PROJETO

Edital MCT/CNPq N$\underline{o}$ 014/2008 Universal

Simulação Computacional da Fluidodinâmica de Escoamentos Multifásicos

---

Proponente	Dr. Alexandre M. Roma Instituto de Matemática e Estatística - USP Rua do Matão 1010 05580-090 São Paulo - SP
Modalidade	Projeto de Pesquisa / Faixa C
Duração	24 meses
Subáreas	Matemática Aplicada, Simulação Computacional, Análise Numérica

---

1 Resumo

No projeto de pesquisa ora proposto, objetiva-se dar continuidade à pesquisa e ao desenvolvimento de uma metodologia numérica *híbrida* de acompanhamento e de captura de interface (*front tracking, front capturing*) para simular computacionalmente de forma eficiente e detalhada escoamentos multifásicos complexos de fluidos imiscíveis. Tal metodologia emprega uma combinação de técnicas e de métodos variados destacando-se dentre eles os métodos de curva de nível (*level set*), de fronteira imersa (*immersed boundary*) e técnicas de refinamento adaptativo de malhas (*adaptive mesh refinement*) tanto da malha *euleriana*, utilizada na discretização das equações que modelam o escoamento dos fluidos, quanto da malha *lagrangiana*, utilizada na discretização das interfaces entre eles.

Ênfase será dada aos escoamentos bifásicos caracterizados pelo transporte e por interações de bolhas (ou de gotas) entre si e delas com o fluido ambiente ao redor. Via simulação computacional, o problema principal a ser abordado é o do entendimento da fluidodinâmica e dos fenômenos físicos fundamentais envolvidos na fragmentação e na coalescência da interface de separação entre as fases, na ação de surfactantes e na identificação das origens das forças de arrasto e de sustentação atuantes sobre as interfaces em movimento.

2 Introdução

Escoamentos multifásicos de fluidos imiscíveis ocorrem em abundância na natureza e na indústria. É possível citar escoamentos contendo misturas como o ar e gotas d'água na atmosfera, o ar e gotículas de gasolina em motores de combustão, a água e vapor d'água num reator nuclear, dentre muitos outros. Comum a todos os escoamentos multifásicos é a existência de interfaces de separação entre as fases cujas topologias freqüentemente se alteram quando as fases interagem entre si.

Excelentes exemplos ocorrem, em particular, na indústria petrolífera. A produção de óleo e de gás natural envolve rotineiramente o transporte de fluidos nas fases líquida e gasosa. São imprescindíveis estudos detalhados sobre a viabilização e eficiência desse transporte e sobre a otimização dos equipamentos e dos processos relacionados, não só por sua importância econômica como também por sua importância estratégica. Especialmente relevantes neste contexto são os escoamentos encontrados em torres de destilação, em reatores, em tubulações e em ambientes onde ocorre atomização.

O projeto de pesquisa aqui proposto pode fornecer ferramentas e subsídios para melhor compreender e prever a dinâmica de escoamentos bifásicos contendo bolhas ou gotas (suas interações, estimativas do arrasto e da sustenção, sua coalescência e fragmentação e ação de surfactantes), de escoamentos bifásicos em tubulações (sua estabilidade, estimativas da velocidade de deslisamento entre as fases e interação com as paredes) e de escoamentos bifásicos em dispositivos distribuidores de líquidos (e.g. formação de películas em torres de destilação).

Para modelar o transporte e analisar a dinâmica de interfaces fluido-fluido e fluido-sólido será utilizada uma metodologia híbrida baseada em métodos de captura (*front-capturing methods*) [1], de acompanhamento de interface (*front-tracking methods*) [2,3] e de representação de estruturas rígidas (e.g. via Modelo Físico Virtual [4] ou via conexão elástica entre pontos lagrangianos [24]). Para melhor representar a geometria do escoamento e estudar fenômenos fluidodinâmicos locais (e.g. interfaces, camadas limites, vórtices) serão empregadas técnicas de refinamento adaptativo de malhas [5].

A solução computacional de modelos matemáticos que descrevem a complexa interação entre as diversas fases demanda, via de regra, enormes esforços computacionais, nos quais busca-se sempre um compromisso entre a acurácia da solução numérica e a rapidez computacional. Os métodos numéricos são fortemente limitados quanto à velocidade de processamento e à capacidade de armazenamento dos computadores utilizados. É preciso buscar abordagens alternativas com o intuito de diminuir o custo computacional as quais, sem prejuízo da acurácia do resultado, possibilitem representar detalhes geométricos e capturar fenômenos locais importantes. Além disso, o uso de discretizações temporais sujeitas a condições brandas de estabilidade é bastante vantajoso. Nesse contexto e como será visto mais adinate, o uso conjugado de técnicas de refinamento adaptativo de malhas com discretizações temporais eficientes é uma alternativa atraente.

Por fim, tendo por base experiências adquiridas em anos recentes, pretende-se extender os códigos computacionais bidimensionais seqüenciais existentes e avançar em direção a implementações paralelas eficientes de tais metodologias para aplicações em três dimensões. O paradigma a ser adotado neste sentido baseia-se na programação utilizando as liguagens Fortran e C/C++ (aquela que for mais conveniente para uma dada tarefa), no uso de *softwares* e bibliotecas gratuitas que dêem suporte ao processamento paralelo (concorrente e distribuído), ao uso de malhas com refinamento localizado e à visualização dos resultados (e.g. SAMRAI[1] e VisIt[2], respectivamente). O equipamento adquirido comporá um aglomerado de computadores (*cluster*), objetivo este que será alcançado por intermédio do uso de aplicativos *midleware* desenvolvidos dentro do Projeto InteGrade[3] em curso no Departamento de Ciência da Computação, IME-USP.

3 Objetivos

Será dada continuidade às investigações de modelos matemáticos, de metodologias numéricas e de técnicas computacionais necessários à simulação computacional eficiente e detalhada de escoamentos bifásicos. Os pontos de partida serão os códigos computacionais desenvolvidos e a experiência acumulada adquirida na colaboração entre o Instituto de Matemática e Estatística da Universiade de São Paulo (IME-USP), a Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia (FEMEC-UFU) e o Departamento de Matemática da Universidade da Califórnia em Santa Bárbara (UCSB) (detalhes adiante).

Os códigos computacionais atuais empregam uma formulação matemática baseada em variáveis primitivas (velocidade e pressão) cuja discretização espacial é realizada em malhas cartesianas bloco-estruturadas contendo refinamento adaptativo para incrementar a acurácia da solução numérica em regiões do escoamento de especial interesse. Mais especificamente, as duas metas centrais são:

[1] https://computation.llnl.gov/casc/SAMRAI/
[2] https://wci.llnl.gov/codes/visit/home.html
[3] http://integrade.incubadora.fapesp.br/portal/relatorios/USP13042006/diff

(1) Extender o código computacional atual (bidimensional e seqüencial) de maneira a lhe conferir características que possibilitem o estudo da dinâmica de fragmentação de uma bolha e de coalescência entre duas bolhas, de interações de uma bolha com paredes próximas e de múltiplas bolhas entre si. Além disso, pretende-se extendê-lo de forma a permitir também a simulação computacional da ação de surfactantes.
(2) Iniciar o desenvolvimento de um código paralelo tridimensional, vencendo, uma por vez, as seguintes etapas: a resolução de equações de convecção-difusão, de equações elípticas e, então, prosseguir à resolução das equações de Navier-Stokes; a investigação e a implementação de estruturas de dados eficientes para armazenar triangularizações de interfaces tridimensionais empregando-as, posteriormente, para obter a normal exterior e a curvatura da interface necessárias aos cálculos de tensão superficial; a implementação de uma função indicadora de fluidos baseada em algoritmos de Geometria Computacional; a implementação de operações sobre a superfície triangularizada que permitam lidar com mudanças topológicas (durante fragmentação e coalescência).

Pretende-se comparar, quando possível, os resultados numéricos com resultados experimentais obtidos em laboratório e/ou com resultados encontrados na literatura. Além disso, pretende-se analisar de forma fina a dinâmica de escoamentos bifásicos em diversas situações de interesse prático como, por exemplo, o estudo de bolhas dispersas, o estudo de coeficientes de forças fluidodinâmicas (e.g. coeficiente de arrasto) e escoamentos bifásicos em tubulações.

4 Metodologia

As principais características da abordagem a ser empregada aqui são (4.1) a metodologia híbrida fornecida pela associação entre os métodos da Fronteira Imersa e da Curva de Nível na qual, diferentemente do convencional, a função curva de nível (função indicadora de fluidos) é obtida empregando-se técnicas de Geometria Computacional, (4.2) o cálculo da força de tensão superficial que adota uma abordagem euleriana-lagrangiana, (4.3) a equidistribuição dos pontos lagrangianos sobre a interface e (4.4) o refinamento adaptativo da malha euleriana. Tem também destaque especial (4.5) a discretização temporal robusta e altamente estável dada pelo Método de Gear (extrapolado) cujo passo de integração é variável. Cada um destes "ingredientes" será rapidamente descrito no que se segue.

Para explicar mais facilmente a abordagem a ser empregada, considere uma única interface separando dois fluidos incompressíveis imiscíveis com propriedades materiais constantes mas, possivelmente, diferentes, na presença de tensão superficial. A metodologia proposta tem por base uma formulação híbrida [6] na qual a interface, explicitamente representada e acompanhada ao longo do tempo, é a curva de nível zero de uma função ϕ (função indicadora). Escrevendo os pontos da interface como $\mathbf{X}(\alpha, t)$, onde α é o parâmetro lagrangiano, tem-se

$$\rho(\phi)[\mathbf{u}_t + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}] = \nabla\cdot[\mu(\phi)(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^{\dagger})] - \nabla p + \rho(\phi)\mathbf{g} + \mathbf{f}_{\sigma}, \tag{1}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0, \tag{2}$$

$$\mathbf{X}_t(\alpha, t) = \int_{\Omega}\mathbf{u}(\mathbf{x})\delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha, t))\,d\mathbf{x}, \tag{3}$$

onde $\phi > 0$ para um dos fluidos, $\phi < 0$ para o outro, e $\phi = 0$ sobre a interface de separação entre as fases. Aqui, $\mathbf{u}$, p, $\mathbf{g}$, e $\mathbf{f}_\sigma$ são a velocidade, a pressão, a aceleração gravitacional e a tensão superficial respectivamente. Oberserve que, em (3), δ_h é a aproximação introduzida por Peskin [2] para a distribuição delta de Dirac, $\delta_h(\mathbf{x}) = d_h(x)\,d_h(y)$ com

$$d_h(\xi) = \begin{cases} 0.5\,[1 + \cos(\frac{\pi}{h}\,\xi)]/h & \text{for } |\xi| \le h, \\ 0 & \text{for } |\xi| > h, \end{cases} \tag{4}$$

onde h é um parâmetro numérico dependente dos espaçamentos da malha euleriana Δx e Δy. Por conveniência, aqui, $h = 2\Delta x$ e assume-se que $\Delta x = \Delta y$. Tal escolha de d_h fornece boas propriedades de regularização numa vizinhança da interface e é motivada por um conjunto de condições de compatibiliade descritas por Peskin [2]. Outras possíveis discretizações podem ser encontradas em [7,8].

A função de curva de nível ϕ não é obtida resolvendo-se $\phi_t + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\phi = 0$ como se faz usualmente nos métodos de curva de nível. Ao invés, ela é calculada diretamente de forma local empregando-se um algoritmo eficiente de cálculo da função distância com sinal [9], oriundo em Geometria Computacional. Tal abordagem fornece ϕ, a distância com sinal de um ponto qualquer do domínio a uma representação linear por partes da interface, com a precisão de máquina, para todo o instante de tempo. Ela nunca se deteriora e, portanto, não requer as re-inicializações periódicas empregadas nos métodos de curva de nível. Detalhes sobre o cálculo de ϕ são fornecidos em [10].

Dada a função ϕ, as propriedades materiais são obtidas por

$$\rho(\phi) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)H_h(\phi), \tag{5}$$
$$\mu(\phi) = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)H_h(\phi), \tag{6}$$

onde ρ_1, ρ_2 e μ_1, μ_2 são as propriedades materiais (constantes) de cada uma das fases, respectivamente, e $H_h(\phi)$ é uma função de Heaviside suavizada

$$H_h(\xi) = \begin{cases} 0, \text{ for } \xi < -h \\ 0.5\,[1 + \xi/h + \sin(\frac{\pi}{h}\,\xi)/\pi], \text{ for } |\xi| \leq h \\ 1, \text{ for } \xi > h. \end{cases} \tag{7}$$

Note que para esta função de Heaviside tem-se

$$\frac{dH_h}{d\xi}(\xi) = d_h(\xi).$$

Em [6,10] a força de tensão superficial $\mathbf{f}_\sigma$ é calculada apenas a partir da representação lagrangiana da interface. Aqui, ao invés, opta-se pelo cálculo lagrangiano-euleriano proposto em [11] o qual reduz de maneira significativa as correntes espúrias oriundas do desequilíbrio entre o gradiente de pressão e a força interfacial.

4.2 Cálculo Lagrangiano-Euleriano da Força Interfacial

Tipicamente, em métodos da fronteira imersa emprega-se uma abordagem puramente lagrangiana para calcular a força interfacial $\mathbf{f}_{\rm L}$,

$$\mathbf{f}_{\rm L}(\mathbf{x}) = \int_\Gamma \frac{\partial}{\partial \alpha}(\sigma \hat{\mathbf{t}})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha))\, d\alpha, \tag{8}$$

onde σ é o coeficiente de tensão interfacial e $\hat{\mathbf{t}}$ é o versor tangente. Para tensão interfacial constante escreve-se (8) como

$$\mathbf{f}_{\rm L}(\mathbf{x}) = \sigma \int_\Gamma \kappa(\alpha)\hat{\mathbf{n}}(\alpha)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha))|\mathbf{X}_\alpha(\alpha)|\, d\alpha, \tag{9}$$

onde κ é a curvatura média. Note o fator adicional $|\mathbf{X}_\alpha(\alpha)|$ em (9) o qual leva em conta o fato de α ser uma parametrização qualquer e não especificamente dada pelo comprimento de arco (c.f. [12]). Por outro lado, a forma euleriana de se obter a força de tensão superficial é dada por

$$\mathbf{f}_{\rm E}(\mathbf{x}) = \sigma\kappa_{\rm E}(\mathbf{x})\nabla H_h(\phi(\mathbf{x})), \tag{10}$$

onde a curvatura κ_{E} é calculada de ϕ por

$$\kappa_{\text{E}} = -\nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}. \tag{11}$$

Seguindo [11], escreve-se

$$\mathbf{f}_{\text{L}}(\mathbf{x}) = \sigma \kappa_{\text{L}}(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{n}}_{\text{L}}(\mathbf{x}), \tag{12}$$

onde

$$\hat{\mathbf{n}}_{\text{L}}(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} \hat{\mathbf{n}}(\alpha) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha)) |\mathbf{X}_{\alpha}(\alpha)| \, d\alpha. \tag{13}$$

Assim, tem-se

$$\kappa_{\text{L}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sigma} \frac{\mathbf{f}_{\text{L}}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\text{L}}(\mathbf{x})}{\hat{\mathbf{n}}_{\text{L}}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\text{L}}(\mathbf{x})}. \tag{14}$$

Pode-se usar forma euleriana (10) para se obter a força

$$\mathbf{f}_{\text{H}}(\mathbf{x}) = \sigma \kappa_{\text{L}}(\mathbf{x}) \nabla H_h(\phi(\mathbf{x})) \tag{15}$$

e substituir em (1) $\mathbf{f}_{\sigma}$ por $\mathbf{f}_{\text{H}}$.

A metodologia numerica empregada no presente projeto de pesquisa é híbrida em dois aspectos diferentes e adaptativa de três maneiras diferentes. É híbrida porque explora primeiro qualidades de ambos os métodos, o da Fronteira Imersa e o da Curva de Nível, e segundo porque a força interfacial é calculada, como explicado anteriormente, usando uma abordagem mista euleriana-lagrangiana.

Adaptatividade é introduzida no espaço e no tempo. No espaço, por intermédio do controle dinâmico da posição dos pontos lagrangianos (equidistribuição lagrangiana) e de refinamentos adaptativos da malha euleriana, os quais incrementam localmente a acurácia da malha onde as equações do escoamento são resolvidas. No tempo, por intermédio de um esquema numérico de segunda ordem adaptativo, robusto e semi-implícito.

4.3 Equidistribuição Lagrangiana

É um fato notório que métodos de acompanhamento de fronteira quando empregados em escoamentos multifásicos sofrem de rigidez (*stiffness*) [13–15]. As derivadas parciais envolvidas no cálculo da força de tensão superficial e a aglomeração excessiva dos pontos lagrangianos, típicos nestes problemas interfaciais, levam a passos temporais proibitivamente pequenos quando se utilizam métodos explícitos.

Uma maneira efetiva de se remediar esta situação é preservando-se a distribuição uniforme dos pontos lagrangianos por intermédio de reparametrizações da interface [16,14,17]) evitando-se dessa forma a sua aglomeração excessiva.

Aqui, para superar as dificuldades mencionadas associadas ao acompanhamento lagrangiano da fronteira e à restrição da estabilidade numérica devida à tensão superficial, seguindo os passos bem sucedidos de [16], emprega-se o acompanhamento adaptativo da interface na forma de equidistribuição. Com base em [14], modifica-se (3) para

$$\mathbf{X}_t(\alpha, t) = \int_\Omega \mathbf{u}(\mathbf{x})\delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha, t))\, d\mathbf{x} + U_A(\alpha, t)\,\hat{\mathbf{t}}, \tag{16}$$

onde $U_A(\alpha, t)$ é escolhido de forma a determinar uma parametrização conveniente para se descrever a interface. Por exemplo, U_A pode ser determinado para se aglomerar de maneira controlada os pontos lagrangianos em regiões de alta curvatura [17] ou para se mantê-los equidistribuídos [14,16]. Se o pontos estão distribuídos uniformemente inicialmente, não é difícil mostrar que

$$U_A(\alpha, t) = -U_T(\alpha, t) + \int_0^\alpha (s_\alpha \kappa U_N - < s_\alpha \kappa U_N >)\, d\alpha', \tag{17}$$

os mantêm uniformemente distribuídos sempre, onde $U_T = \hat{\mathbf{t}} \cdot \int \mathbf{u}(\mathbf{x})\delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha, t))\, d\mathbf{x}$, $U_N = \hat{\mathbf{n}} \cdot \int \mathbf{u}(\mathbf{x})\delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha, t))\, d\mathbf{x}$, $s_\alpha = \sqrt{X_\alpha^2 + Y_\alpha^2}$ é a métrica de comprimento de arco, κ é a curvatura média e $< \cdot >$ representa a média espacial.

4.4 Refinamento Adaptativo da Malha Euleriana

A presença da interface entre os fluidos sobre a qual age uma força singular resulta em gradientes elevados localizados em sua vizinhança. Além disso, a tensão superficial pode induzir a produção de vórtices concentrados localizados e outros fenômenos de escala pequena cuja captura adequada, freqüentemente, demanda enorme esforço computacional e torna proibitivo o uso de malhas de integração uniformes. Este problema pode ser contornado com o uso criterioso de técnicas de refinamento adaptativo da malha espacial.

Empregando a versão adaptativa do Método da Fronteira Imersa introduzida por Roma *et al.* [18], emprega-se a estrutura hierárquica de malhas proposta por Berger e Colella [19]. Regiões do escoamento que apresentam interesse especial são recobertas por uma coleção de malhas bloco-estruturadas, definidas hierarquicamente numa seqüência de níveis de refinamento aninhados, progressivamente mais finos (*malhas compostas*). Cada nível de refinamento é formado por uma coleção disjunta de malhas (cartesianas) retangulares cuja razão de refinamento é constante e igual a dois entre dois níveis sucessivos. *Células fantasmas* são utilizadas ao redor de cada malha, em todos os níveis, e sob as regiões refinadas para (formalmente) evitar que os operadores de diferença devam ser redefinidos perto dos bordos das malhas e no interior de regiões recobertas por níveis mais finos de refinamento. Valores nestas células são obtidos por interpolação e não por intermédio da solução das equações que modelam o problema. A descrição detalhada de malhas compostas e sua geração são encontradas em [19,20]. Neste trabalho, regiões próximas à interface, com alta vorticidade ou gradientes de propriedade são alvo do refinamento adaptativo

4.5 Discretização temporal

Emprega-se um método de projeção de incremento de pressão inovador, capaz de lidar com propriedades materiais variáveis baseado numa variação adaptativa do Método de Gear extrapolado de segunda ordem. Inspirando-se em [21,22], reescreve-se a equação do momento

$$\rho[\mathbf{u}_t + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}] = \nabla\cdot[\mu(\nabla\mathbf{u}+\nabla\mathbf{u}^\dagger)] - \nabla p + \rho\mathbf{g} + \mathbf{f}_{\text{H}} \tag{18}$$

como

$$\mathbf{u}_t = \lambda\frac{\nabla^2\mathbf{u}}{\rho} - \frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{g} + \frac{\mathbf{f}}{\rho}, \tag{19}$$

onde $\mathbf{f} = \nabla\cdot\mu(\nabla\mathbf{u}+\nabla\mathbf{u}^\dagger) - \lambda\nabla^2\mathbf{u} - \rho(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} + \mathbf{f}_{\text{H}}$. Para discretizar no tempo, trata-se de forma implícita todos os termos do lado direito de (19) exceto $\mathbf{f}$ o qual é extrapolado no tempo. O resultado, junto com a condição de incompressibilidade, expressa o acoplamento entre a pressão e a velocidade a qual pode ser traduzido no conjunto de equações dado por

$$\frac{\alpha_2\mathbf{u}^{n+1}+\alpha_1\mathbf{u}^n+\alpha_0\mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} = \lambda\frac{\nabla^2\mathbf{u}^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{n+1}} + \mathbf{g} + \frac{\beta_1\mathbf{f}^n+\beta_0\mathbf{f}^{n-1}}{\rho^{n+1}}, \tag{20}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u}^{n+1} = 0, \tag{21}$$

onde $\alpha_0 = \Delta t^2/(\Delta t_0\Delta t_1)$, $\alpha_1 = -\Delta t_1/\Delta t_0$, e $\alpha_2 = (\Delta t_0 + 2\Delta t)/\Delta t_1$, $\beta_0 = -\Delta t/\Delta t_0$ e $\beta_1 = \Delta t_1/\Delta t_0$, com $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, $\Delta t_0 = t^n - t^{n-1}$, e $\Delta t_1 = \Delta t_0 + \Delta t$.

Para lidar o acoplamento entre a pressão e a velocidade dado por (20) e (21), empregа-se o método de projeção

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} = \lambda \frac{\nabla^2 \mathbf{u}^*}{\rho^{n+1,0}} - \frac{\nabla p^{n+1,0}}{\rho^{n+1,0}} + \mathbf{g} + \frac{\beta_1 \mathbf{f}^n + \beta_0 \mathbf{f}^{n-1}}{\rho^{n+1,0}}\,, \qquad (22)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{\nabla q}{\rho^{n+1,0}}\,, \qquad (23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \qquad (24)$$

onde $p^{n+1,0}$ e $\rho^{n+1,0}$ são aproximações conhecidas para a pressão e para massa específica no instante $t = t^{n+1}$, respectivamente. Uma vez que a *velocidade provisória* $\mathbf{u}^*$ foi calculada de (22) impondo-se $\mathbf{u}^* \doteq \mathbf{u}^{n+1}$ no contorno, ela é *projetada* no espaço vetorial dos campos com divergente zero. Isto é realizado resolvendo-se a equação de Poisson para q definida por (23) e (24) adotando-se condições de contorno homogêneas de Neumann $\partial q/\partial \mathbf{n} = 0$, onde $\mathbf{n}$ é o versor normal exterior ao contorno do domínio. A nova velocidade é então dada por

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{\nabla q}{\rho^{n+1,0}}. \qquad (25)$$

Substituindo (23) e (22) e subtraindo-se o resultado de (20), após rearranjar os termos, obtém-se a atualização para a pressão dada por

$$\begin{aligned}\nabla p^{n+1} = {} & \nabla p^{n+1,0} + \nabla q - \lambda \frac{\Delta t}{\alpha_2} \nabla^2 \frac{\nabla q}{\rho^{n+1,0}} \\ & + (\rho^{n+1} - \rho^{n+1,0}) \Big(\mathbf{g} - \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} \Big). \end{aligned} \qquad (26)$$

A exemplo de outros métodos de projeção, toma-se para a pressão a aproximação de primeira ordem no tempo $p^{n+1,0} \doteq p^n$. Com relação à escolha de $\rho^{n+1,0}$, experimentos numéricos sugerem que a aproximação de primeira ordem dada por $\rho^{n+1,0} \doteq \rho^n = \rho(\phi^n)$ é suficiente para fornecer a velocidade com segunda ordem no tempo. Neste contexto, desprezando termos de ordem $\mathrm{O}(\Delta t)$, obtém-se a expressão para atualização da pressão

$$p^{n+1} = p^n + q, \qquad (27)$$

da qual se vê que q pode ser interpretado como o *incremento de pressão*.

Para integrar no tempo a posição da interface, também se usa o Método de Gear extrapolado

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{X}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{X}^n + \alpha_0 \mathbf{X}^{n-1}}{\Delta t} = \beta_1 \mathbf{U}^n + \beta_0 \mathbf{U}^{n-1}, \qquad (28)$$

com $\mathbf{U}^k$, $k = n, n-1$, a velocidade modificada

$$\mathbf{U}^k \doteq \int \mathbf{u}^k \delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}^k)\, d\mathbf{x} \;+ U_A^k\, \hat{\mathbf{t}}^k, \tag{29}$$

onde U_A é a velocidade tangencial (17) especificamente escolhida para controlar a uniformidade da distribuição dos pontos lagrangianos sobre a interface e $\hat{\mathbf{t}}$ é o vetor tangente

$$\hat{\mathbf{t}} = \frac{\partial \mathbf{X}/\partial \alpha}{\|\partial \mathbf{X}/\partial \alpha\|}. \tag{30}$$

Um passo no tempo típico é concluído após a atualização da função indicadora de fluidos $\phi^{n+1} \doteq \phi(\mathbf{X}^{n+1})$. Para isto, emprega-se o procedimento baseado em técnicas de Geometria Computacional. Este passo é seguido das atualizações $\rho^{n+1} = \rho_1 \;+ (\rho_2 - \rho_1) H_h(\phi^{n+1})$ e $\mu^{n+1} = \mu_1 \;+ (\mu_2 - \mu_1) H_h(\phi^{n+1})$, onde H_h é dado por (7).

4.6 Resumo do Esquema Numérico

Para descrever um passo de integração típico no tempo, por simplicidade, omite-se os índices espaciais i, j. De valores dados para p^n, a pressão no instante $t = t^n$, para $\mathbf{X}^k$ e para $\mathbf{u}^k$, $k = n, n-1$, a posição da interface e a velocidade nos instantes $t = t^n$ e $t = t^{n-1}$, atualiza-se a pressão, a velocidade e a posição da interface resolvendo-se as equações

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} = \lambda \frac{L\mathbf{u}^*}{\rho^n} - \frac{Gp^n}{\rho^n} + \mathbf{g} + \frac{\beta_1 \mathbf{f}^n + \beta_0 \mathbf{f}^{n-1}}{\rho^n} \tag{31}$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{Gq}{\rho^n} \tag{32}$$

$$D \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \tag{33}$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{Gq}{\rho^n} \tag{34}$$

$$p^{n+1} = p^n + q \tag{35}$$

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{X}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{X}^n + \alpha_0 \mathbf{X}^{n-1}}{\Delta t} = \beta_1 \mathbf{U}^n + \beta_0 \mathbf{U}^{n-1}, \tag{36}$$

$$\phi^{n+1} \doteq \phi(\mathbf{X}^{n+1}), \tag{37}$$

onde L, G e D são as discretizações espaciais por diferenças finitas de segunda ordem para o laplaciano, gradiente e divergente, respectivamente, e os parâmetros α_i, $i = 2, 1, 0$, e β_j, $j = 1, 0$, são dados por (20).

O termo forçante $\mathbf{f}$ em (31) é uma aproximação de segunda ordem do termo em (19). A velocidade modificada dada por $\mathbf{U}^k$, $k = n, n-1$, é dada por

$$\mathbf{U}^k = h^2 \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^k \delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}^k) + U_A^k \hat{\mathbf{t}}^k, \tag{38}$$

e a função indicadora é calculada pelo procedimento geométrica em $t = t^{n+1}$, ϕ^{n+1}. As propriedade materiais são dadas por $\rho^{n+1} = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)\, H_\epsilon(\phi^{n+1})$ e $\mu^{n+1} = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)\, H_\epsilon(\phi^{n+1})$, onde H_ϵ é dado por (7). Outros detalhes podem ser obtidos em [23].

5 Principais Contribuições Esperadas

Espera-se contribuir com este trabalho não só para o desenvolvimento de modelos matemáticos e de ferramentas computacionais dedicadas a aplicações dos tipos anteriormente mencionadas como também, e não menos importante, formar a médio prazo pessoal qualificado com competência na área de Dinâmica de Fluidos Computacional.

De forma mais específica, espera-se contribuir com o avanço no desenvolvimento e na pesquisa em:

(1) Escoamentos incompressíveis bifásicos de fluidos imiscíveis.
(2) Previsão temporal da dinâmica de bolhas dispersas: sua distribuição espacial, sua geometria, o efeito da ação de surfactantes e sua fragmentação/coalescência.
(3) Incorporação e aprimoramento de modelos de interface representadas por suas forças de atuação.
(4) Aprimoramento dos modelos e métodos numéricos para simular a fluidodinâmica das interações gás-líquido, líquido-líquido e líquido-sólido.
(5) Determinação de modelos adequados de arraste, turbulência e de outras interações entre as fases e os efeitos da geometria.
(6) Escoamentos bifásicos em tubulações.
(7) Formação e estabilidade de películas.
(8) Composição de ferramentas eficientes para simulação computacional desenvolvidas em linguagem C/C++ e empregando processamento paralelo, visando a extensas simulações de futuras aplicações em dinâmica de fluidos.

6 Orçamento Detalhado

O projeto de pesquisa ora proposto se enquadra na Faixa C de financiamento com um investimento estimado de R$ 61.704,05 (sessenta e um mil, setecentos e quatro reais e cinco centavos), de acordo com a planilha em anexo. Deste montante, mais de 75% será destinado para componentes de hardware, equipamentos e serviços de informática. O restante será destinado para transporte (aéreo e terrestre) e diárias para viabilizar o intercâmbio entre participantes e colaboradores.

A área de Dinâmica de Fluidos Computacional é notória e reconhecida por sua alta demanda por recursos computacionais. A experiência acumulada (e.g. Projeto FAPESP # 04/13781-1 concluído em março de 2008) sugere que para trabalhar com eficiência e ter um bom rendimento é necessário bons equipamentos, parte deles dedicados ao desenvolvimento e parte deles dedicado exclusivamente aos testes e aplicações mais exigentes.

Felizmente, o custo deste tipo de equipamento tem diminuido vertiginosamente e é possível, hoje em dia, se ter um bom microcomputador para uso em fins científicos por menos de R$ 5.000,00 (cinco mil reais). Microcomputadores Intel Core 2 QUAD, 2.4 GHz, com 8 GB de memória RAM (*hardware* completo especificado na planilha em anexo) suprirão de forma adequada a demanda para o desenvolvimento, inclusive prevendo o engajamento provável (e esperado) de novos participantes (alunos de graduação e pós-graduação). Recursos suplementares para a aquisição de computadores dedicados às aplicações mais exigentes serão buscados em outras fontes de financiamento. Além dos microcomputadores, itens importantes para a infraestrutura de trabalho são os *no-breaks* e uma impressora multifuncional.

Estão previstas duas viagens internacionais a trabalho para permitir discussões com colaboradores. Além disso, há duas viagens a trabalho nacionais (meio de transporte terrestre) com o mesmo fim.

Um total de 35 diárias foram incluídas para permitir fornecer algum auxílio aos participantes e colaboradores em trânsito pelo País.

7 Cronograma

Com relação às metas listadas na Seção 3, planeja-se cumprir o cronograma

semestre	1	2	3	4
metas	1	1, 2	1, 2	2

8 Participantes

8.1 Pesquisadores

Participarão como pesquisadores Dr. Alexandre M. Roma, coordenador, e Dra. Millena Martins Villar, pos-doutoranda, ambos do IME-USP.

8.2 Alunos

Participarão as alunas Catalina Maria Rua Alvarez e Priscila Cardoso Calegari, ambas alunas de doutorado no programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada do IME-USP. Além disso, participarão os alunos de Iniciação Científica Felipe Nunes Franco, Leonardo Formaggio, Thiago Pinheiro de Macedo e Thiago Henrique M. da Cruz.

Prevê-se o engajamento de outros alunos de graduação e de pós-graduação ao longo da execução do projeto.

9 Colaborações e Parcerias

Abordagens híbridas em Dinâmica de Fluidos Computacional visando ao estudo de escoamentos multifásicos (podendo, eventualmente, inclusive envolver interações entre o fluido multifásico e estruturas, rígidas ou não, nele imersas) têm progressivamente recebido atenção crescente da comunidade científica na área e têm, em particular, sido o objeto nos últimos anos de uma colaboração intensa entre o Instituto de Matemática e Estatística da Universiade de São Paulo (IME-USP), a Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia (FEMEC-UFU) e o Departamento de Matemática da Universidade da Califórnia em Santa Bárbara (UCSB). No âmbito nacional, colaborarão Dr. Aristeu da Silveira-Neto e o aluno de doutorado Rafael Sene de Lima, FEMEC-UFU. No âmbito internacional, colaborarão Dr. Hector Daniel Ceniceros e o aluno de doutorado Jordan Fisher, UCSB.

A colaboração entre o IME-USP e o Laboratório de Transferência de Calor e Massa - LTCM / FEMEC-UFU vem de longa data. Num trabalho de quase dez anos, várias atividades têm sido desenvolvidas em conjunto nas áreas de ensino, pesquisa e extensão, consoantes com os objetivos do presente projeto de pesquisa. Três teses de doutorado já foram orientadas em conjunto com o Professor Dr. Aristeu da Silveira-Neto em temas envolvendo interação fluido-estrutura e escoamentos bifásicos.

A colaboração entre o IME-USP e o Departamento de Matemática da Universidade da Califórnia em Santa Bárbara se iniciou há cerca de sete anos e têm efetivamente produzido resultados de pesquisa conjunta há cerca de cinco anos. Tem havido um intercâmbio intenso com o Professor Dr. Hector D. Ceniceros e visitas periódicas têm ocorrido de ambos os lados e alunos de doutorado orientados em parceria (Dr. Rudimar Luiz Nós, IME-USP 2007, e em andamento Jordan Fisher, UCSB).

Recentemente, afortunadamente, as três instituições juntaram forças na área de modelagem matemática e de simulação computacional de escoamentos bifásicos [23].

10 Infraestrutura

O IME-USP dispõe de espaço físico e instalações apropriadas à execução do projeto. O Laboratório do Departamento de Matemática Aplicada poderá abrigar com facilidade os novos equipamentos.

11 Conclusão

Dentre as dificuldades que se enfrenta neste instante para continuar promovendo a pesquisa e o desenvolvimento das metodologias centrais desta linha de pesquisa, encontra-se a escassez de equipamentos adequados para atender à demanda "voraz" por recursos computacionais, característica típica dessa área de trabalho. Tem sido até aqui um desafio constante à imaginação a tarefa de distribuir entre os participantes (sempre em número crescente) o uso dos equipamentos disponíveis. Cada vez mais é difícil decidir qual tarefa é mais importante e escolher, num dado momento, o que deve ser processado e o que deve aguardar na fila, num universo imenso de testes e validações que chegam a durar semanas, às vezes meses. A indisponibilidade de equipamentos, *softwares* e sua manutenção são os "gargalos" que, com o presente projeto, prentende-se resolver a curto e médio prazo.

Prevê-se a solicitação de recursos financeiros suplementares à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) e mesmo à Petrobras para adquirir equipamentos adicionais para aplicações mais exigentes, *softwares* e licensas, para promover encontros e oficinas de trabalho e, muito importante, para suprir bolsas aos estudantes.

O projeto de pesquisa ora proposto não recebe no momento nenhum tipo de financiamento, de nenhuma fonte, sendo o recurso aqui solicitado destinado exclusivamente à aquisição de componentes, equipamentos, ao transporte e ao pagamento de diárias para viabilizar intercâmbio entre os participantes. Esta pesquisa teve seu último financiamento vindo da FAPESP (FAPESP # 04/13781-1), encerrado em Mar ço de 2008.

Professor Dr. Alexandre M. Roma São Paulo, 05/08/2008.

Referências

[1] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, S. Osher, An improved level set method for incompressible two-phase flows, Computers & Fluids 27 (5-6) (1998) 663–680.

[2] C. S. Peskin, Numerical analysis of blood flow in the heart, J. Comput. Phys 25 (1977) 220–252.

[3] C. S. Peskin, The immersed boundary method, Acta Numerica (2002) 477–517.

[4] A.L.F. Lima e Silva, A. Silveira-Neto, J. Damasceno, Numerical simulation of two-dimensional flows over a circular cylinder using the immersed boundary method, J. CoÄmput. Phys. 189 (2003) 351–370.

[5] M. J. Berger, P. Colella, Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics, J. Comput. Phys. 82 (1989) 64–84.

[6] H. D. Ceniceros, The effect of surfactants on the formation and evolution of capillary waves, Phys. Fluids 15 (1) (2003) 245–256.

[7] Arthurs, K.M.; Moore, L.C.; Peskin, C.S.; Pitman, E.B. & Layton, H.E., Modeling arteriolar flow and mass transport using the immersed boundary method, J. CoÄmput. Phys. 147 (1998) 402–440.

[8] Roma, A.M.; Peskin, C.S.; Berger, M.J., An adaptive version of the immersed boundary method, J. CoÄmput. Phys. 153 (1999) 509–534.

[9] Mauch, S., Efficient algorithms for solving static Hamilton-Jacobi equations, Ph.D. thesis, California Institute of Technology (2003).

[10] H. D. Ceniceros, A. M. Roma, A multi-phase flow method with a fast, geometry-based fluid indicator, J. Comput. Phys. 205 (2005) 391–400.

[11] S. Shin, S. Abdel-Khalik, V. Daru, D. Juric, Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method, J. Comput. Phys. 203 (2005) 493–516.

[12] Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman, S. Osher, A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows, J. Comput. Phys. 124 (1996) 449–464.

[13] A. A. Mayo, C. S. Peskin, An implicit numerical method for fluid dynamics problems with immersed elastic boundaries, in: A. Y. Cheer, C. P. V. Dam (Eds.), Fluid Dynamics in Biology: Proceedings of the AMS-IMS-SIAM Joint Summer Research Conference on Biofluiddynamics, American Mathematical Society, 1993, pp. 261–277.

[14] T. Y. Hou, J. S. Lowengrub, M. J. Shelley, Removing the stiffness from interfacial flows with surface tension, J. CoÄmput. Phys. 114 (1994) 312–338.

[15] J. M. Stockie, B. R. Wetton, Analysis of stiffness in the immersed boundary method and implications for time-stepping schemes, J. Comput. Phys. 154 (1999) 41–64.

[16] H. D. Ceniceros, A. M. Roma, Study of long-time dynamics of a viscous vortex sheet with a fully adaptive non-stiff method, Phys. Fluids 16 (2004) 4285–4318.

[17] T. Y. Hou, J. S. Lowengrub, M. J. Shelley, The long-time motion of vortex sheets with surface tension, Phys. Fluids 9 (7) (1997) 1933–1954.

[18] A. M. Roma, C. S. Peskin, M. J. Berger, An adaptive version of the immersed boundary method, J. Comput. Phys. 153 (1999) 509–534.

[19] Berger, M.J. & Colella, P., Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics, J. CoÄmput. Phys. 82 (1989) 64–84.

[20] M. J. Berger and I. Rigoutsos, An algorithm for point clustering and grid generation, IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics 21 (5) (1991) 1278–1286.

[21] V. E. Badalassi, H. D. Ceniceros, S. Banerjee, Computation of multiphase systems with phase field models, J. Comput. Phys. 190 (2003) 371–397.

[22] H. D. Ceniceros, A. M. Roma, A nonstiff, adaptive mesh refinement-based method for the Cahn-Hilliard equation, J. Comput. Phys. 225 (2007) 1849–1862.

[23] H. D. Ceniceros, A. M. Roma, A. Silveira-Neto and M. M. Villar, A robust, fully adaptive hybrid level-set/front-tracking method for two-phase flows with an accurate surface tension computation, Preprint, Submetido ao J. Comp. Phys., 2008 (disponível em www.ime.usp.br/∼ roma).

[24] H.D. Ceniceros, J. Fisher, and A. M. Roma. On the efficient solution of robust semi-implicit discretizations for the Immersed Boundary Method. Preprint, 2008.

item	descrição	marca	modelo	preço unitário	quantidade	total do item	
Monitor de vídeo	Monitor LCD 19"	LG	W1952T	560.00	8	4,480.00	
No Break	No Break 1500VA 120V	apc	SC1500	1035.00	8	8,280.00	
Processador	Intel Core2 Quad Q6600, 2.4GHz, FSB 1066MHz, 8MB L2 Cache - BOX	INTEL	BX80562Q6600	850.00	8	6,800.00	
Módulo de memória	Platinum Edition Vista Performance 4GB (2048MB x 2) DDR2 800MHz PC2-6400 Kit	OCZ	OCZ2P8004GK	450.00	16	7,200.00	
Placa-mãe	Chipset NFORCE 650i SLi	ABIT	ABIT IN9 32X-MAX Wi-Fi	900.00	8	7,200.00	
Gabinete, teclado e mouse	Gabinete de aço com chave, teclado ABNT2 e mouse óptico			450.00	8	3,600.00	
Unidade ótica	Leitor/Gravador CD/DVD +-RW IDE interno	PIONEER	DVR-112DBK	135.00	8	1,080.00	
Placa de vídeo	Placa Video 512 MB PCI Express GF7200GS	XFX	GF7200GS	125.00	8	1,000.00	
Fonte de alimentação	Fonte de alimentação ATX V2.2 (500W reais)	SEVENTEAM	ST-500P-CG	195.00	8	1,560.00	
Ventiladores	Ventiladores silenciosos de 92 mm e de 120mm			50.00	8	400.00	
Disco rígido	Barracuda 160GB 7200rpm SATA II NCQ 8MB Buffer	SEAGATE	ST3160811AS	220.00	8	1,760.00	
Serviços de terceiros	Integração de hardware, instalação de softwares e manutenção			500.00	8	4,000.00	
total por computador				**5,470.00**		**47,360.00**	
Impressora multifuncional	Impressora laser, copiadora e digitalizadora	SAMSUNG	SCX-4200	450.00	1	450.00	
total de equipamentos						**47,810.00**	**77.48%**
Transporte aéreo internacional	Ida e volta entre Los Angeles, Califórnia , e São Paulo-SP			3,500.00	2	7,000.00	
Transporte terrestre nacional	Ida e volta entre Uberlândia-MG e São Paulo-SP			160.00	2	320.00	
Diárias	Hospedagem e alimentação para colaboradores/participantes			187.83	35	6,574.05	
TOTAL						**61,704.05**	

Material bibliográfico	Não há.	-
Custeio	Componentes de hardware: placa-mãe, processador, memória, etc.	34,600.00
Diárias	35 diárias	6,574.05
Passagens	Transporte aéreo e terrestre	7,320.00
Equipamentos	Monitores, no-break e impressora multifuncional	13,210.00
		61,704.05