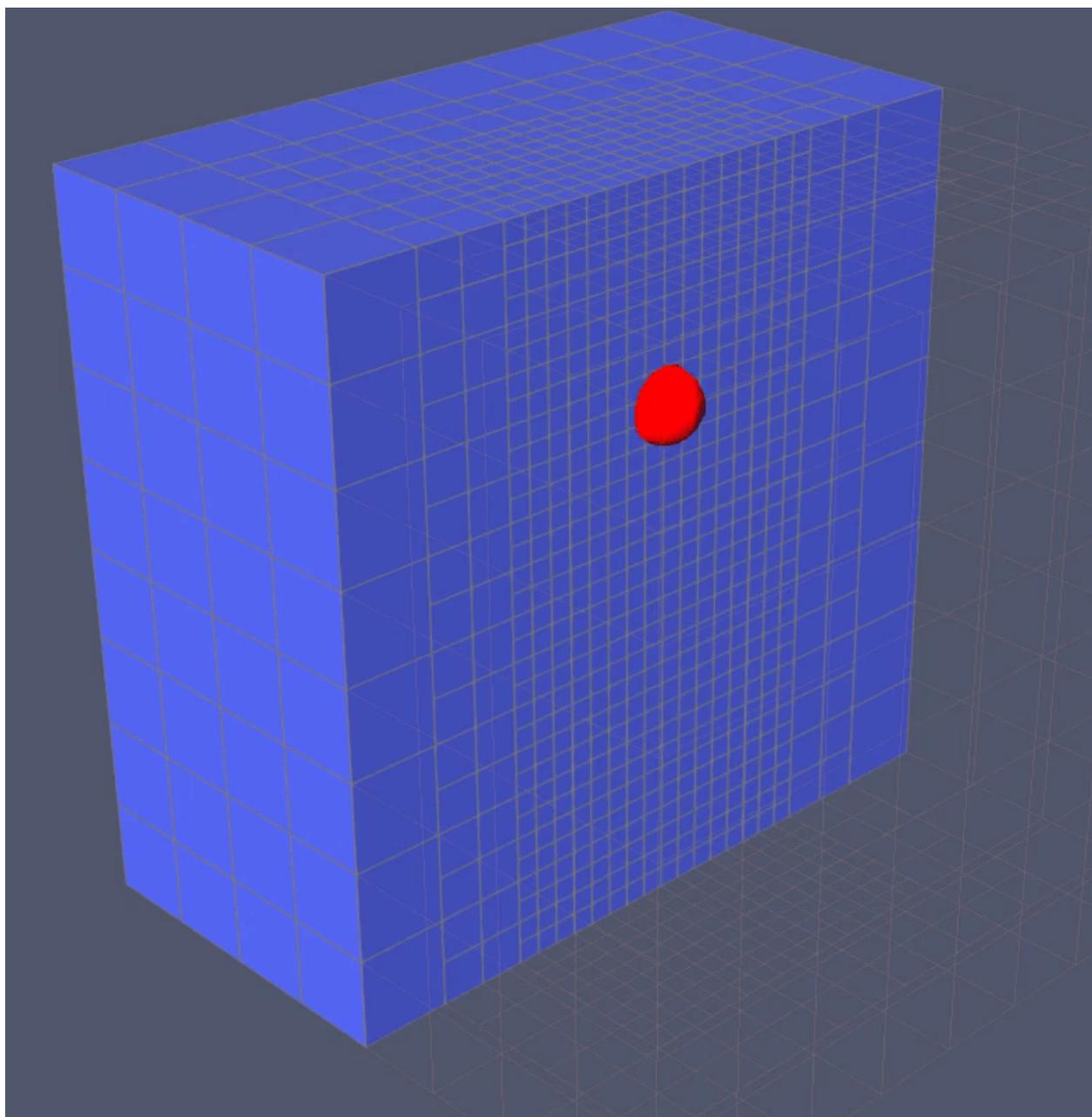


Figura 5.8: WTD7

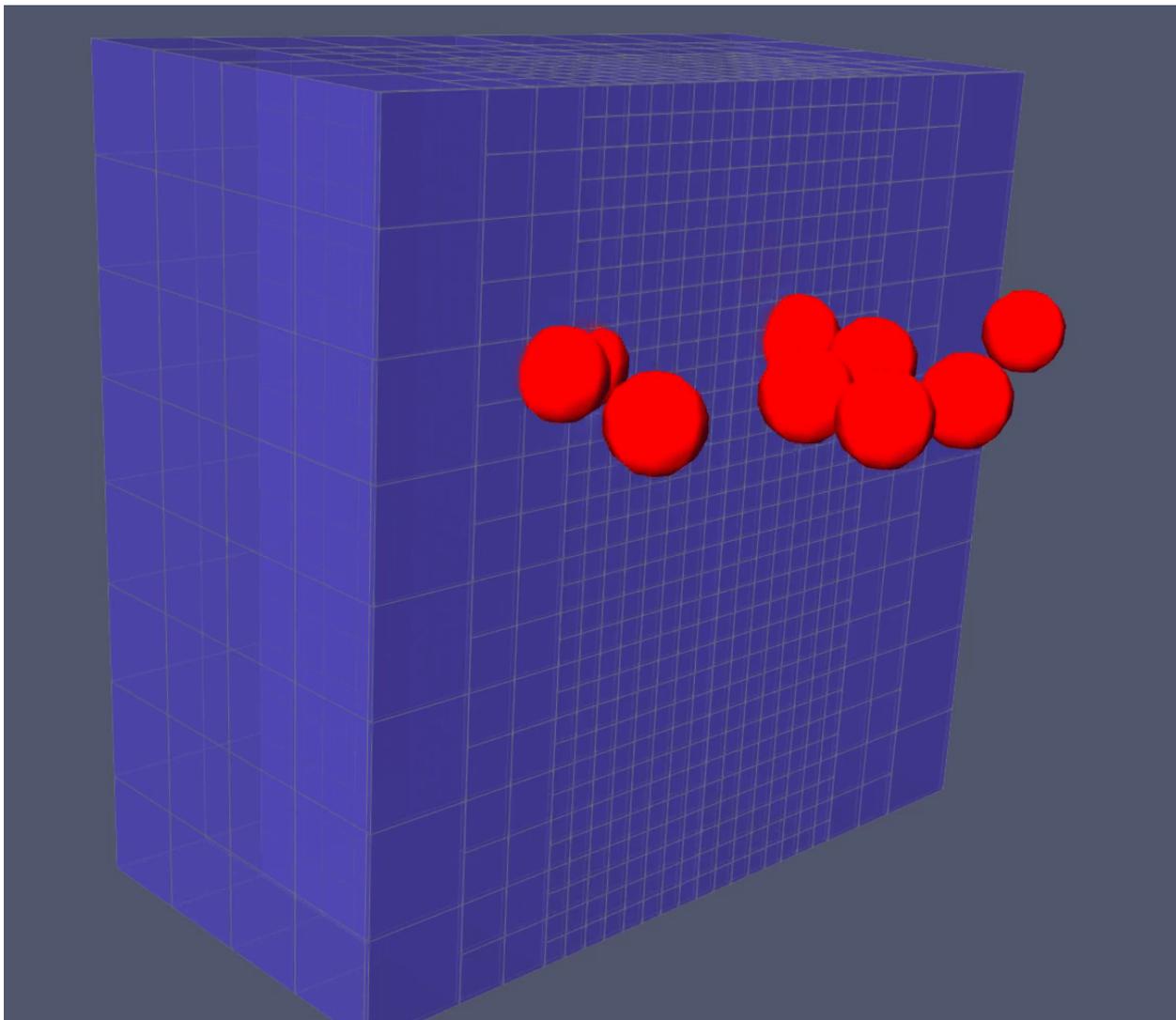


Figura 5.9: WTD8

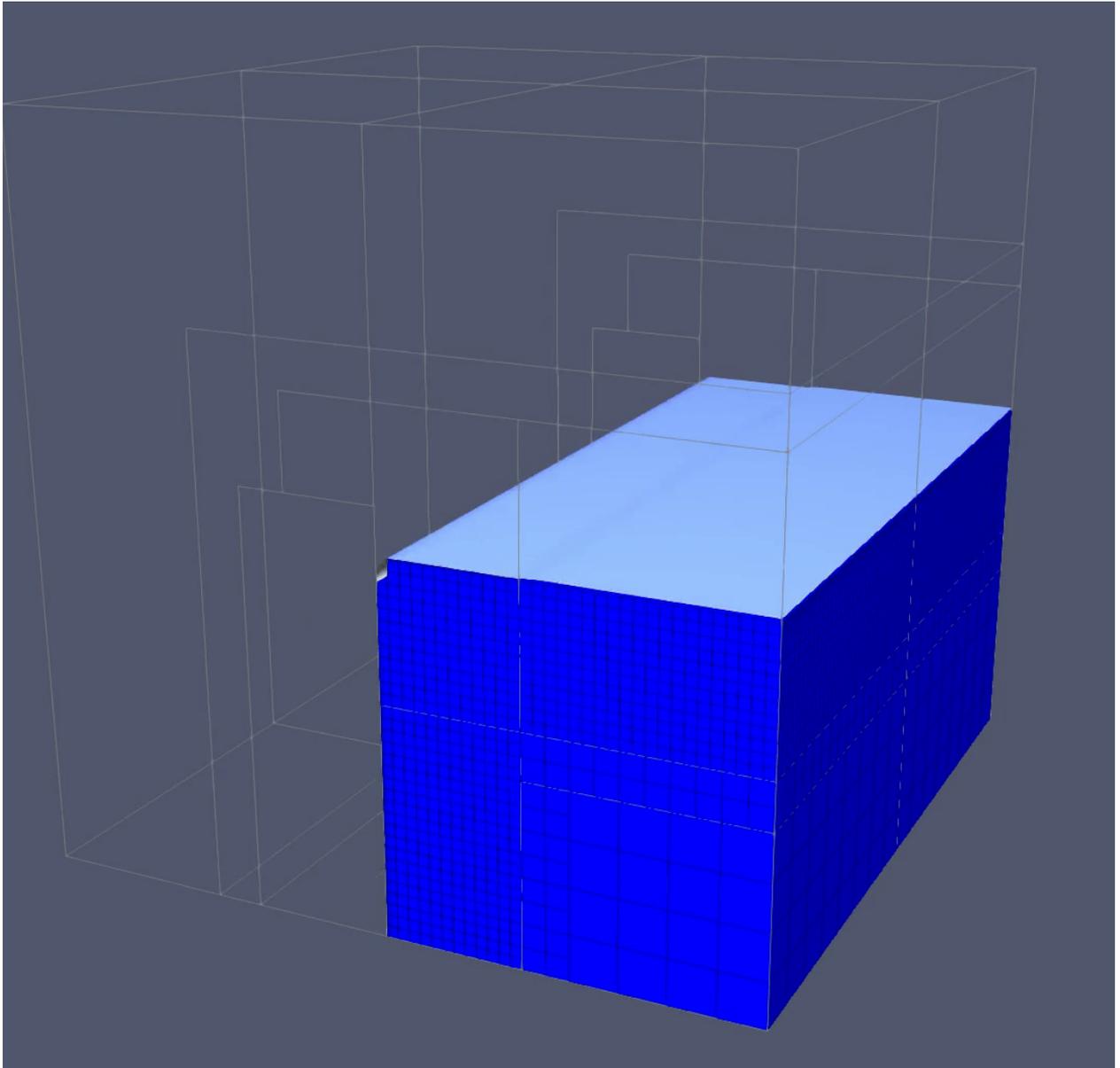


Figura 5.10: WTC1

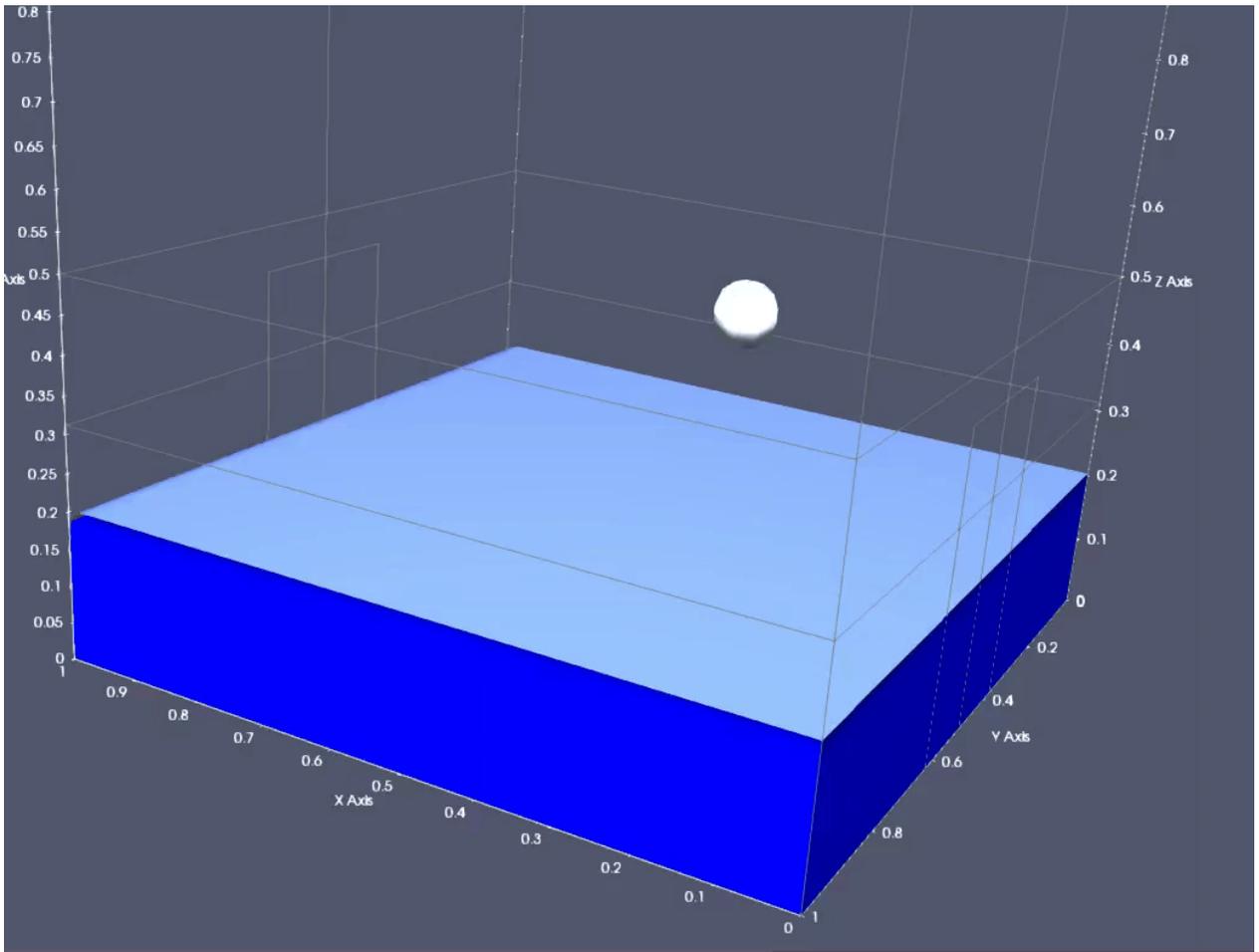


Figura 5.11: WTC2

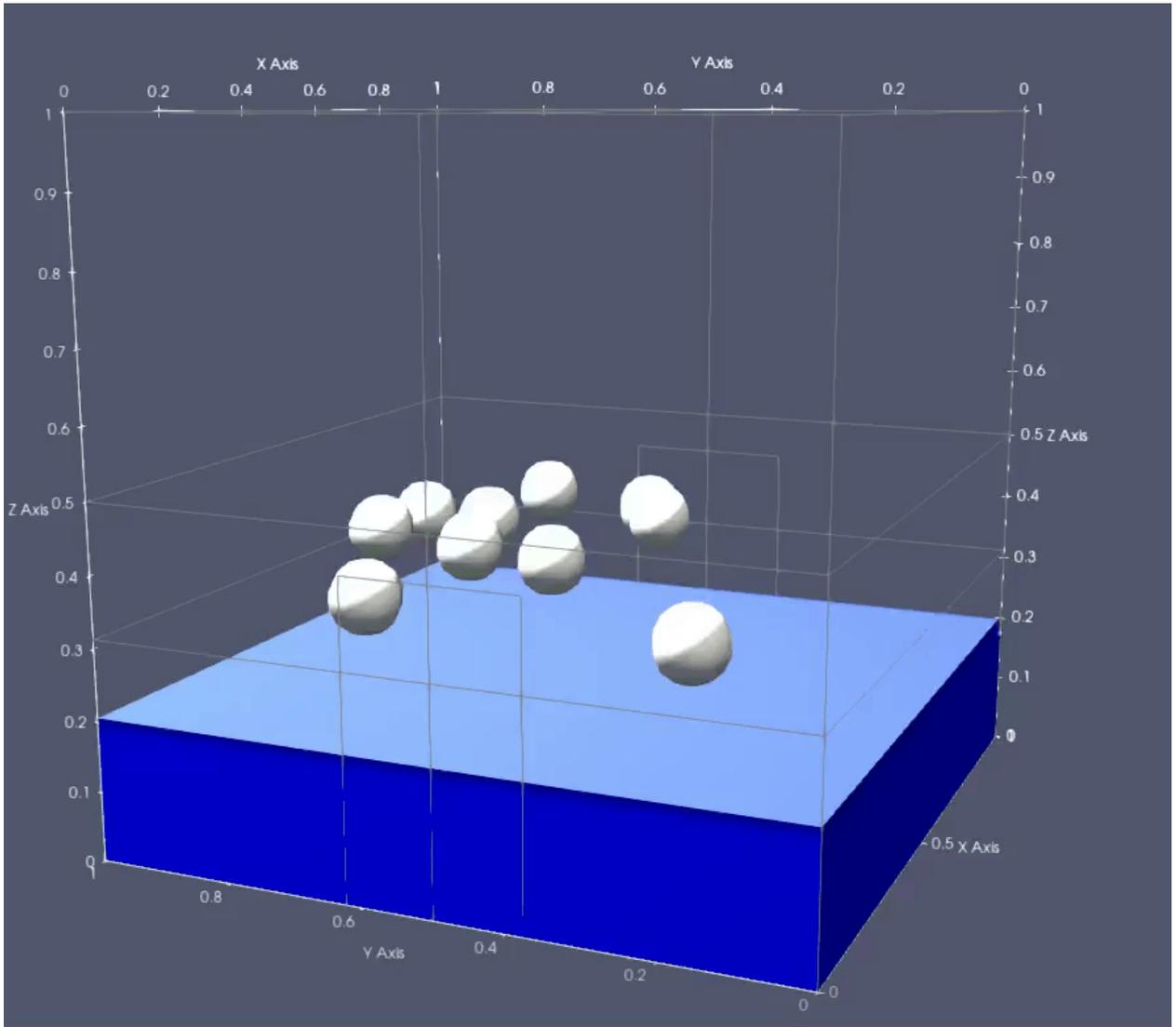


Figura 5.12: WTC3

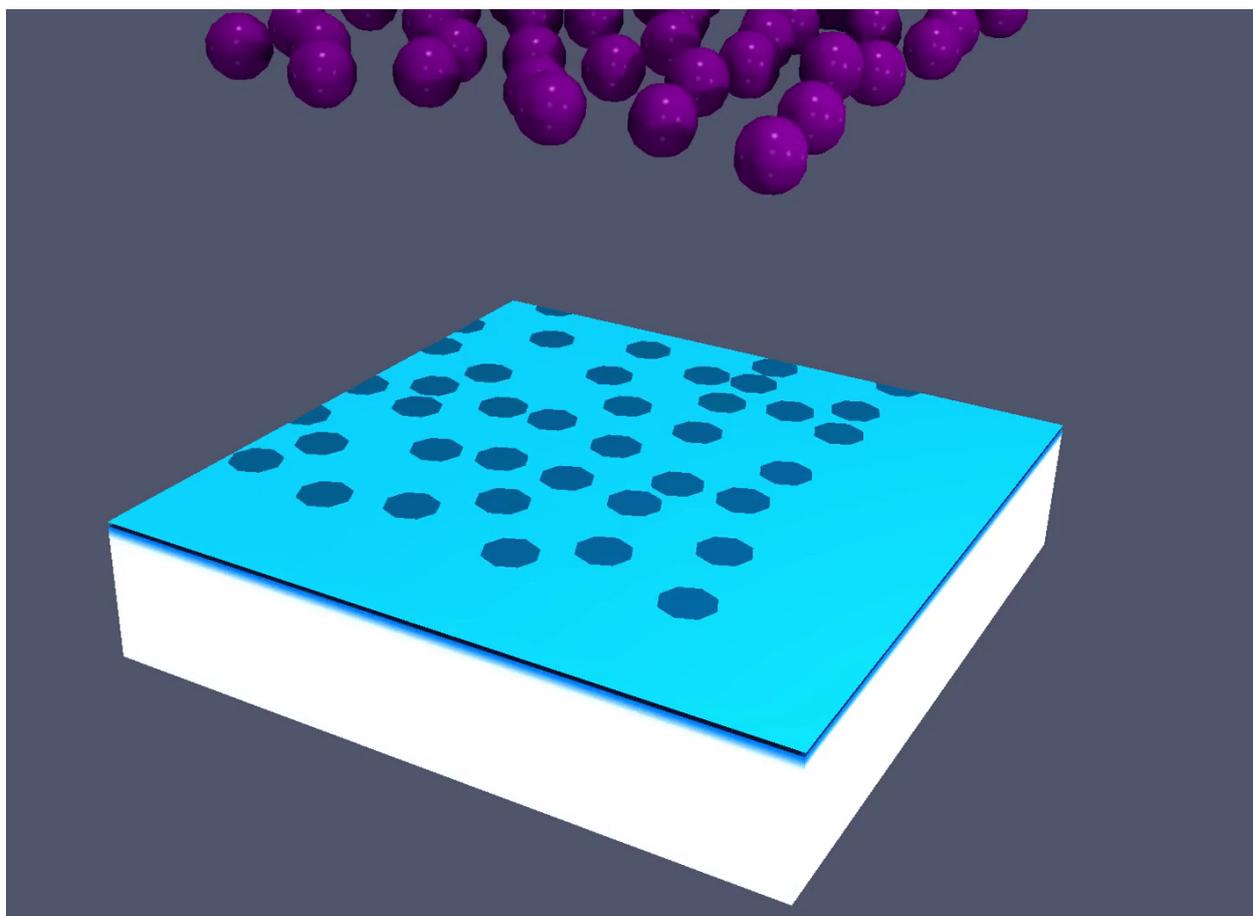


Figura 5.13: WTC4

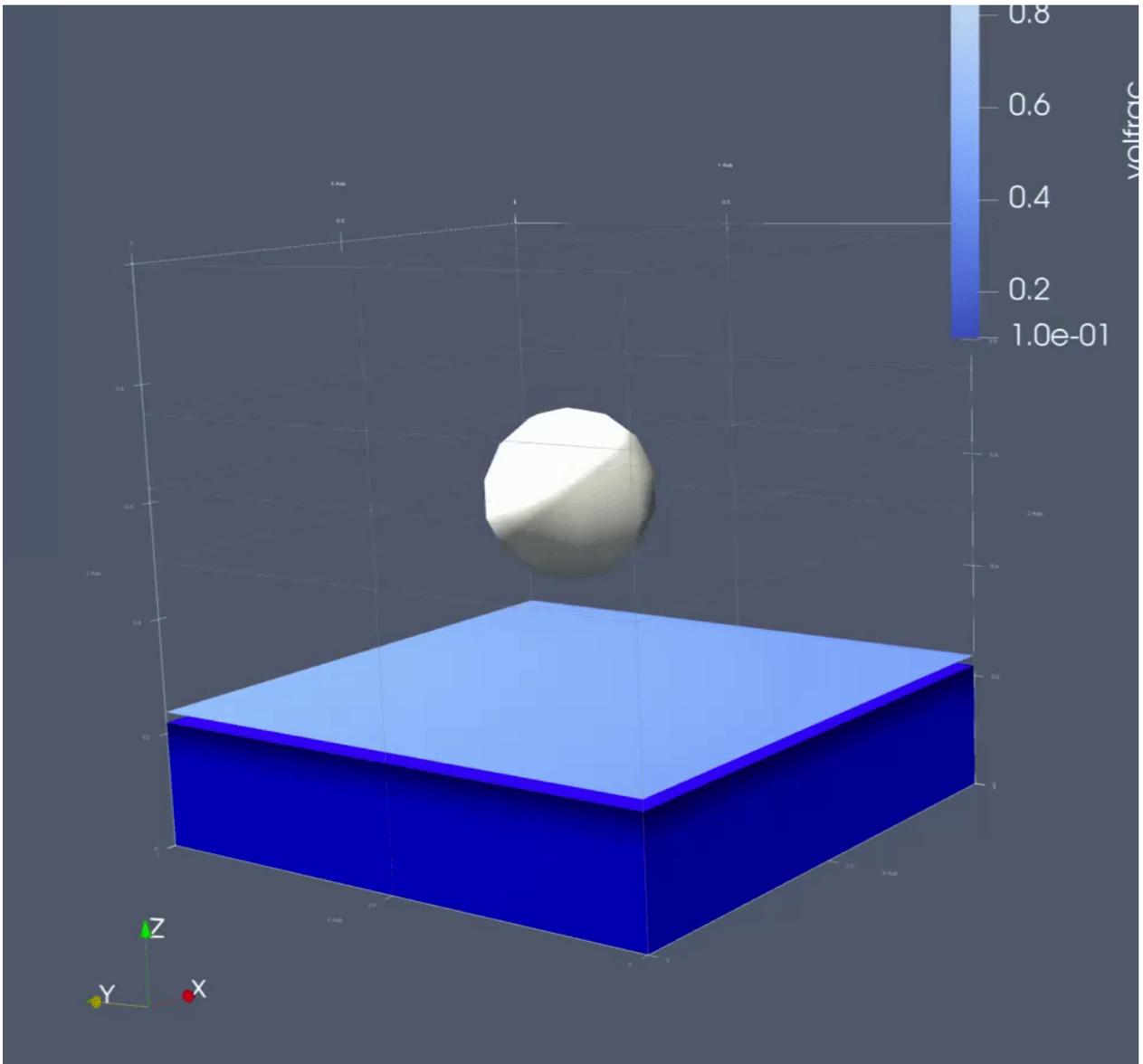


Figura 5.14: WTC5

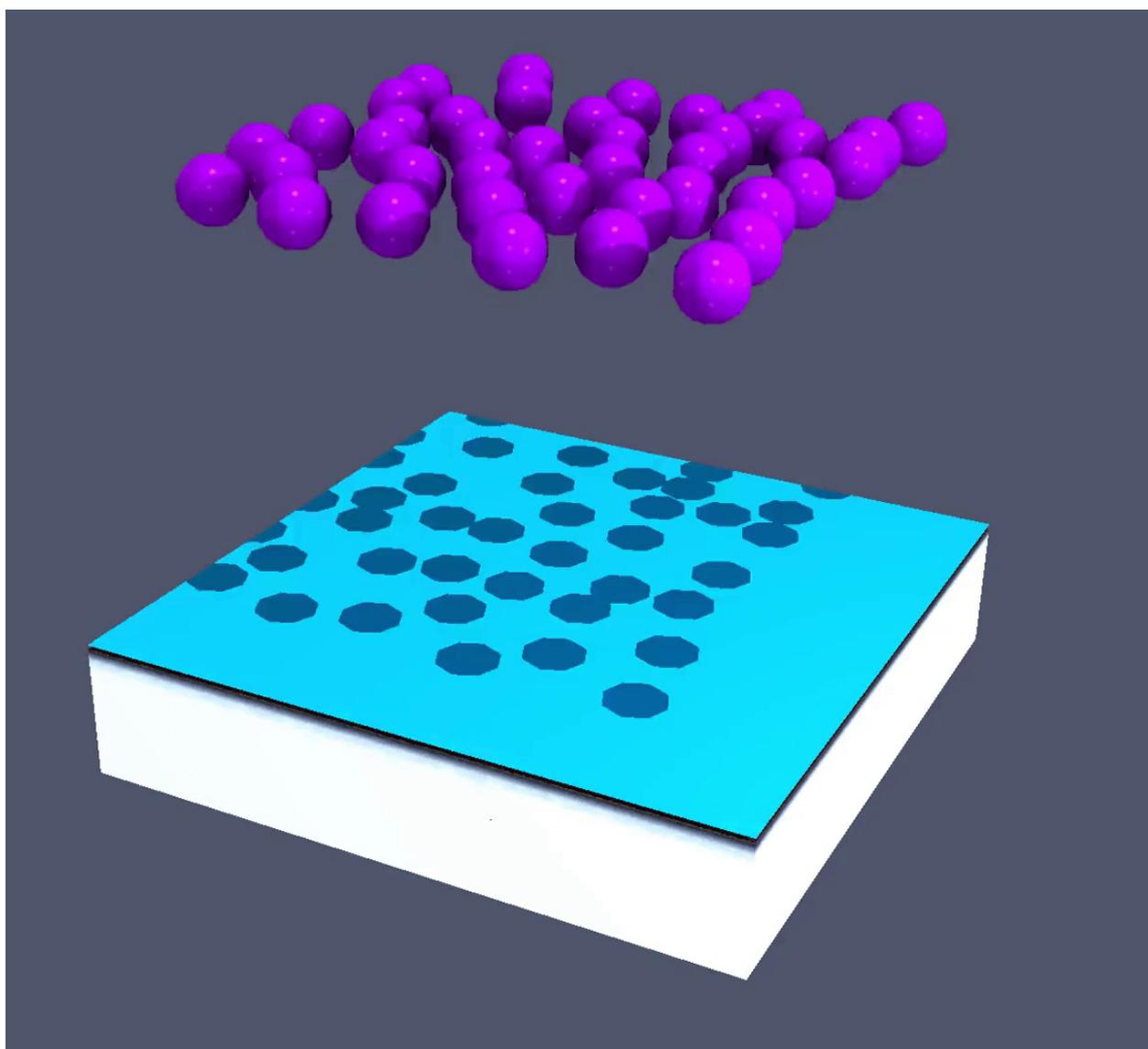


Figura 5.15: WTC6

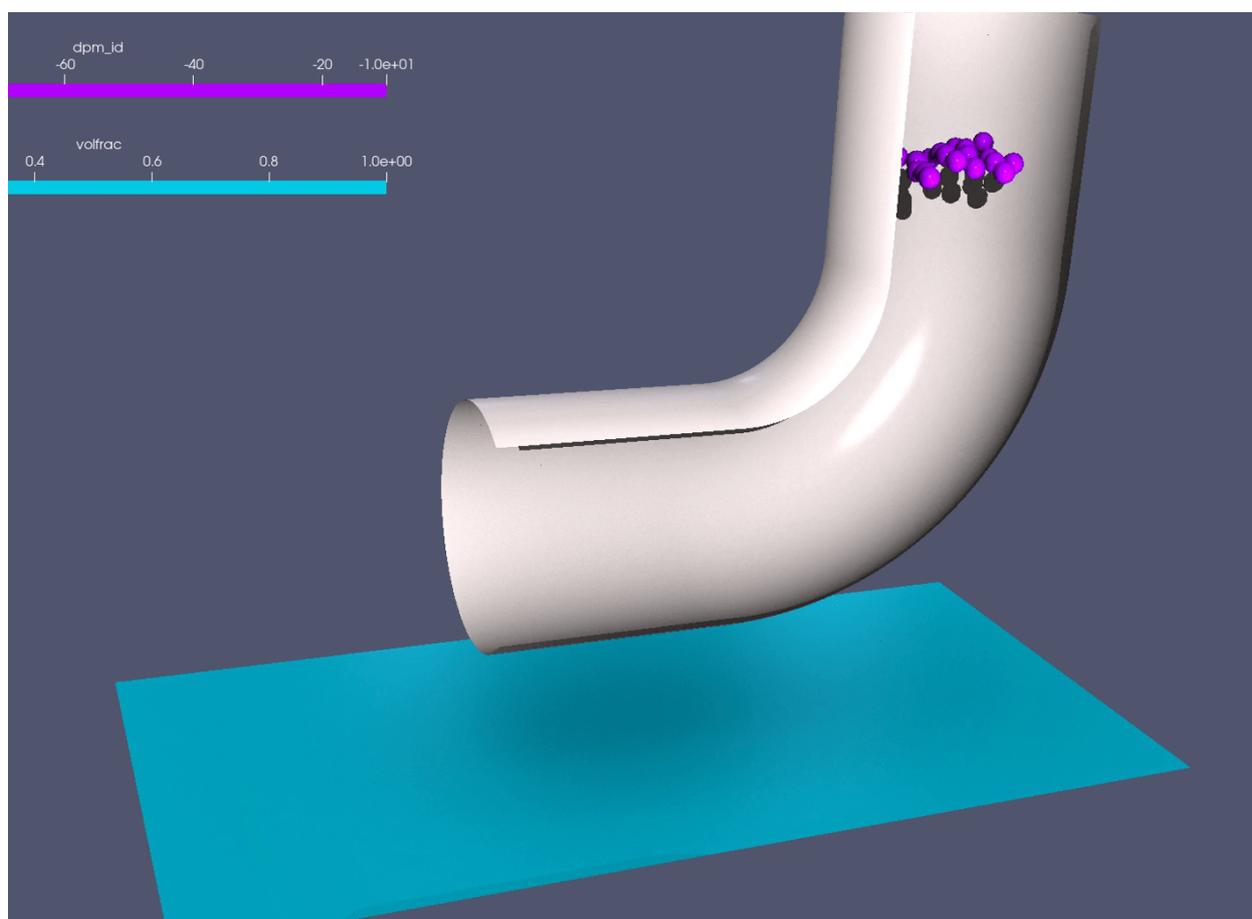


Figura 5.16: Simulação final 1

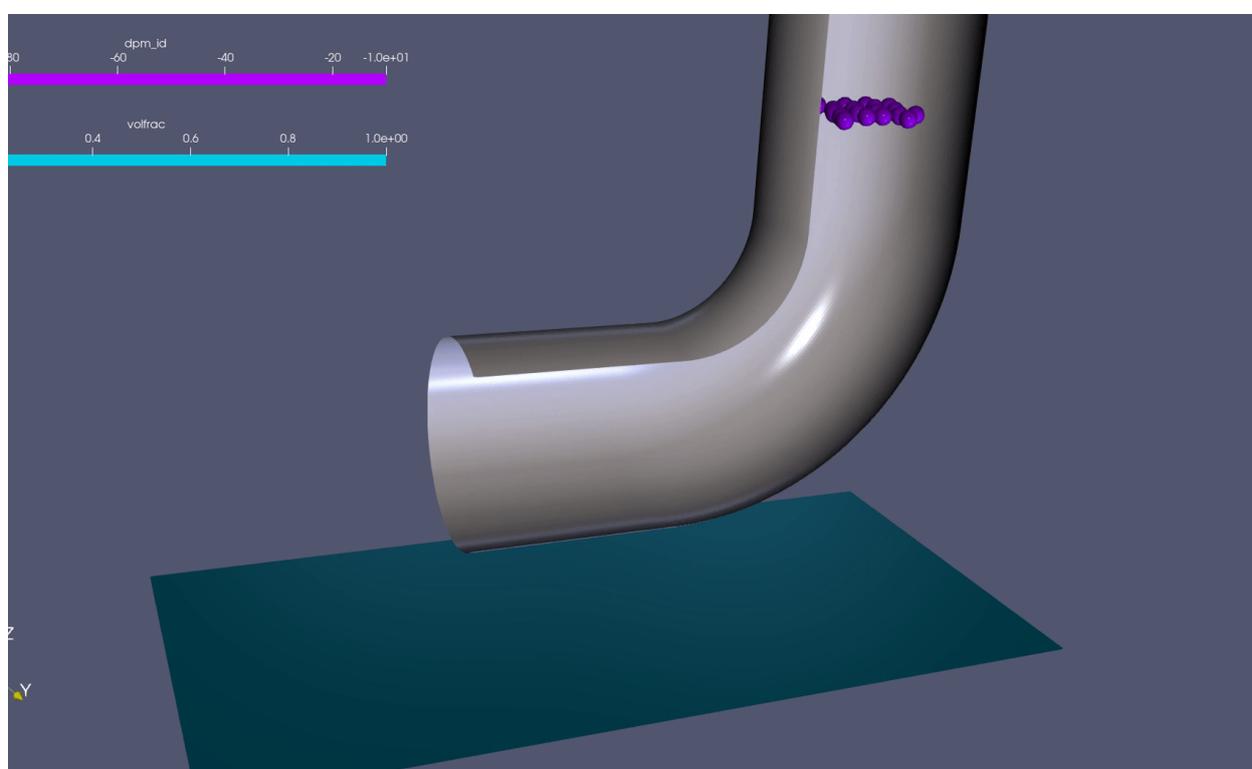


Figura 5.17: Simulação final 2

Referências Bibliográficas

- AL, G. P. D. S. et. *Electrolyte thermodynamic modeling for crude distillation units overhead systems*. 2017. 83 p. Disponível em: <https://minerva.ufrj.br/F/?func=direct&doc_number=000882356&local_base=UFR01>.
- AL-MOUBARAKI, A. H.; OBOT, I. B. Corrosion challenges in petroleum refinery operations: Sources, mechanisms, mitigation, and future outlook. *Journal of Saudi Chemical Society*, v. 25, n. 12, p. 101370, 2021. ISSN 1319-6103. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1319610321001757>>.
- AL-SHEBEEB, B. G. O. Computer aided process planning approach for cost reduction and increase in throughput. In: Proceedings of the International Conference on Industrial Engineering and Operations Management, 2016. Detroit, Michigan, EUA: [s.n.], 2016.
- BARBI, F. et al. Numerical experiments of ascending bubbles for fluid dynamic force calculations. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 40, n. 11, p. 519, Oct 2018. ISSN 1806-3691. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s40430-018-1435-7>>.
- BOUSSINESQ, J. *Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes a grande section*. [S.l.]: Fautiers-Villars, Paris, 2nd edition, 1877.
- CAPECELATRO, J.; DESJARDINS, O. An euler-lagrange strategy for simulating particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, v. 238, p. 1–31, 2013. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999112007462>>.
- CASTRO, L. P. d. et al. Implementation of a hybrid lagrangian filtered density function-large eddy simulation methodology in a dynamic adaptive mesh refinement environment. *Physics of Fluids*, v. 33, n. 4, p. 045126, 2021.
- Catta Preta, R. T. O. *Modelagem matemática e computacional de escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso*. 2023. 174 p.
- COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM Journal of Research and Development*, v. 11, n. 2, p. 215–234, 1967.
- CROWE, C. T. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. [S.l.]: CRC Press, 2011.
- DAMASCENO, M.; VEDOVOTO, J.; SILVEIRA-NETO, A. Turbulent inlet conditions modeling using large-eddy simulations. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, v. 104, p. 105–132, 01 2015.
- DAMASCENO, M. M. R.; SANTOS, J. G. de F.; VEDOVOTO, J. M. Simulation of turbulent reactive flows using a fdf methodology – advances in particle density control for normalized variables. *Computers & Fluids*, v. 170, p. 128–140, 2018. ISSN 0045-7930.

- DAMASCENO, M. M. R.; SANTOS, J. G. de F.; VEDOVOTO, J. M. Simulation of turbulent reactive flows using a fdf methodology – advances in particle density control for normalized variables. *Computers & Fluids*, v. 170, p. 128 – 140, 2018. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793018302494>>.
- ELGHOBASHI, S. On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied Scientific Research*, v. 52, p. 309–329, 1994.
- EVARD, F. A multi-scale approach to simulate atomisation processes. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 119, p. 194–216, 2019.
- EVARD, F.; DENNER, F.; van Wachem, B. A multi-scale approach to simulate atomisation processes. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 119, p. 194–216, 2019. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193221830764X>>.
- FREITAS, A. P. M. de. **Modelagem numérico-computacional da coalescência de gotas e bolhas em escoamentos bifásicos turbulentos**. 2023. 76 p.
- GERMANO, M. A proposal for a redefinition of the turbulent stresses in the filtered navier–stokes equations. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 29 (7), p. 2323–2324, 1986. ISSN 0031-9171.
- GERMANO, M. *et al.* A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 3, p. 1760–1765, 1991. ISSN 1089-7666.
- HART, J. Comparison of turbulence modeling approaches to the simulation of a dimpled sphere. *Procedia Engineering*, v. 147, p. 68–73, 2016. ISSN 1877-7058. The Engineering of SPORT 11. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877705816306385>>.
- JAIN, D.; KUIPERS, J.; DEEN, N. G. Numerical study of coalescence and breakup in a bubble column using a hybrid volume of fluid and discrete bubble model approach. *Chemical Engineering Science*, v. 119, p. 134–146, 2014. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250914004448>>.
- KEMPE, T.; FRÖHLICH, J. An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Journal of Computational Physics*, v. 231, n. 9, p. 3663–3684, 2012. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999112000423>>.
- KRAUSE, M. J. Through Numerical Simulation to Scientific Knowledge. In: SCHWEIKER, M. *et al.* (Ed.). *Measurement and Understanding in Science and Humanities*. Wiesbaden: Palgrave Macmillan, 2023. p. 201–215.
- LAU, Y. *et al.* Numerical study of bubble break-up in bubbly flows using a deterministic euler–lagrange framework. *Chemical Engineering Science*, v. 108, p. 9–22, 2014. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250913008294>>.
- LILLY, D. K. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 4, p. 633–635, 1992. ISSN 1089-7666.
- MAITRI, R. *et al.* An improved ghost-cell sharp interface immersed boundary method with direct forcing for particle laden flows. *Computers Fluids*, v. 175, p. 111–128, 2018. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793018305401>>.

MARQUES, D. G. *Efeito do tipo de neutralizante e ponto de injeção no processo corrosivo do sistema de topo da torre de destilação atmosférica de petróleo*. 2022.

MAXEY, M. *et al.* Simulations of dispersed turbulent multiphase flow. *Fluid Dynamics Research*, v. 20, n. 1, p. 143–156, 1997. ISSN 0169-5983. International Symposium on Mathematical of Turbulent Flows. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169598396000421>>.

MELO, R. R. da S. *Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia da fronteira imersa e malha adaptativa*. 2007. 197 p. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/18667>>.

MOTA, P. H. A.; VEDOVOTTO, J. M.; ARISTEU, S.-N. Assessment of critical brine disposal operations conditions by cfd modeling and a kriging metamodel. *Environmental Fluid Mechanics*, v. 167, p. 1573–1510, 2023.

NETO, A. S. *Escoamentos Turbulentos - Análise Física e Modelagem Teórica*. [S.l.]: Composer - Uberlândia, 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.

NOROUZI, H. R. *Coupled CFD-DEM Modeling: Formulation, Implementation and Application to Multiphase Flows*. [S.l.]: John Wiley Sons, Ltd., 2016.

OSHER, S.; SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, v. 79, n. 1, p. 12–49, 1988. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999188900022>>.

OSSAI, C. I. Advances in asset management techniques: An overview of corrosion mechanisms and mitigation strategies for oil and gas pipelines. *International Scholarly Research Notices*, v. 2012, p. 1–10, 2012. Disponível em: <<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:58315296>>.

PINHEIRO, A. P. *et al.* Modelling of aviation kerosene droplet heating and evaporation using complete fuel composition and surrogates. *Fuel*, v. 305, p. 121564, 2021. ISSN 0016-2361. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236121014459>>.

PINHEIRO, A. P. *et al.* Ethanol droplet evaporation: Effects of ambient temperature, pressure and fuel vapor concentration. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 143, p. 118472, 2019. ISSN 0017-9310. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931019309214>>.

PIVELLO, M. *et al.* A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 58, p. 72–82, 2014. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932213001286>>.

RUDMAN, M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 24, n. 7, p. 671–691, 1997. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/%28SICI%291097-0363%2819970415%2924%3A7%3C671%3A%3AAID-FLD508%3E3.0.CO%3B2-9>>.

SANTOS, J. G. de F. *Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-sólido em malha adaptativa dinâmica*. 2019. 158 p. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/27034>>.

SCHEMPP, P. *et al.* Corrosion in the crude distillation unit overhead line: Contributors and solutions. In: Proceedings of the European Corrosion Congress, EUROCORR, 2017. Prague, República Checa: [s.n.], 2017.

SETHIAN, J. A.; SMEREKA, P. Level set methods for fluid interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 35, n. 1, p. 341–372, 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.35.101101.161105>>.

SOMMERFELD, M. Numerical methods for dispersed multiphase flows. In: _____. *Particles in Flows*. Cham: Springer International Publishing, 2017. p. 327–396. ISBN 978-3-319-60282-0. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-60282-0_6>.

SOMMERFELD, M.; BOURLOUTSKI, E.; BRÖD, D. Euler/lagrange calculations of bubbly flows with consideration of bubble coalescence. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450810324>, v. 81, p. 508–518, 2003. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cjce.5450810324>>.

SOUZA, P. R. C. *et al.* Multi-phase fluid–structure interaction using adaptive mesh refinement and immersed boundary method. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 2022.

STIVAL, L. J. *et al.* Wake modeling and simulation of an experimental wind turbine using large eddy simulation coupled with immersed boundary method alongside a dynamic adaptive mesh refinement. *Energy Conversion and Management*, v. 268, p. 115938, 2022. ISSN 0196-8904. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890422007348>>.

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://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105001385>>.

van Wachem *et al.*, B. A multi-scale approach to simulate atomisation processes. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 119, p. 194–216, 2019. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193221830764X>>.

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.

VILLAR, M. M. *Detailed Two-Dimensional Numerical Analysis of Multiphase Flows*. 2007. 203 p. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14664>>.

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://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932207001474>>.

WHITE, F. M. *Mecânica dos Fluidos*. [S.l.]: AMGH Editora Ltda., 2011.

ZEIGLER, B. P. *et al.* History of Simulation. In: ÖREN, T.; ZEIGLER, B. P.; TOLK, A. (Ed.). *Body of Knowledge for Modeling and Simulation*. Cham, Suíça: Springer, 2023. p. 413–434.