

APLICAÇÃO DE UM MODELO DE FECHAMENTO TENSORIAL PARA A SIMULAÇÃO DE PROBLEMAS DE SUPERFÍCIE LIVRE.

R. V. P REZENDE¹, A. A. ULSON DE SOUZA¹ e S. M. A. GUELLI ULSON DE SOUZA¹

¹ Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos
E-mail para contato: rezendervp@gmail.com

RESUMO – Em escoamentos multifásicos a natureza física e matemática do fenômeno leva a postulação de termos de fechamento para a troca de momentum através da interface, bem como outras propriedades, e há a disposição vários modelos com este intento. Mas, diferentemente dos escoamentos dispersados, problemas de superfície livre carecem de correlações para o coeficiente de arrasto. Neste trabalho, o cálculo da força de densidade interfacial é feita dinamicamente sem o uso de qualquer correlação, modelando-se o tensor e os vetores normais à interface, e aplicando-o a problemas benchmark como quebra de barreira e instabilidade de Rayleigh-Taylor. A comparação dos resultados foi satisfatória, tanto com dados numéricos e experimentais da literatura, quanto com a abordagem padrão também empregada. Estas constatações indicam que o modelo é uma boa alternativa para problemas desta natureza, além de poder ser empregado diretamente para o cálculo do coeficiente de arrasto usando a formulação padrão.

1. INTRODUÇÃO

O aprimoramento e o desenvolvimento de novos modelos e técnicas de medição experimental em escoamentos multifásicos vêm permitindo nos últimos anos o estudo e análise de problemas multifásicos complexos. Códigos comerciais como o ANSYS CFX, ANSYS FLUENT e COMSOL, por exemplo, a cada ano apresentam novas ferramentas matemáticas e numéricas, o que tanto no meio industrial quanto acadêmico se traduzem em melhores ferramentas de pesquisa e, quando associadas a uma infraestrutura computacional adequada, em maior agilidade na análise de problemas computacionalmente proibitivos até a alguns anos dada à complexidade e tempo necessários em sua análise.

Entretanto, este grande avanço depende de quão robustos e abrangentes são os modelos e métodos numéricos desenvolvidos. E o principal concerne à descrição de como as diversas fases do escoamento interagem através de sua interface. E até mesmo a localização resolução e rastreamento desta interface é um problema complexo. Os modelos de fechamento - as equações constitutivas que descrevem como a informação é transferida de uma fase a outra - são diversos e dependentes de regime e morfologia como, por exemplo: escoamentos dispersos, polidispersos, para bolhas, gotas ou partículas sólidas e superfície livre. Esta última classe define-se como duas ou mais fases, separadas por uma interface bem definida e não conexa (não fechada) como a superfície entre um rio e a atmosfera. E quando a interface

é perturbada a morfologia local é alterada para um padrão disperso, como uma mistura de gotas e bolhas, e então os modelos calibrados para uma situação específica passam a não mais descrever a física do problema com a mesma robustez ou até mesmo falham totalmente.

Alguns trabalhos pioneiros lidaram com esta questão (Deendarlianto, *et al.*, 2012; Hänsch, *et al.*, 2012; Höhne, 2009; Höhne e Vallée, 2008, 2010). Os modelos consideram um “blending” entre modelos de superfície livre e partículas, e cálculo dinâmico do coeficiente de arrasto com base no módulo da tensão sobre a interface. Também abordando esta problemática, Rezende, *et al.* (2012) propuseram um modelo tensorial para o termo de troca de quantidade de movimento alternado a maneira clássica de tratamento do termo.

O presente trabalho é dar continuidade ao estudo desta abordagem tratando mais dois problemas distintos: instabilidade de Rayleigh-Taylor e Rompimento de Barreira. Problemas clássicos, mas com razões de densidade viscosidade e gradientes mais acentuados do que o abordado no primeiro trabalho de Rezende, *et al.* (2012).

2. MODELO MATEMÁTICO

O modelo empregado é apresentado em Rezende, *et al.* (2012), e considera o sistema isotérmico sem transferência de massa entre as fase. A turbulência não é levada em conta. Assim tem-se a conservação de massa,

$$\frac{\partial(r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = 0, \quad (1)$$

conservação da quantidade de movimento linear

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = & -\nabla(r_\alpha \langle p \rangle) + \dots \\ \dots + \nabla \cdot [r_\alpha \mu_\alpha \langle \nabla \mathbf{u}_\alpha + \nabla \mathbf{u}_\alpha^T \rangle] + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g} + \mathbf{M}_\alpha, & \end{aligned} \quad (2)$$

conservação do volume

$$\sum_{\alpha=1}^2 r_\alpha = 1, \quad (3)$$

e o termo de densidade de força interfacial da Equação (2)

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = -C_T \cdot [r_\alpha \langle \mu_\alpha \rangle \langle \partial_i u_{\alpha j} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \rangle + r_\beta \langle \mu_\beta \rangle \langle \partial_i u_{\beta j} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \rangle] \cdot (\partial_k r_\alpha \hat{\mathbf{e}}_k) \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \quad (4)$$

O termo $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ é apenas um artifício numérico que ativa o termo fonte junto à interface. Os detalhes da obtenção destas equações podem ser encontrados em Rezende (2008, 2014) bem como em outros trabalhos (Barbosa Jr, 2002; Drew, D., *et al.*, 1979; Drew, D. A., 1983, 1989, 1992; Drew, D. A. e Passman, 1999).

O modelo foi resolvido numericamente no simulador comercial ANSYS CFX R12.1

2. INSTABILIDADE DE RAYLEIGH-TAYLOR

2.1. Setup

A Figura 1 apresenta o setup do problema. Um fluido mais denso repousa sobre um menos denso. Uma perturbação inicial é imposta á interface e por ação da gravidade, os fluidos fluem em direções opostas cisalhando suas interfaces no processo. A viscosidade de ambos os fluidos é a mesma, mas a razão de densidades é cerca de 5,73. Em Rezende, *et al.* (2012) esta razão era bem sutil, cerca de 0,005. A malha cartesiana empregada é composta de 256 x 64 nós. Este problema é facilmente encontrado na literatura e é quase sempre usado como *benchmark* na análise de códigos numéricos (Fournier, *et al.*, 2002; He, *et al.*, 1999; Mehravaran e Hannani, 2008). Uma fonte onde sua descrição é bem simples e clara, e os resultados são de fácil comparação é dado por Jahanbakhsh, *et al.* (2007). Para um tempo físico de 1s o tempo de computação é de cerca de três dias com um passo de tempo de 0,001s em uma CPU QUAD Core i7-2600 @ 3.4GHz com 16GB de RAM.

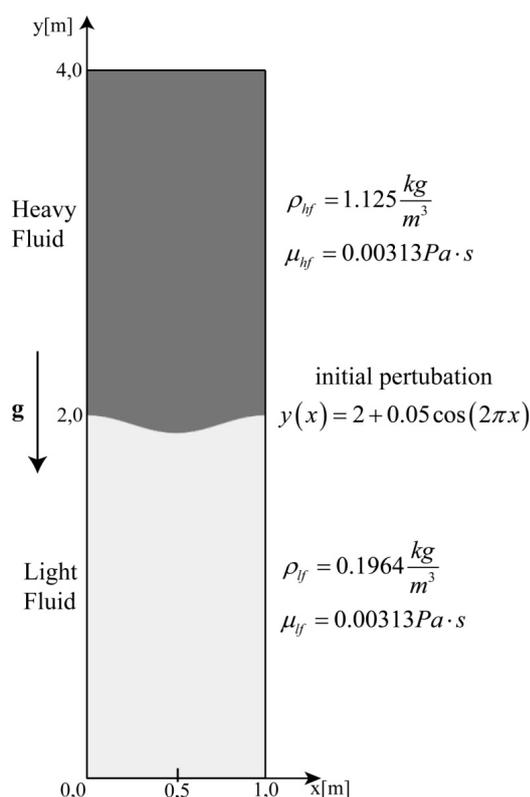


Figura 1 – Configuração e propriedades físicas empregadas na Instabilidade de Rayleigh-Taylor.

2.2. Resultados e Discussão

A comparação entre os resultados é apresentada na Figura 2. O comportamento macroscópico apresenta a mesma escala de tempo e os perfis de fração volumétrica são muito similares. Em (A) Jahanbakhsh, *et al.* (2007) empregam o modelo VOF com o esquema de

reconstrução de interface proposto em seu trabalho, e localmente, principalmente nas extremidades da frente, há a formação de gotas, e duas estruturas na interface superior não presentes nos resultados de Jahanbakhsh, *et al.* (2007). A interface neste caso aparece mais complexa do que a geralmente é apresentada na literatura. Este efeito também ocorre quando se aplica o modelo de arrasto clássico com coeficiente de arrasto constante igual a 0,44. Mas, os resultados de forma geral apresentam boa concordância para as grandes estruturas.

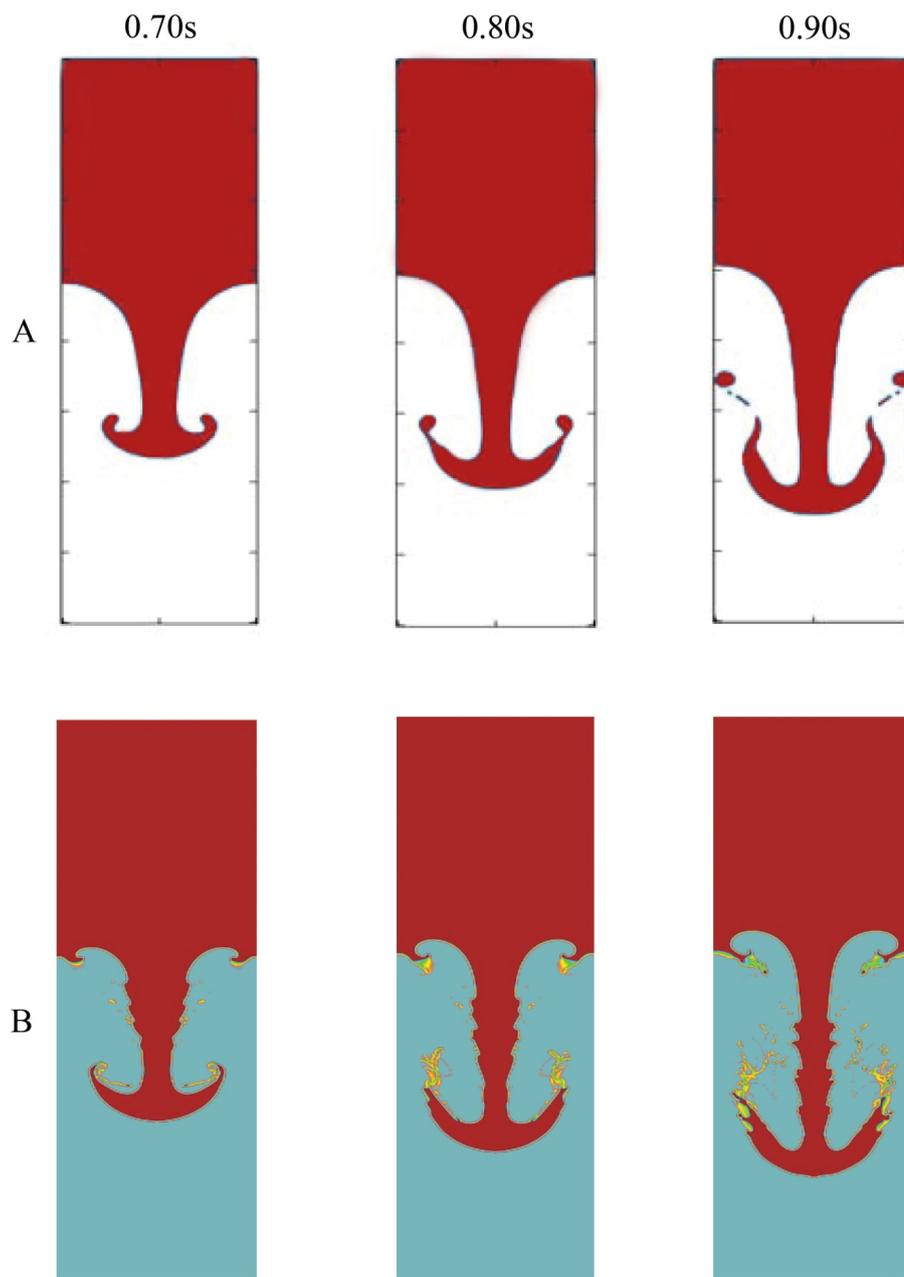


Figura 2 – Comparação dos campos de fração volumétrica. Em (A) os resultados obtidos por Jahanbakhsh *et al.* (2007), e em (B) os deste trabalho empregando o modelo tensorial.

3. QUEBRA DE BARREIRA

2.1. Setup

Talvez um dos mais conhecidos problemas de testes em códigos multifásicos, a quebra de barreira consiste em uma coluna de fluido em repouso e subitamente ela colapsa (Chung, 2013; Hirt e Nichols, 1981; Shakibaeinia e Jin, 2011). A Figura 3 apresenta o domínio de cálculo com $a = 0.05715$ m. Neste caso os fluidos são água ($\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$), e ar ($\rho = 1,00 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 2 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$). Há um aumento significativo nas razões de densidade (1000x) e de viscosidade (50x). Isto implica em gradientes mais acentuados de velocidade, densidade e maiores taxas de deformação.

Neste caso, e malhas foram empregadas: Tensor e Tensor ST (41 x 161 nós), Tensor ST ref2x (81 x 321 nós) e Tensor ST ref4x (161 x 641 nós); onde ST implica na ativação do termo de tensão superficial (Brackbill, *et al.*, 1992). O coeficiente de tensão superficial é considerado constante e igual a 0.071 N/m com ângulo de contato prescrito igual a 90° . Para a condição de abertura a pressão estática é fixada como sendo 0 Pa com fração volumétrica de ar igual a 1. O tempo físico é de 0,2 s com um passo de tempo de 0,0001 s, com um tempo de computação de aproximadamente 10 dias.

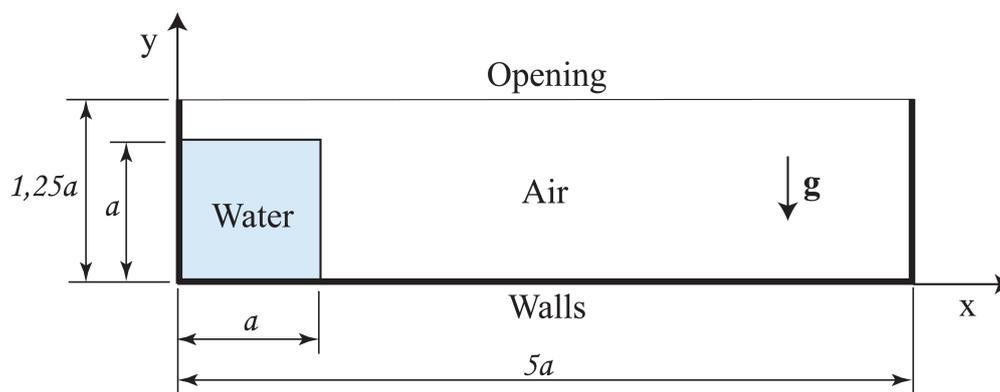


Figura 3 – Domínio de cálculo do rompimento de barreira com $a = 0.05715$ m.

2.1. Resultados e Discussão

As evoluções temporais da altura da coluna de líquido e da frente de avanço são apresentadas na Figura 4 e comparadas com os resultados experimentais de Martin e Moyce (1952) e com os resultados numéricos de Jahanbakhsh, *et al.* (2007). O refino de malha tende a aproximar as curvas dos pontos experimentais, todavia, é sabido que os pontos experimentais possuem uma certa defasagem causada pelo diafragma que sustenta a coluna até o seu rompimento (Chung, 2013; Hirt e Nichols, 1981; Lind, *et al.*, 2012; Park, *et al.*, 2012).

O caso mais refinado (Tensor ST ref4x) foi o que teve o melhor desempenho, e o emprego da tensão superficial se mostrou mais eficiente quanto à estabilidade numérica. Os resultados em geral tiveram boa comparação com os dados experimentais reproduzindo bem

o comportamento dinâmico do colapso da coluna de líquido.

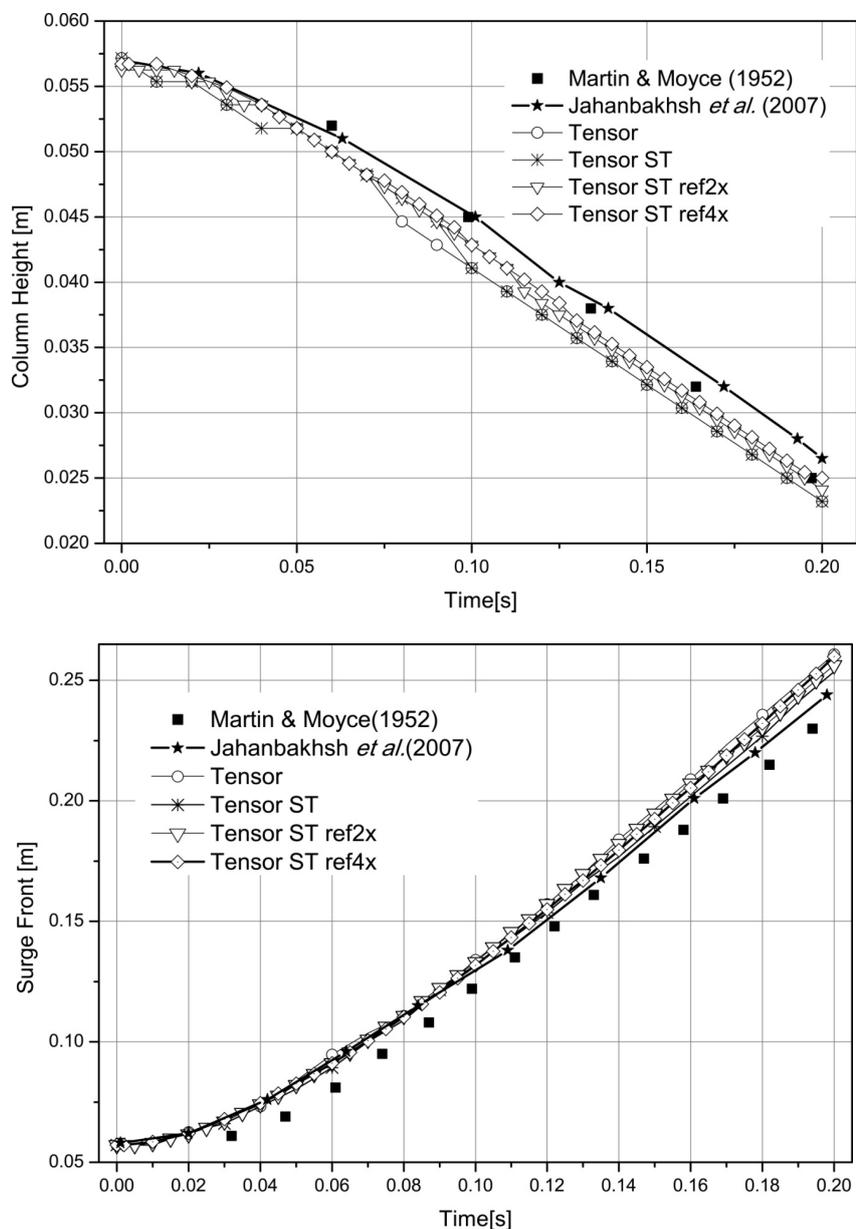


Figura 4 – Gráfico comparativo da evolução temporal da altura da coluna de líquido e da frente de avanço de líquido.

5. CONCLUSÕES

Uma abordagem para escoamentos estratificados foi proposta para o fechamento do termo de densidade de força interfacial no modelo de dois fluidos. O modelo emprega uma abordagem tensorial para descrever a transferência de quantidade de movimento.

Dois casos de teste escolhidos, instabilidade de Rayleigh-Taylor e rompimento de barreira, foram simulados e os resultados foram satisfatórios e com boa concordância com os dados disponíveis na literatura.

O modelo tensorial descreve bem a dinâmica dos problemas escolhidos como mudança de morfologia estratificada e dispersa, e ainda permite que se calcule dinamicamente o coeficiente de arrasto e o empregue na formulação clássica se esta abordagem for preferida.

A viabilidade do modelo em outras situações deve ainda ser estudada para se determinar mais nitidamente as limitações e as vantagens do modelo.

6. REFERÊNCIAS

- BARBOSA JR, J. R. *Turbulência em sistemas bifásicos gás-líquido*. Paper presented at the III Escola de Primavera de Transição e Turbulência, Florianópolis, 2002.
- BRACKBILL, J. U., *et al.*, A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, v. 100. (2), p. 335-354, 1992.
- CHUNG, M.-H., An adaptive Cartesian cut-cell/level-set method to simulate incompressible two-phase flows with embedded moving solid boundaries. *Computers & Fluids*, v. 71. (0), p. 469-486, 2013.
- DEENDARLIANTO, *et al.*, Application of a new drag coefficient model at CFD-simulations on free surface flows relevant for the nuclear reactor safety analysis. *Annals of Nuclear Energy*, v. 39. (1), p. 70-82, 2012.
- DREW, D., *et al.*, The analysis of virtual mass effects in two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 5. (4), p. 233-242, 1979.
- DREW, D. A., Mathematical flow modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 15. p. 261-291, 1983.
- _____. *Effect of particle velocity fluctuations on the inertia coupling in two-phase flow*. Paper presented at the Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows, Huntsville, Alabama, 1989.
- _____. Analytical modeling of multiphase flows. In R. T. Lahey (Ed.), *Boiling Heat Transfer: Modern Developments and Advances* (pp. 31 - 83). Amsterdam; New York: Elsevier Science Publishers, 1992.
- DREW, D. A., & PASSMAN, S. L. *Theory of multicomponent fluids*. New York: Springer, 1999.
- FOURNIER, E., *et al.*, 2D pseudo-spectral parallel Navier–Stokes simulations of compressible Rayleigh–Taylor instability. *Computers & Fluids*, v. 31. (4–7), p. 569-587, 2002.
- HÄNSCH, S., *et al.*, A multi-field two-fluid concept for transitions between different scales of interfacial structures. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 47. (0), p. 171-182, 2012.
- HE, X., *et al.*, A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability. *Journal of Computational Physics*, v. 152. (2), p. 642-663, 1999.

- HIRT, C. W., & NICHOLS, B. D., Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, v. 39. (1), p. 201-225, 1981.
- HÖHNE, T. *Experiments and Numerical Simulations of Horizontal Two-Phase Flow Regimes*. Paper presented at the Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, Melbourne, Australia, 2009.
- HÖHNE, T., & VALLÉE, C. *Numerical Prediction of Horizontal Stratified Flows*. Paper presented at the 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries - SINTEF/NTNU, Thondheim, Norway, 2008.
- _____, Experiments and numerical simulations of horizontal two-phase flow regimes using an interfacial area density model. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, v. 2. (3), p. 131-143, 2010.
- JAHANBAKHSI, E., *et al.*, Numerical simulation of three-dimensional interfacial flows. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, v. 17. (4), p. 384 - 404, 2007.
- LIND, S. J., *et al.*, Incompressible smoothed particle hydrodynamics for free-surface flows: A generalised diffusion-based algorithm for stability and validations for impulsive flows and propagating waves. *Journal of Computational Physics*, v. 231. (4), p. 1499-1523, 2012.
- MARTIN, J. C., & MOYCE, W. J., Part IV. An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, v. 244. (882), p. 312-324, 1952.
- MEHRAVARAN, M., & HANNANI, S. K., Simulation of incompressible two-phase flows with large density differences employing lattice Boltzmann and level set methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 198. (2), p. 223-233, 2008.
- PARK, I., *et al.*, Numerical investigation of the effects of turbulence intensity on dam-break flows. *Ocean Engineering*, v. 42. (0), p. 176-187, 2012.
- REZENDE, R. V. P. *Modelagem Matemática e Desenvolvimento de Metodologia Computacional para a simulação do Escoamento Bifásico de ar e Ferro-Gusa em Canal de Corrida de Alto-Forno*. Dissertação (Mestrado). Engenharia Mecânica, Universidade federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2008. xxx, 156 p.
- _____. *Modelo de Fechamento para o Tensor de Interface no Modelo de Dois Fluidos: Modelagem Matemática e Simulação*. Tese (Doutorado). Engenharia Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2014. 255 p.
- REZENDE, R. V. P., *et al.* *Modelo de Fechamento para Densidade de Força Interfacial do Modelo de Dois Fluidos sem Decomposição de Forças sobre a Interface*. Paper presented at the COBEQ 2012, Buzios, Rj, 2012, Setembro, 2012.
- SHAKIBAEINIA, A., & JIN, Y.-C., A mesh-free particle model for simulation of mobile-bed dam break. *Advances in Water Resources*, v. 34. (6), p. 794-807, 2011.