#### Universidade Federal do Rio de Janeiro

# Análise de Vazamento de Óleo e Gás em Águas Marítimas: um Estudo com Fluidodinâmica Computacional

Marcus Vinícius Salles Falção

Rio de Janeiro

Setembro de 2016

ANÁLISE DE VAZAMENTO DE ÓLEO E GÁS EM ÁGUAS MARÍTIMAS: UM ESTUDO COM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

#### MARCUS VINÍCIUS SALLES FALCÃO

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS DA ESCOLA DE QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO, COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS.

Aprovado por:	
	Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.
	Jovani Luiz Favero, D.Sc.
	João Felipe Mitre de Araujo, D.Sc.
Orientado por:	
	Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.
	Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Setembro de 2016

### FICHA CATALOGRÁFICA

Falcão, Marcus Vinícius Salles.

Análise de Vazamento de Óleo e Gás em Águas Marítimas: Um Estudo com Fluidodinâmica Computacional. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2016

ix, 114 f.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2016.

Orientador(es): Ricardo de Andrade Medronho e Tânia Suaiden Klein.

1. CFD. 2. Vazamentos. 3. Óleo. 4. Gás – Teses. I. Medronho, Ricardo de Andrade (Orient.). II. Klein, Tânia Suaiden (Orient.). III. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química. IV. Título.

À minha família, amigos e a todos que estiveram comigo presentes me dando apoio e força nos momentos difíceis.
iii
111

fracassar imensamente podem alcançar a grandeza."	"Somente aqueles que ousam t
Robert F. Kennedy	a carres aqueses que ousum s

#### **AGRADECIMENTOS**

Agradeço enormemente a minha família pelo grande apoio e carinho que é me dado desde sempre. Penso que sem eles não seria capaz de conseguir chegar aonde estou. A meu pai pela força e sabedoria de sempre; a minha mãe pelo carinho e compreensão sempre; a minha irmã pela grande ajuda, brincadeiras e amor em todos os momentos; a minha namorada, meu amor, e que sempre me deu grande suporte; a Dedé, minha segunda mãe, e que sempre esteve do meu lado; ao Tchocou, meu grande amigo canino, por todo o carinho de sempre, e aos meus primos, que são como irmãos para mim. Obrigado a todos eles que são meus maiores tesouros na vida.

A meus orientadores, professora Tânia e professor Medronho, a meus colegas de faculdade, do LABCFD por todo o apoio e ajuda.

Resumo da Dissertação apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

# ANÁLISE DE VAZAMENTO DE ÓLEO E GÁS EM ÁGUAS MARÍTIMAS: UM ESTUDO COM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Marcus Vinícius Salles Falcão Setembro, 2016

Orientadores: Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph. D. Prof<sup>a</sup>. Tânia Suaiden Klein, Ph. D.

A preocupação com o meio ambiente e a necessidade de suprir a crescente demanda energética da sociedade humana levam a estudos que visam manter o equilíbrio entre a exploração de fontes energéticas naturais e a preservação da vida e dos ecossistemas. O presente trabalho trata da simulação com fluidodinâmica computacional (CFD) de vazamento de óleo e gás, com o programa ANSYS CFX versão 16.0. As malhas utilizadas nas simulações foram construídas com programa ANSYS ICEM, versão 16.0. Neste estudo, foram construídos dois domínios, um deles representando um tanque com água por onde óleo vaza a partir de um pequeno orifício e o outro representando uma seção marinha com 100 m de profundidade onde óleo e gás escoam a partir de um pequeno orifício. Inicialmente, para o domínio do tanque de água, testaram-se diferentes modelagens visando à reprodução de um experimento real. Após um teste de malha que garantiu não haver interferência desta nos resultados, a configuração, que apresentou o resultado mais razoável do experimento, foi considerada para representar o escoamento de óleo e gás no domínio de grande escala. Dessa maneira, o objetivo da presente dissertação foi fornecer mais dados a respeito do vazamento de óleo e gás em água a grandes profundidades a partir da fluidodinâmica computacional. Para o domínio do tanque, testaram-se diferentes modelos de turbulência, como o k- $\varepsilon$ , LRR e SSG, modelos de força de massa virtual, de força de dispersão turbulenta, de força de sustentação e diferentes abordagens, euleriana e lagrangeana. De todas as configurações, a de abordagem lagrangeana, com modelo k- $\varepsilon$  para a turbulência, com um modelo de força de dispersão turbulenta e de força de arrasto foi a que mais se aproximou do experimento real. Com essa modelagem, realizaram-se quatro simulações em grande escala considerando o vazamento de óleo e gás. Cada simulação teve um propósito específico, a primeira serviu para redefinir o domínio, a segunda, para acertar as condições de contorno das laterais do domínio, a terceira, para analisar se a corrente marítima tem real efeito nos resultados e, a quarta, para analisar a influência do tamanho das gotas e bolhas. Como resultados, foi possível reproduzir as plumas de óleo e gás em seu formato cônico utilizando uma abordagem lagrangeana com o modelo de turbulência padrão k-ɛ e forças de arraste e dispersão turbulenta. A corrente marítima, por ter velocidade significativamente menor que as do óleo e do gás, pôde ser desconsiderada, o que permitiu a utilização de um domínio simétrico, que converge em menos tempo. Pôde-se observar que, conforme o diâmetro das gotas de óleo e das bolhas de gás diminui, o diâmetro da pluma de gás e a velocidade de arrasto da água aumentam. Esses resultados foram devidamente interpretados e discutidos, conferindo confiabilidade aos resultados obtidos com as simulações numéricas CFD.

Abstract of Dissertation presented to the School of Chemistry as part of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

# ANALYSIS OF OIL AND GAS SPILLS IN OFFSHORE WATERS: A STUDY WITH COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

Marcus Vinícius Salles Falcão September, 2016

Supervisors: Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph. D.

Prof. TâniaSuaiden Klein, Ph. D.

Concerns about the environment and the necessity of meeting the growing energy demand of human society lead to studies designed to balance the exploitation of natural energy sources and the preservation of life and ecosystems. This work deals with simulations of oil and gas spills in marine waters, through computational fluid dynamics (CFD), using the software ANSYS CFX, version 16.0. The meshes used for the simulations were designed with ANSYS ICEM, version 16.0. In this study, two domains were considered; the first represents a tank of water through which oil flows through an orifice and the second represents a section of marine water with a depth of 100 m where oil and gas spill from a small hole. For the first domain representing the tank of water, several models were tested aiming to reproduce a real experiment. After a grid test to ensure independence of the results, the model which showed the most reasonable results for the first domain was employed in the simulations of oil and gas spills in the second domain. The main objective of this study was to provide more Computacional fluid dynamics data about oil and gas spill in deepwater. For the tank domain, some turbulence models, such as the standard k- $\varepsilon$ , LRR and SSG were tested. Several different forces were also included in the simulations, like virtual mass, lift force and turbulent dispersion force. Two kinds of simulation approaching, eulerian and lagrangian, were also tested. The lagrangian approach, together with the k- $\varepsilon$  model and the turbulent dispersion force, has provided the most reasonable predictions of the experimental oil plume sizes. Hence, with this setting, four more simulations were carried out for the large water depth case. The first simulation was necessary to redefine the domain, the second to correctly define the system boundaries, the third to analyze if the water currents have any influence on the flow, and finally the fourth to access the effects of drops and bubbles sizes on the simulation. As results, it was possible to reproduce the oil and gas plumes in their conic format, using the langrangian approach, combined with the pattern k- $\varepsilon$  turbulence, drag forces and turbulent dispersion. Since the ocean current has significantly slower velocity than those of the oil and gas, it has been neglected, allowing the usage of a symmetrical domain that converged faster. It could be noted that, as the diameter of the drops and bubbles were reduced, the plume's diameter and the water's drag velocity increased. These results have been properly interpreted and discussed, confirming the results obtained with de CFD numerical simulations.

## **SUMÁRIO**

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Objetivo	2
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1. Teoria das plumas	4
2.1.1. Plumas multifásicas	
2.2. Modelos computacionais de vazamentos: CDOG e Deepblow	
2.3. O experimento Deepspill	
2.4. O experimento de Adams e Masutani (2001)	13
2.5. Modelagem CFD para vazamentos de óleo e gás na literatura	15
3. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	19
3.1. Definições e aplicações da modelagem CFD	19
3.2. Discretização do domínio	21
3.2.1. Malha	21
3.2.2. Qualidade da malha	23
3.2.3. Geração e tipos de malhas	24
3.3. Métodos de discretização	25
3.3.1. Método dos volumes finitos	26
3.4. Equações de transporte para uma única fase	30
2.5. (D. ). 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1.	21
3.5. Turbulência e seus modelos	31
3.5.1. Modelo k-ε	
	34
3.5.1. Modelo k-ε	34

3.6.2. Variáveis características dos escoamentos multifásicos	40
3.6.3. Equação da continuidade	42
3.6.4. Equação da continuidade para o número de partículas	43
3.6.5. Equação de conservação do momento	44
3.6.6. Equação de momento para uma partícula individual	46
3.6.7. Partículas e a turbulência	46
3.6.8. Acoplamento de massa e momento entre as fases	48
3.6.9. Balanço de forças nas partículas	49
4. MATERIAIS E MÉTODOS	54
4.1. Simulação de óleo em um tanque com água	54
4.1.1. A malha	54
4.1.2. Configurações das simulações do vazamento de óleo	56
4.1.2.1. Abordagem Lagrangeana	57
4.1.2.2. Abordagem Euleriana	60
4.1.2.3. Simulação Transiente	62
4.1.2.4. Reprodução dos experimentos de Adams e Masutani (2001)	62
4.2. Simulação de vazamentode óleo e gás em grande escala	62
4.2.1. Geometria e Malha	63
4.2.2. As simulações	69
5.1. Resultados das simulações do tanque com água e óleo	73
5.1.1 Abordagem Lagrangeana	73
5.1.2 Abordagem Euleriana	81
5.1.3. Simulação Transiente	84
5.1.4. Reprodução dos experimentos de Adams e Masutani (2001)	
5.2. Resultados das simulações envolvendo óleo e gás em grande	e escala . 87
6. CONCLUSÃO	104
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	106
Apêndice A – Perfis de Resíduo Máximo e RMS	109

### 1. INTRODUÇÃO

Apesar dos investimentos em energias renováveis, a dependência humana do uso de combustíveis ainda é muito significativa. A demanda por óleo e gás permanece extremamente alta, as empresas petrolíferas tendem a expandir seus territórios de exploração para áreas de difícil acesso, como regiões extremamente frias ou mares com grandes profundidades. Uma das tecnologias mais avançadas da engenharia de exploração de óleo e gás em águas profundas são as plataformas de extração, que viabilizam este tipo de operação (CHAN, 2013).

No entanto, este tipo de procedimento de exploração está sujeito a diversos acidentes, como o vazamento desses materiais em grandes profundidades oceânicas, o que pode colocar em perigo a vida dos que trabalham na plataforma e pode lançar grandes quantidades de poluentes no meio ambiente marítimo. Um exemplo de tal ocorrência foi o que aconteceu no ano de 2010 com a companhia *British Petroleum - BP*, que causou diversos danos ambientais e sociais na região do Golfo do México (CHAN, 2013). Eventos desastrosos como esse levam a estudos para entender a formação de plumas de óleo geradas por vazamentos no fundo de oceanos.

A compreensão do comportamento do óleo e do gás é crucial para prever o resultado de um possível vazamento. Deve-se responder, então, como se comportarão a pluma de óleo e gás vazado e para onde este material irá. Muitas dessas perguntas já foram respondidas e implementadas em modelos específicos para a simulação destes tipos de vazamentos a pequenas profundidades (LINDERSEN, 2013). Os experimentos e os modelos para acidentes em águas rasas são bem documentados na literatura, contudo, para grandes profundidades, os dados ainda são escassos.

Os modelos computacionais vêm ganhando destaque na área de segurança por apresentarem boa precisão em determinados casos. Existem mesmo alguns modelos que simulam a mudança de propriedades e fase do óleo e do gás (CHEN e YAPA, 2003). Johansen (2003) desenvolveu um modelo de vazamento em alta profundidade marítima, assim como uma verificação do modelo a partir de dados experimentais. O modelo computacional CDOG (*Comprehensive Deepwater Oil and Gas Blowout Model*), desenvolvido por Yapa (2001), é um modelo tridimensional que pode simular o comportamento de óleo e gás em

condições extremas de pressão e temperatura, que é o caso de um vazamento a grandes profundidades.

Além destes modelos desenvolvidos especificamente para este tipo de acidente, os softwares de fluidodinâmica computacional (CFD) apresentam resultados eficazes para vários problemas de escoamentos multifásicos, como os vazamentos. Entretanto, a falta de dados experimentais para a verificação das simulações ainda representa um impasse no estudo destes casos. A formação das gotas de óleo e gás após a sua liberação ainda não é muito bem documentada (LINDERSEN, 2013). Uma descrição da distribuição das gotas de óleo em vazamentos pode ser encontrada em Chen e Yapa (2007).

Dessa forma, é importante identificar a modelagem e tipo de malha mais adequados para cada simulação de modo a obter resultados coerentes com o problema físico que se deseja estudar.

#### 1.1. Objetivo

O objetivo principal do presente trabalho é fornecer mais dados a respeito do vazamento de óleo e gás em água a partir da fluidodinâmica computacional (CFD). A ferramenta CFD é muito difundida na literatura e apresenta resultados satisfatórios para outros tipos de fenômenos como a separação de água e óleo por hidrociclones e o cálculo da eficiência de trocadores de calor.

No entanto, pouco é encontrado na literatura acerca do estudo de vazamentos de óleo e gás em água utilizando essa ferramenta. Por isso é interessante que se amplie o uso dessa ferramenta no estudo desse fenômeno, pois é possível gerar mais dados confiáveis e valiosos que sirvam para entender melhor o comportamento de óleo e gás quando lançados em baixo da água.

Com isso, analisou-se, primeiramente, qual modelagem poderia representar com mais fidelidade um experimento real de vazamento de óleo em um pequeno tanque com água. O experimento de Adams e Masutani (2001) foi escolhido por apresentar resultados qualitativos para diferentes velocidades de vazamento do óleo. Nesta etapa, foram avaliados diferentes modelos de turbulência, abordagens lagrangeana e euleriana para a fase dispersa, forças de massa virtual, de sustentação, de arraste e de dispersão turbulenta, de modo a identificar qual modelagem reproduzia melhor o experimento de Adams e Masutani (2001).

Com a melhor configuração definida, reproduziu-se com fluidodinâmica computacional o experimento de vazamento de óleo e gás do grupo SINTEF (JOHANSEN, 2003) em escala real, a alta profundidade, de 844 m. Infelizmente, o trabalho do grupo do SINTEF não reporta dados quantitativos que permitam validação objetiva dos resultados obtidos com a simulação numérica do vazamento e, por este motivo, estudou-se a influência de variações nas condições de contorno, na corrente marítima e no tamanho das partículas de óleo e gás no resultado das simulações.

### 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

As mudanças climáticas que estão ocorrendo no planeta recentemente são um fator importante no aumento das preocupações com o meio ambiente durante a exploração das matrizes energéticas necessárias para a vida da moderna sociedade.

Estudos cada vez mais complexos e relevantes estão surgindo acerca de contenção de acidentes, em que o comportamento do material e as condições do lançamento são pouco conhecidos. Entretanto, com uma produção cada vez mais necessária de óleo e gás pela sociedade humana, a busca por locais de exploração menos acessíveis aumenta, levando a um risco maior de vazamentos em grande escala.

Não existe um modelo universal adotado pela literatura para a modelagem e a simulação do comportamento da pluma e das gotas de óleo formados após o lançamento. Na realidade, os modelos e as simulações para o comportamento da pluma e da quebra das gotas de óleo e das bolhas de gás são geralmente encontrados na literatura na forma de trabalhos empíricos que se adequam a determinados experimentos realizados em grande ou em pequenas escalas de vazamento.

Os modelos CDOG (*Comprehensive Deepwater Oil and Gas*) (YAPA, 2001), e *Deepblow* (JOHANSEN, 2000) são os mais encontrados na literatura. Simulações por fluidodinâmica computacional (CFD) são mais raras de se encontrar, todavia, foi utilizada neste trabalho a fim de prover informações de uma abordagem pouco explorada na literatura para os vazamentos de óleo e gás em meios aquáticos.

#### 2.1. Teoria das plumas

#### 2.1.1. Plumas multifásicas

Uma pluma é, por definição, uma "nuvem" alongada de fluido, por exemplo, óleo ou gás, se espalhando na forma de uma pena a partir do seu ponto de origem. As plumas de óleo e gás podem se estender desde o leito do oceano, onde geralmente ocorre o vazamento, até a superfície do mesmo.

As plumas podem ser classificadas em monofásicas e em multifásicas. Define-se uma pluma de apenas uma fase quando ambos meio e fase dispersa são do mesmo material, como por exemplo, vazamento de água em água ou óleo em óleo. Já uma pluma multifásica é caracterizada quando o meio e as fases dispersas são materiais diferentes, como, por exemplo, um vazamento de óleo em água, sendo esta uma pluma bifásica. O caso das gotas de óleo e bolhas de gás em água é um caso de pluma multifásica em que o movimento de ascensão é dado pelas diferenças de densidade e/ou dado por um movimento inicial (um jato, por exemplo).

#### 2.1.2. Vazamento de óleo

O óleo, ao ser liberado do fundo do oceano, passa por um processo de quebra em gotas. A maneira como este se quebrará dependerá da vazão com que este está sendo lançado. O tamanho típico dos diâmetros das gotas é entre 1 e 10 mm (LINDERSEN, 2013), e a formação dessas gotas é devida principalmente à alta turbulência gerada no ponto de descarga do material, ou até mesmo pela presença de algum tipo de dispersante químico (YAPA *et al.*, 2012).

O tamanho das gotas de óleo não afeta o movimento inicial da pluma. É a quantidade de movimento inicial do óleo que domina e, assim, todas as gotas e uma quantidade de água sobem juntas, formando a pluma multifásica. Dessa maneira, as fases estão, inicialmente, movendo-se com a mesma velocidade.

No entanto, depois de uma determinada altura, quando água e óleo já estão com uma menor velocidade, a pluma se dispersa. A partir desse ponto, a água que estava sendo carregada deixa de subir e cada gota de óleo subirá individualmente com velocidades de acordo com seu tamanho. Assim, pequenas gotas se movimentarão mais lentamente do que gotas de maior tamanho e correntes laterais de água poderão dispersá-las facilmente. A altura na qual isso passa a ocorrer é definida como altura de término da pluma.

Yapa (2012) ressalta que as forças de dispersão turbulenta e a difusão das gotas de óleo podem ser fatores importantes na modelagem de uma pluma desta natureza.

Dasanayaka e Yapa (2009) demonstraram por uma série de experimentos que, após a pluma atingir a altura de término, a relação entre velocidade de ascensão e diâmetro de cada gota poderia ser representada graficamente, considerando constantes a densidade da água

salgada (1024 kg/m³) e a densidade do óleo (873 kg/m³). A Figura 2.1 apresenta a relação entre a velocidade de ascensão de uma gota e seu diâmetro de partícula.

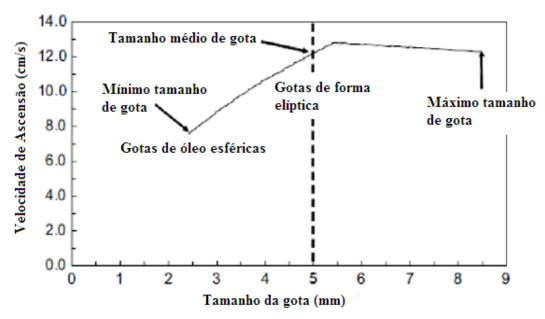


Figura 2.1 – Variação da velocidade de ascensão do óleo em função do seu diâmetro de partícula acima da altura de término. Adaptado de Dasanayaka e Yapa(2009)

Na realidade, o tamanho do orifício e a vazão do vazamento determinarão se realmente haverá formação de uma pluma ou se o jato de óleo se quebrará em pequenas gotas. O trabalho de Masutani e Adams (2001) no laboratório da Universidade do Hawaii, mostrou a influência da vazão de saída do óleo quando este é liberado por um orifício de 2,0 mm de diâmetro em um tanque com água de 1,3 m de altura aberto para a atmosfera.

Este experimento mostra que, para um orifício na escala de milímetros, para vazões pequenas, não há efetivamente a formação de uma pluma de óleo, enquanto que, para vazões mais significativas, ocorre uma dispersão maior, uma maior quebra do óleo em gotas e a formação de uma pluma.

#### 2.2. Modelos computacionais de vazamentos: CDOG e Deepblow

O modelo CDOG (*Comprehensive Deepwater Oil and Gas*) de Adams e Socolofsky (2004) foi desenvolvido na Universidade de Clarkson para simular o comportamento de óleo e gás lançados acidentalmente em águas marítimas profundas. Este é um modelo tridimensional

e foi construído considerando as mudanças de fase do gás com as respectivas mudanças termodinâmicas e hidrodinâmicas do jato/pluma, dissolução do gás e comportamento não ideal do gás (LINDERSEN, 2013).

Já o modelo *Deepblow* foi desenvolvido por Johansen (2000) com o apoio da equipe norueguesa de estudos de vazamentos de óleo e gás em grandes profundidades marítimas. Esse é o modelo mais recente desenvolvido para o estudo da formação da pluma de óleo e gás, formada no vazamento e considera efeitos como a formação de hidrato pelo gás, a influência da pressão no gás e a dissolução do mesmo na água.

Ambos os modelos utilizam uma abordagem lagrangeana para representar as plumas de gás e óleo. A abordagem lagrangeana, para estes dois modelos, considera a pluma como um conjunto de vários elementos cilíndricos, todos possuindo massa, velocidade e temperatura próprias (JOHANSEN, 2000).

Para a simulação da pluma, o *Deepblow* e o *CDOG* utilizam as seguintes condições: a formação de hidrato pelo gás, as trocas de calor com o ambiente, a dissolução do gás no ambiente e a contínua separação entre o gás e a pluma.

A formação de hidratos pelo gás é modelada pela variação de volume de cada elemento que compõe a pluma à medida que o hidrato é formado. Essa variação é devida à diferença de densidades entre o gás e os hidratos, pois estes são mais densos que o gás, o que causa uma diminuição nos volumes de cada elemento da pluma. A variação nos volumes,  $\Delta V$ , de cada elemento é dada por:

$$\Delta V = \frac{m_a'}{\rho_a} + \frac{m_g'}{\rho_g} - \frac{m_a' + m_g'}{\rho_H}$$
 (2.1)

Onde  $m'_a$  e  $m'_g$  são as massas de água e gás que juntas formam o hidrato e  $\rho_a$ ,  $\rho_g$  e  $\rho_H$  são as densidades da água, gás e o hidrato, respectivamente.

Já para as trocas de calor é necessário o calor específico de cada componente do escoamento multifásico. Com isso, define-se a temperatura de cada elemento da pluma pela equação de conservação de calor. No caso da pluma, onde pode haver a formação de hidratos, é preciso considerar o calor latente envolvido nessa formação.

Considera-se a quantidade de calor em um elemento da pluma em um passo de tempo k+1 como sendo:

$$Q_{k+1} = \sum m_i c_i T_k - X_H m_g L_H + \Delta Q_a$$
 (2.2)

Onde  $X_H$  é a fração mássica de gás presente no hidrato,  $m_i$  é a massa de cada material envolvido,  $c_i$  é o calor específico de cada material,  $T_k$  é a temperatura de cada elemento da pluma no passo de tempo k,  $L_H$  é o calor latente envolvido na transformação do hidrato e  $\Delta Q_a$  é a quantidade de calor contida na porção da água que é carregada para dentro da pluma referente ao passo de tempo.

A dissolução do gás no ambiente aquoso pode ser modelada pela variação de massa de gás contida em cada bolha:

$$\frac{dm_g}{dt} = -kA(s - C_a) \tag{2.3}$$

Em que k é o coeficiente de transferência de massa, A é a área superficial da bolha de gás em cada elemento de pluma, s é a solubilidade do gás na água e  $C_a$  é a concentração de gás dissolvido na água. Considerando uma concentração de gás dissolvido muito baixa no meio aquoso e uma bolha de gás esférica de diâmetro  $D_b$ :

$$\frac{dm_g}{dt} = -\frac{6km_g}{D_b} \frac{s}{\rho_g} \tag{2.4}$$

Em que  $\rho_g$  é a densidade do gás e  $m_g$  é a massa de gás contida em cada bolha.

O coeficiente de transferência de massa, k, depende da difusividade do gás na água e do tamanho da bolha. Na modelagem, k é calculada por correlações empíricas. O calculo de k é uma das diferenças entre o *Deepblow* e o *CDOG*. Para a força de arraste nas bolhas e nas gotas, o coeficiente de arraste é calculado como uma função do número de Reynolds:

Re < 1000, 
$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0.15 \text{Re}^{0.687})$$
 (2.5)

Re > 1000, 
$$C_D = 0.44$$
 (2.6)

Para que a equação da dissolução do gás seja aplicada é necessário que o tamanho de cada bolha,  $D_b$ , seja atualizado para cada elemento que compõe a pluma. Para isso, um tamanho inicial de bolha,  $D_o$ , é definido de acordo com a densidade do gás logo que este entra no meio aquoso. O tamanho das bolhas é alterado de acordo com as mudanças na densidade do gás enquanto este sobe à superfície da água.

Por fim, mas um efeito sobre a pluma que os modelos do *Deepblow* e *CDOG* conseguem calcular é a separação de algumas bolhas de gás da pluma à medida que a velocidade individual de cada bolha define para onde a bolha irá e não mais a quantidade de movimento da pluma como um todo.

A velocidade individual de cada bolha,  $w_b$ , depende do tamanho da bolha e da diferença de densidade entre o gás e água. Como as bolhas podem se contrair e/ou expandir, a velocidade individual de cada bolha será influenciada por estes efeitos.

A água que é arrastada para dentro da pluma também terá papel importante para a separação das bolhas de gás da pluma, já que a água influenciará no diâmetro da pluma. A taxa de aumento do diâmetro da pluma,  $w_R$ , pode ser calculada por:

$$w_{\rm R} = db/dt \tag{2.7}$$

Onde b é o diâmetro da pluma e t é o tempo.

Assim, a velocidade de escape das bolhas de gás da pluma,  $w_E$ , na direção normal à direção de subida da pluma  $\acute{e}$ :

$$W_E = 0, \quad W_N < W_R \tag{2.8}$$

$$W_E = W_N - W_R, \quad W_N > W_R$$
 (2.9)

Em que  $w_N$  é igual a  $w_b cos \varphi$ , que é o componente da velocidade individual de cada bolha normal ao eixo de cada elemento da pluma e  $\varphi$  o é ângulo que o eixo da pluma faz com o eixo horizontal.

Assim, os modelos consideram que o gás possui dentro da pluma uma concentração  $(kg/m^3)$ ,  $C_g$ , e que a taxa com que o gás escapa da pluma pode ser calculada por:

$$\Delta C_g = -\frac{2w_E C_g \Delta t}{\pi b} \tag{2.10}$$

Onde  $\Delta t$  é o passo de tempo do modelo.

De acordo com seus autores, os modelos *Deepblow* e *CDOG* são capazes de prever vazamentos de óleo e gás em água de uma maneira razoável Johansen (2000) e Adams e Socolofsky (2004). Porém, a literatura carece de uma utilização mais intensa desses modelos para comprovar suas eficiências de predição do comportamento do vazamento.

#### 2.3. O experimento Deepspill

A organização norueguesa de estudo e pesquisa, SINTEF, já realizou diversos estudos de campo para simular vazamentos de óleo e gás em dutos em meios subaquáticos, e um destes estudos teve bastante importância nessa área, por apresentar uma grande variedade de novos dados e informações. Esse experimento, conhecido como *Deepspill*, foi realizado em junho do ano 2000 no Mar da Noruega (ADAMS e SOCOLOFSKY, 2004).

O objetivo principal do trabalho da equipe SINTEF foi determinar o destino que óleo e gás possuem quando lançados em grandes profundidades marítimas. Os principais propósitos do experimento foram:

- Obter dados para a verificação de modelos numéricos que podem simular o comportamento de óleo e gás embaixo da água.
- Testar equipamentos de monitoramento de vazamentos de óleo e gás água.
- Avaliar quais medidas seguras poderiam ser tomadas nesse tipo de vazamento.

Nesse experimento, todas as observações foram realizadas em uma estrutura a sobre o mar e com todos os equipamentos de transporte e bombeamento de gás natural e óleo em uma profundidade de 844 metros. Foram realizados quatro experimentos em três dias: Uma simulação de vazamento de nitrogênio, duas com gás metano e óleo cru e, por fim, uma com

apenas gás metano. Cada simulação teve uma duração de 1 a 2 horas, menos as simulações com gás e óleo que tiverem uma duração um pouco maior para a obtenção de um maior mapeamento do destino desses materiais no ambiente marítimo.

Os resultados dos experimentos mostraram que não foi observado gás metano na superfície do mar, desaparecendo em uma profundidade de aproximadamente 150 m (ADAMS e SOCOLOFSKY, 2004). Esse desaparecimento de gás é possivelmente devido à dissolução deste na água salgada. Por sua vez, o óleo cru alcançou a superfície da água no tempo que duraram os experimentos.

A composição de óleo na água foi monitorada durante toda a sua subida gerando muitos dados que podem ser utilizados para avaliar modelos teóricos para a dissolução de compostos solúveis na água. O estudo de amostras de óleo que alcançaram a superfície fornece a taxa de evaporação desse material na água e, consequentemente, uma taxa de mudança de suas propriedades físicas, como sua viscosidade.

Outro fenômeno físico observado foi a emulsão entre água e óleo formado durante o vazamento. Muitas amostras de água e óleo coletadas na superfície mostraram ser uma emulsão estável, já que não se separaram mesmo depois de um período de 24 horas em temperatura ambiente (10 °C). Na verdade, concluiu-se que a emulsão foi formada após o óleo ter alcançado a superfície.

Além do experimento dos vazamentos, o estudo da instituição SINTEF utilizou os dados coletados desse experimento para realizar comparações com uma simulação numérica em que foram empregadas as mesmas condições de contorno do experimento real. O simulador empregado foi o conhecido como *Deepblow* desenvolvido por Johansen (2000) em que são considerados efeitos como formação de hidratos, dissolução do gás e correntes marítimas.

Quanto à formação de hidratos, as imagens colhidas do experimento mostraram que não houve formação de hidratos durante a ascensão do gás pela água. Não há formação de hidratos, provavelmente, porque não há tempo para o gás saturar na água e a saturação do gás é uma das condições para a formação de hidratos.

Para a altura onde as gotas de óleo começam a subir individualmente, ambos o experimento e a simulação numérica mostraram um valor de 170 metros aproximadamente. Para a dissolução das bolhas de gás na água, cálculos de modelos empíricos de dissolução mostram que bolhas com diâmetro menor que 10 mm dissolveriam na água em uma altura de 200 m a partir do ponto de vazamento.

Outra informação importante obtida no experimento foram os tamanhos que alcançaram as bolhas e as gotas. Para a medição do tamanho das bolhas de gás, foram realizadas quatro casos para diferentes profundidades:

Tabela 2.1 – Contagem do número de bolhas com tamanhos medidos para o gás (ADAMS e SOCOLOFSKY, 2004)

Caso	Profundidade	Número de bolhas contadas
1	836 m a 826 m	124
2	826 m a 822 m	184
3	822 m a 787 m	201
4	787 m a 760 m	158

Os resultados dessa contagem foram que para o todos os casos o tamanho das bolhas foram principalmente de 1 a 5 mm de diâmetro com algumas bolhas medindo quase 8 mm de diâmetro.

Para as gotas de óleo, também foram realizados 4 casos para profundidades diferentes para a medição dos tamanhos das gotas. As profundidades escolhidas para a medição das gotas foram diferentes das profundidades das gotas, porque em algumas faixas de profundidade não era possível visualizar bem as gotas devido à pluma de gás que as escondiam.

Tabela 2.2 - Contagem do número de gotas com tamanhos medidos para o óleo (ADAMS e SOCOLOFSKY, 2004)

Caso	Profundidade	Número de gotas contadas
1	840 m a 839 m	215
2	839 m a 834 m	129
3	834 m a 822 m	139
4	822 m a 789 m	194

Em todos os casos, contaram-se muitas gotas com tamanhos variando de 1 a 5 mm, mas apenas para os casos 1 e 2 existiram algumas gotas variando de tamanho entre 7 a 9 mm.

As propriedades dos materiais do experimento *Deepspill*, o número de bolhas, seus tamanhos médios, as velocidades de lançamento de óleo e gás no meio e até o tamanho do orifício por onde estes entram no meio foram utilizados nas simulações da presente dissertação.

A tabela a seguir sumariza as condições de um dos experimentos utilizado para a reprodução por simulação CFD:

Tabela 2.3 – Condições do experimento *Deepspill* (ADAMS e SOCOLOFSKY, 2004)

Dados do experimento Deepspill	
Diâmetro do orifício (m)	0,12
Profundidade (m)	844
Velocidade de saída do óleo (m/s)	1,47
Velocidade de saída de gás (0°C e 1 atm) (m/s)	53,1
Velocidade da corrente marítima (m/s)	0,1
Densidade do óleo (kg/m³)	850
Viscosidade do óleo (Pa s)	0,08
Densidade do gás (0°C) (kg/m <sup>3</sup> )	0,717
Viscosidade do gás (0° C e 1atm) (Pa s)	1,02*10 <sup>-5</sup>
Massa Molar Média de gás (kg/mol)	19*10 <sup>-3</sup>

#### 2.4. O experimento de Adams e Masutani (2001)

Adams e Masutani (2001) desenvolveram uma série de estudos a respeito dos vazamentos de óleo e água. O objetivo principal dos autores é fornecer mais dados experimentais sobre esse tipo de fenômeno para servirem para a validação de modelos matemáticos que buscam representar com fidelidade esses vazamentos.

Buscaram-se determinar dados quantitativos para as quebras dos jatos de óleo, para o comportamento da pluma de óleo em baixo da água e os tamanhos que as gotas de óleo alcançavam durante o vazamento.

Todos os experimentos foram apenas em escala laboratorial e o estudo se limitou na obtenção de dados experimentais, sem o desenvolvimento de algum modelo matemático que representasse o fenômeno dos vazamentos.

Em resumo, os objetivos principais do experimento foram:

- Analisar os resultados da quebra dos jatos para catalogar os diferentes regimes de instabilidades dos mesmos e caracterizar a distribuição de tamanhos das gotas de óleo.
- Fornecer dados quantitativos para o desenvolvimento de um algoritmo que apresente os efeitos dos escoamentos multifásicos.

O experimento de lançamento de óleo em água foi conduzido em um tanque com 0,55 m por 0,55 m de seção reta e 1,3 m de altura. De acordo com o trabalho dos autores, a pressão ambiente não é um parâmetro relevante para o estudo da quebra do jato de óleo na água. O jato de óleo se comportaria em um sistema a pressão ambiente da mesma forma que em um ambiente marítimo de alta profundidade.

O óleo quando lançado na água através de um pequeno orifício sairá na forma de um jato que poderá se quebrar em pequenas gotas. O tamanho das gotas será determinante no destino de cada uma, em outras palavras, se estas alcançarão a superfície da água ou se ficarão permanentemente submersas.

Assim, os autores realizaram uma série de lançamentos do óleo no tanque de 1,3 m de altura preenchido com água variando a velocidade de lançamento do óleo. O óleo entrava no tanque por orifício de 2 mm de diâmetro.

O óleo utilizado no experimento foi o com propriedades de acordo com a tabela abaixo:

Densidade Viscosidade dinâmica Viscosidade Cinemática Tensão superficial óleo/água (kg/m3) (centipoise) (centistokes) (dina/cm)

877 18 20,5 25

Tabela 2.4 – Propriedades do óleo utilizado no trabalho de Adams e Masutani (2001)

Essas propriedades do óleo serão as mesmas utilizadas nas simulações da presente dissertação que reproduziram esse experimento dos autores.

Os autores testaram as diferentes velocidades de entrada de óleo que foram 0,281 m/s, 0,340 m/s, 0,435 m/s, 0,716 m/s e 0,966 m/s.

Esses resultados foram utilizados como comparação com os resultados das simulações da presente dissertação. Além desses resultados da figura acima, os autores mediram os tamanhos de um determinado número de gotas para quatro diferentes velocidades de lançamento de óleo para o mesmo tanque e mesmo orifício.

No entanto, essas medições foram para quatro velocidades diferentes das da figura acima. Essas velocidades, o número de gotas e o diâmetro médio medido pelos autores se encontram na tabela abaixo:

Tabela 2.5 - Correlação das velocidades de lançamento do óleo no tanque e o diâmetro médio das gotas

Velocidade de lançamento de óleo (m/s)	Número de gotas contadas	Diâmetro Médio (mm)
2,16	2965	3,56
2,90	2783	3,57
3,35	2275	3,54
3,77	1000	3,39

No caso do trabalho dos autores Adams e Masutani (2001), o diâmetro médio é a média aritmética feita a partir dos diâmetros medidos para cada gota de óleo. O número das gotas contadas e o diâmetro médio serviram de dados para as simulações da presente dissertação.

#### 2.5. Modelagem CFD para vazamentos de óleo e gás na literatura

Na literatura, existem poucos trabalhos relacionando a modelagem CFD com o vazamento de óleo e gás em água. No entanto, o número desses trabalhos é maior do que os trabalhos relacionando os modelos do *Deepblow* e do *CDOG*, que na verdade estes últimos aparecem sendo utilizados apenas pelos autores que os desenvolveram.

Sendo a ferramenta CFD mais difundida e estudada do que estes dois modelos, é interessante estudar e fornecer mais dados dessa ferramenta para os vazamentos de óleo e gás, já que vários pesquisadores a utilizam.

Um dos trabalhos mais referenciados para as pesquisas nesse assunto é o trabalho de Cloete *et al* (2009). Nesse trabalho, a pluma de gás foi simulada pela abordagem lagrangeana em que as bolhas são tratadas como pontos individuais com momento sendo desenvolvido através do domínio considerado. Os autores notificam que o VOF (um tipo de abordagem euleriana) é capaz de calcular interfaces entre as fases presentes na simulação com grande eficácia, porém não consegue simular pequenas bolhas de gás, apenas com malhas muito refinadas. Dessa maneira, os autores utilizaram a abordagem lagrangeana para simular as bolhas individualmente.

Cloete *et al* (2009) consideraram um coeficiente de arraste específico, estudado pelos mesmos. Este coeficiente é aplicado para bolhas esféricas que se deformam e depende do número adimensional, Eötvös, Eo. Esse adimensional pode ser calculado em função da densidade do gás e da água, do diâmetro da bolha e da viscosidade da água.

A força de dispersão turbulenta é incluída nas simulações, sendo esta uma força de arraste extra, originada das flutuações da velocidade devida à turbulência. Cloete *et al* (2009), implementaram essa força de maneira que a trajetória de cada partícula é influenciada pela velocidade instantânea da água. A quantidade de dispersão turbulenta definida por essa força depende de quanto tempo uma partícula permanece dentro de um turbilhão.

Quanto ao tamanho das bolhas, o artigo considera um modelo em que o tamanho da bolha dependerá das propriedades do gás e dos parâmetros de turbulência.

As simulações do artigo foram rodadas no *software* ANSYS FLUENT, de maneira transiente. As simulações foram realizadas em uma malha hexaédrica representando um domínio de seção retangular e com 7 m de profundidade. Todo o domínio é preenchido com água e o gás é lançado no domínio com três diferentes vazões, 50, 100 e 450 l/s.

A quantidade de partículas de gás lançado no domínio não é apresentada pelos autores, porém eles afirmam que foi uma quantidade suficiente para representar uma pluma de gás. O tamanho do orifício por onde entram as partículas de gás também não é definido no artigo.

De acordo com os resultados desse trabalho, quanto maior a vazão de lançamento de gás maior a dispersão das bolhas de gás, já que mais gás é lançado à medida que as vazões crescem. Além disso, quanto maior a vazão, menores foram os tamanhos das bolhas de gás, pois com vazões maiores, maiores são os efeitos turbulentos nas bolhas.

Cloete *et al* (2009) mencionam que o uso da abordagem lagrangeana não é adequado para concentrações altas de gás, uma vez que as partículas não ocupam nenhum volume no domínio computacional. No entanto, de acordo com eles, as vazões utilizadas por eles, 50, 100 e 450 l/s são suficientes para simular o vazamento de gás na abordagem lagrangeana.

Zhu *et al* (2014) utilizaram CFD para simular o comportamento hidrodinâmico do óleo e da água, considerando o modelo VOF, uma distribuição de velocidade para as correntes de água e uma distribuição de pressões hidrostáticas para o ambiente simulado. O óleo e a água são considerados fluidos incompressíveis. Nas interfaces entre todos os componentes não há mudanças de fase e um componente não desliza sobre o outro. O VOF é utilizado para modelar a interface entre os componente, água e óleo. E o modelo *k-ε* foi escolhido para representar a turbulência no problema. As simulações foram realizadas pelo *software* ANSYS FLUENT e consideraram-se apenas duas dimensões para o problema. Assim, uma malha em duas dimensões com profundidade de 14,5 m para o mar e comprimento de 20 m foi utilizada. O orifício por onde o óleo entrava no domínio variou nos valores de 0,01 m, 0,02 m, 0,03 m, 0,04 m e 0,05 m para examinar o efeito desse tamanho no vazamento.

Além dos cinco diâmetros diferentes, testaram-se diferentes velocidades de vazamento, variando de 1 m/s a 5 m/s. Todas as simulações são consideradas em regime transiente. Como resultados, o artigo mostra que para todas as simulações o jato de óleo se apresenta quebrando na forma de gotas.

Além disso, constatou-se que aumentando a velocidade de lançamento de óleo, a dispersão do mesmo também aumentava, já que a quantidade de óleo era maior para velocidades maiores de lançamento.

Quanto ao efeito do tamanho do orifício, o aumento do tamanho do orifício diminuiu o tempo para o óleo alcançar a superfície, pois mantendo a velocidade de lançamento constante, a quantidade de óleo lançado era maior o que aumentava a quantidade de movimento total do óleo.

Com uma quantidade de movimento maior, maior foram os números de colisões entre as gotas de óleo o que fez com que as mesmas alcançassem tamanhos maiores nos casos com orifícios de maior tamanho.

O trabalho de Zhu *et al* (2014) é uma fonte interessante de comparação para simulações de vazamento de óleo em água, porém não explora os efeitos da turbulência, que são bem importantes, como mostraram Adams e Masutani (2001), inclusive para velocidades de lançamento menores do que as utilizadas por Zhu *et al* (2014).

Por fim, outro trabalho na literatura sobre o assunto que se destaca é o trabalho de Li et al (2012). O objetivo desse trabalho foi prever a trajetória de um vazamento de óleo em água utilizando o software comercial FLUENT.

No trabalho, os autores avaliaram a influencia da pressão de operação da linha de óleo e a velocidade da corrente ambiente. O modelo VOF foi utilizado para descrever o comportamento da água e do óleo e as simulações foram todas em regime transiente. A água está em constante movimento no ambiente e todos os fluidos são considerados incompressíveis com suas viscosidades constantes.

O modelo de turbulência k- $\varepsilon$  foi considerado para a água e as equações de Navier-Stokes foram resolvidas para cada volume de controle. Uma malha bidimensional foi considerada para representar o domínio de 10 m de profundidade de água. No entanto, o tamanho do orifício por onde o óleo entrou no domínio não foi especificado.

As pressões de operação consideradas no trabalho foram 100600 Pa, 100800 Pa, 101000 Pa e 102000 Pa. A mudança na pressão de operação representa uma mudança na velocidade de lançamento de óleo no domínio. E as correntes marítimas variaram nos valores

de 0,1 m/s, 0,3 m/s, 0,5 m/s e 0,8 m/s. Constatou-se inicialmente que com pressões até e acima de 102000 Pa, o óleo se apresentou como um jato contínuo, formando uma coluna de óleo. E pela influência da corrente marítima, essa coluna de óleo foi pouco arrastada no sentido da corrente.

Para pressões menores do que 101000 Pa, óleo subiu em forma de gotas de óleo. Com a pressão de operação maior, o óleo alcançou maiores velocidades de saída, chegando mais rápido à superfície. Assim, a distância do ponto de lançamento até o ponto onde o óleo alcançava a superfície se tornava menor com pressões de operação maiores.

### 3. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

#### 3.1. Definições e aplicações da modelagem CFD

Um problema de Engenharia pode ser abordado de duas maneiras distintas: a teórica e a experimental.

A abordagem teórica implica em solução de equações através de métodos analíticos ou métodos numéricos. A diferença está apenas na complexidade da equação que cada método pode atacar. O emprego de métodos analíticos exige, geralmente, hipóteses simplificadoras que podem se desviar demasiadamente do fenômeno físico real. Uma de suas importantes aplicações é a de validar casos limites de modelos numéricos e auxiliar no desenvolvimento de métodos numéricos mais robustos (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995). Se um método analítico for suficiente para resolver o problema de interesse dentro dos níveis de precisão e exigência necessários, ele deve ser preferido.

A grande vantagem da abordagem experimental é devido ao fato de se tratar da configuração real. Porém, muitas vezes, ela é muito difícil de ser realizada, devido a questões como altos custos, segurança ou simplesmente pela dificuldade de reprodução de condições reais.

Dessa maneira, a abordagem computacional surge como uma alternativa para a obtenção de dados sobre diversos problemas e, dependendo do caso, pode gerar informações significativas.

A fluidodinâmica computacional ou CFD é a análise de sistemas envolvendo escoamentos de fluidos, trocas térmicas ou outros fenômenos, como reações químicas, por meio de simulações computacionais (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995). A técnica possibilita a redução de custos com experimentos caros ou muitas vezes inviáveis, além de permitir a análise minuciosa de detalhes de um determinado equipamento, de forma a detectar problemas operacionais.

A fluidodinâmica computacional foi inserida no mercado em torno de 1960 na indústria aeronáutica a fim de aperfeiçoar o projeto de aeronaves. A partir de 1990, com o crescimento da capacidade computacional, do barateamento da produção de computadores e inserção de softwares com interface amigável, a fluidodinâmica computacional se difundiu por outras áreas (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995).

Além das equações de balanço de massa, momento e energia aplicadas ao volume de controle, fenômenos como reações e turbulência devem também ser modelados. Por isso, uma das dificuldades encontradas na aplicação desta ferramenta é a definição dos modelos que serão utilizados para descrever o fenômeno em estudo.

Outra dificuldade é a discretização do domínio. A solução numérica para problemas fluidodinâmicos só é viável pela divisão do domínio geométrico estudado em um número finito de partes, nas quais serão aplicadas as equações de conservação e fenomenológicas que representam o problema. Nesta fase, é importante que os volumes estabelecidos representem bem o domínio, pois a representatividade dos resultados irá depender diretamente da qualidade da discretização realizada.

As equações que descrevem fenômenos físicos de problemas reais raramente apresentam soluções analíticas. Assim, métodos numéricos, precisam ser utilizados para transformar o sistema de equações diferenciais definidos num domínio contínuo em um grande sistema de equações algébricas, relativas aos pontos discretizados deste mesmo domínio. Dessa forma, quanto maior a qualidade da discretização, mais acurado é o resultado (FERZIGER e PERIC, 2002).

Dessa maneira, os problemas resolvidos por fluidodinâmica computacional são divididos nas seguintes etapas: geração da geometria, a qual representa o domínio especificado pelo problema; geração da malha, onde ocorre a divisão do domínio total em volumes de controle discretos; especificação da física do problema, bem como suas condições de contorno; e, por fim, resolução das equações.

A solução obtida deve ser analisada e interpretada. Eventualmente, pode ser necessário ajustar o modelo de modo a gerar um resultado confiável, através do qual será possível extrair as variáveis de interesse e visualizar a solução do problema.

Os resultados podem apresentar dois níveis de erros quando comparados com a realidade de um problema físico: no primeiro nível, estão os erros numéricos propriamente ditos, resultados da má solução das equações diferenciais (MALISKA, 1995). Para detectálos, os resultados devem ser comparados com experimentos reais e outras soluções, analíticas ou numéricas, verificando se a equação diferencial foi corretamente resolvida. Aspectos como precisão da solução e convergência do algoritmo são testados nesta fase, que pode ser chamada de validação numérica. Esse processo atesta a qualidade do modelo numérico; no segundo nível, estão os erros resultantes do uso de equações diferenciais que não representam adequadamente o fenômeno.

#### 3.2. Discretização do domínio

Os métodos analíticos fornecem uma solução exata e fechada para as equações diferenciais de interesse em qualquer ponto do domínio. Conforme dito acima, os métodos numéricos resolvem as equações governantes em um número finito de pontos. A malha é a divisão do domínio analisado.

#### **3.2.1.** Malha

Uma boa solução numérica para um escoamento depende da qualidade da malha, isto é, uma malha refinada em regiões nas quais os gradientes das variáveis são elevados levará a melhores resultados. O problema da geração de malha não é trivial, principalmente em regiões tridimensionais. A obtenção de uma malha adequada pode se tornar, então, um problema mais complexo do que calcular o escoamento do fluido (FERZIGER e PERIC, 2002).

A malha consiste em um conjunto de sub-regiões, ou elementos, que dividem o domínio geométrico do problema. Na realidade, os elementos das malhas também podem ser chamados de células, além disso, pode-se definir os pontos da malha como nós, os limites de cada célula como faces e os limites de cada face como aresta.

Com a malha definida, as equações são resolvidas gerando variáveis com valores discretos, para cada elemento, e a solução de um elemento está relacionada com as dos elementos adjacentes. Isso gera a necessidade do refinamento em regiões cujos gradientes das variáveis em estudo são mais elevados. Em outras palavras, o tipo de malha adequado para o escoamento depende de sua complexidade e da geometria do domínio.

As malhas se dividem em dois grupos: estruturadas ou estruturadas em blocos, e não estruturadas. A malha estruturada, ou regular, consiste em um conjunto de famílias de linhas em que membros de uma mesma família não se cruzam. Este fato permite que vértices de um mesmo arranjo sejam numerados consecutivamente (FERZIGER e PERIC, 2002). Por sua vez, na malha estruturada em blocos há dois ou mais níveis de subdivisão do domínio, como mostra a Figura 3.1.

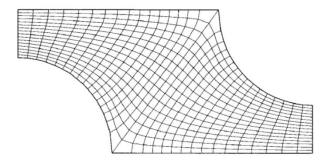


Figura 3.1 – Malha estruturada (FERZIGER e PERIC, 2002)

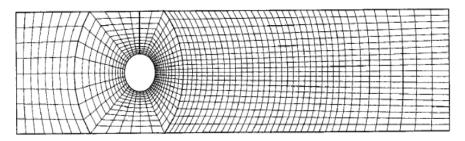


Figura 3.2 – Malha estruturada em blocos (FERZIGER e PERIC, 2002)

Nas malhas não estruturadas (Figura 3.3), os elementos podem ter os mais diversos formatos e números de vizinhos, sendo as mais apropriadas para geometrias bastante complexas. Em teoria, podem ser aplicadas para qualquer tipo de método de discretização, porém são mais bem adaptadas para os métodos dos volumes finitos e elementos finitos. Embora sejam de fácil implementação, as malhas não estruturadas apresentam, como ponto negativo, a irregularidade da estrutura dos dados obtidos.

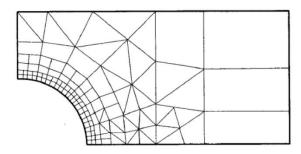


Figura 3.3 – Malha não estruturada (FERZIGER e PERIC, 2002)

#### 3.2.2. Qualidade da malha

A geração de uma malha robusta é de fundamental importância para minimizar possíveis fontes de erros numéricos. Nesse contexto, malhas uniformes seriam consideradas o ideal, uma vez que, por apresentarem distâncias iguais entre os nós, os erros de interpolação seriam menores. Porém, para que seja possível captar de forma efetiva as zonas com gradientes acentuados, faz-se necessária a utilização de elementos muito pequenos nessas regiões, tornando inviável tal método para geometrias maiores. Um procedimento muito comum é a construção de malhas não-uniformes com um refinamento em regiões onde os gradientes são maiores.

No entanto, o refinamento não pode ocorrer desordenadamente, já que uma das maiores fontes de erro são malhas de baixa qualidade. Dessa maneira, é preciso utilizar parâmetros para averiguar se a malha está com boa qualidade a fim de permitir uma maior robustez aos resultados.

Alguns parâmetros, definidos de acordo com o *ICEM* 16.0, e que podem ser avaliados em malhas tetraédricas e hexaédricas estão na Tabela 3.1 junto com seus valores aceitáveis para uma malha de boa qualidade.

Parâmetros	Faixa	Valor Médio Ideal
Assimetria	0-1	0-0,5
Proporção	0-∞	0-100
Qualidade do Elemento	0-1	0,3-1

Tabela 3.1 – Parâmetros para avaliação da malha e seus valores desejados.

A assimetria é uma das principais medidas de qualidade de malha. Ela determina o quão próximo está uma face ou uma célula de ser, por exemplo, equilátera ou equiângula.

Pela definição de assimetria, é atribuído um valor 0 para uma célula equilátera e um valor 1 para uma célula totalmente degenerada ou assimétrica. Geralmente, células degeneradas são caracterizadas por terem nós quase no mesmo plano (coplanares).

Faces e células muito assimétricas não são recomendadas para as malhas, pois, para resolver as equações fenomenológicas, assume-se que os elementos sejam equiláteros/equiângulos.

A proporção de uma face e de uma célula é definida como a razão entre seu maior comprimento e o seu menor comprimento. Esse critério de qualidade de malha é aplicado para os elementos hexaédricos, tetraédricos, quadriláteros e triangulares e é definido de maneira distinta para cada um desses tipos de elemento.

A proporção pode trazer uma ideia do quão ideal é uma célula ou face. Para uma face ou célula equilátera a proporção é definida com o valor 1. Faces ou células com valores acima de 1 possuem lados muito diferentes uns dos outros.

A qualidade do elemento serve de medida para a qualidade da malha e que varia de 0 a 1. Um valor de 1 significa que o elemento é um cubo (malha em 3D) ou um quadrado (malha em 2D) perfeitos, enquanto que uma atribuição de valor 0 significa que o elemento possui um valor nulo para seu volume.

#### 3.2.3. Geração e tipos de malhas

Muitas vezes, em simulações de fluidodinâmica computacional, gerar a malha que servirá de domínio para a simulação não é uma tarefa simples. Para o método de resolução de equações diferenciais por volume finitos, geralmente, o mais importante é que o ângulo entre o vetor normal às faces das células e a reta que conecta os centros dos volumes de controle seja ortogonal ou bem próximo de ser.

Na realidade, para a geração de uma malha que descreva acuradamente a geometria e a situação física, o tipo de malha, tetraédrica, hexaédrica e etc..., também é um fator muito importante. Se algum método para discretizar as equações de conservação for utilizado, é provável que a exatidão seja maior em volumes de controle com malhas hexaédricas do que se fossem tetraédricas (BISWAS e STRAWN, 1998). A razão para isso é que parte dos erros gerados pode ser cancelada quando as faces das células são paralelas e de mesma área, que é o caso para malhas hexaédricas em geometrias não tão complexas.

A precisão das soluções pode ser ainda melhorada para malhas hexaédricas se as linhas da malha estiverem bem próximas de seguirem o sentido do escoamento. Já para as malhas tetraédricas, o maior problema é a divisão anisotrópica que ocorre devido ao refinamento. Esse tipo de divisão nas malhas tetraédricas pode levar a malhas de baixa qualidade. Na verdade, para ter um controle maior da qualidade da malha, as divisões isotrópicas, ou seja, divisões feitas de maneira uniforme são as mais indicadas a serem feitas (BISWAS e STRAWN, 1998).

Além do tipo da malha, a geração de uma malha adequada para um determinado domínio depende de se observar em quais locais existem maiores gradientes de velocidade, pressão e etc para que a malha seja mais refinada nesses locais, pois o erro associado a essas regiões pode ser muito grande. Os erros são difundidos ao longo do domínio e é essencial que se busque uma maneira de prendê-los para que não se distribuam uniformemente pelo domínio (FERZIGER e PERIC, 2002).

Geometrias muito complexas podem também dificultar enormemente o trabalho de construção de malhas que as representem, pois uma malha de boa qualidade tem grande influência nos resultados da simulação, assim como, as aproximações de discretização das equações de balanço.

Existem diversos códigos para a geração das malhas, contudo a geração automática é a mais comumente usada, pois diminui o tempo de construção da malha. Elementos tetraédricos são mais fáceis de serem gerados pelos métodos automáticos, por isso acabam sendo os elementos mais comuns de aparecem em estudos de CFD.

No entanto, as células tetraédricas não são recomendadas de serem usadas em regiões próximas às paredes se a camada limite precisa ser resolvida, pois com o primeiro ponto da malha próximo à parede, outros elementos maiores da malha ficariam com direções paralelas à parede (FERZIGER e PERIC, 2002). Essa disposição de malha gera uma malha tetraédrica muito fina, criando problemas para a discretização dos fluxos difusivos. Por essa razão, alguns dos métodos de geração de malhas formam, primeiramente, uma camada de prismas ou de elementos hexaédricos próxima aos limites da superfície sólida da geometria.

Essa abordagem leva a malhas de melhor qualidade e, portanto, a uma solução mais precisa e a uma melhor convergência dos métodos numéricos empregados para a resolução das equações fenomenológicas.

#### 3.3. Métodos de discretização

Os métodos numéricos são uma grande ferramenta para a resolução por aproximação das equações diferenciais em equações algébricas para um conjunto de pontos no espaço e no tempo. Os métodos de discretização com mais destaque são:

#### Diferenças Finitas;

- Volumes Finitos;
- Elementos Finitos.

O método de diferenças finitas realiza a aproximação das equações em sua forma derivada nos pontos da malha. No método de volumes finitos, a aproximação é realizada na forma integral nas superfícies e nos volumes de controle e, por fim, no método dos elementos finitos devem-se escolher funções de formato e peso (FERZIGER e PERIC, 2002).

#### 3.3.1. Método dos volumes finitos

Normalmente, quando se fala em CFD, o método de solução das equações discretizadas segue o modelo dos volumes finitos, que utiliza os nós da malha como os pontos onde serão calculadas todas as propriedades dos escoamentos.

O método dos volumes finitos (VF) emprega uma forma integral para as equações de balanço como um ponto inicial para a convergência. O domínio da simulação é subdividido em um número finito de volumes de controle (VC) com as equações de conservação sendo aplicadas para cada VC (FERZIGER e PERIC, 2002).

No centro de cada VC, estão os nós da malha em que são calculados os valores de cada variável pertinente ao escoamento. Nas superfícies do VC, os valores das variáveis são calculados por interpolação a partir dos valores calculados nos centros do VC.

O método VF pode ser utilizado para qualquer tipo de malha, o que o torna ideal para geometrias complexas. E esse modelo de discretização é conservativo, já que as integrais superficiais, que representam os fluxos convectivos e difusivos, são as mesmas para os volumes de controle que compartilham as mesmas fronteiras.

A abordagem por volumes finitos pode ser considerada o método de discretização mais popular entre os engenheiros, já que apresenta termos de aproximação com significado físico.

O método dos volumes finitos pode ser dividido em três etapas: a geração da malha, a discretização das equações e, por fim, a solução do sistema matricial (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995). Assim, inicialmente a geração da malha dividirá o domínio da simulação em volumes de controle discretos. Considerando um caso unidimensional, por exemplo, temse que os limites dos volumes de controle estão posicionados nos pontos médios na distancia

entre nós adjacentes. Dessa forma, cada nó é cercado por um VC ou uma célula. O ideal é que se definam os volumes de controle próximos aos lados do domínio para que as condições de contorno físicos do domínio coincidam com as dos volumes de controle.

Um sistema de convenções é necessário para esta etapa e, geralmente, para problemas de CFD, o sistema é o apresentado na Figura (3.4). Um ponto P é identificado e suas vizinhanças em uma geometria unidimensional, os nós à esquerda e à direita deste ponto, são definidas como W e E, respectivamente. A face do volume de controle no lado esquerdo é definido como w e a do lado direito como e. A distancia entre os nós W e P e a distancia entre P e E são definidas como  $\delta x_{WP}$  e  $\delta x_{PE}$ , respectivamente. Analogamente, as distancias entre os pontos w e P e entre P e e são definidas como  $\delta x_{WP}$  e  $\delta x_{Pe}$ , respectivamente. A Figura 3.8 ilustra o que foi definido acima. Onde  $\Delta x$  é  $\delta x_{we}$ .

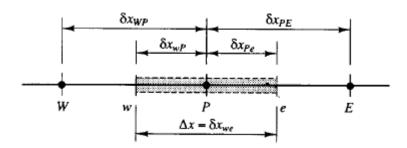


Figura 3.4 – Ilustração de uma parte do domínio unidimensional divido por um volume de controle (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995)

A segunda etapa é a discretização das equações e é a principal etapa no modelo dos volumes finitos, pois é a partir da discretização que se resolverão a integral no volume de controle das equações de balanço do sistema físico para cada nó. Assim, para o exemplo acima, desprezando os termos transientes:

$$\int_{A} n_{i}(\rho \phi u_{i}) dA = \int_{A} n_{i}(\Gamma g r a d \phi) dA + \int_{VC} S_{\phi} dV$$
(3.1)

Onde A é a área de seção transversal da face do VC,  $\phi$  é uma propriedade qualquer do escoamento,  $S_{\phi}$  o termo fonte de  $\phi$ ,  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão interfacial,  $\rho$  é a densidade do fluido do escoamento,  $n_i$  é o vetor unitário,  $u_i$  o campo de velocidade no escoamento e V o volume do VC.

A Equação 3.1 representa o balanço de momento no volume de controle. O termo da esquerda representa a parte convectiva do escoamento e o termo da direita contem a parte difusiva do escoamento e o termo de geração ou perda da propriedade  $\phi$  no volume de controle.

O termo difusivo e o termo fonte podem ser discretizados pelo método das diferenças centrais, porém o termo convectivo tem influência apenas na direção do escoamento o que impede a aplicação do método das diferenças centrais nesse termo (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995).

Considerando um problema unidimensional como o da Figura 3.8, na ausencia de termos fontes, a convecção e difusão estacionárias de uma propriedade qualquer,  $\phi$  é:

$$\frac{d}{dx}(\rho u\phi) = \frac{d}{dx}(\Gamma \frac{d\phi}{dx})$$
(3.2)

E pela equação da continuidade:

$$\frac{d}{dx}(\rho u) = 0 \tag{3.3}$$

Assim, integrando sobre o volume de controle a equação de transporte da Equação 3.2 no sistema unidimensional da Figura 3.8, tem-se:

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = (\Gamma A \frac{d\phi}{dx})_e - (\Gamma A \frac{d\phi}{dx})_w$$
(3.4)

Em que A é a área de seção transversal da face de VC e  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão interfacial. E integrando no volume de controle a Equação 3.3:

$$(\rho uA)_e - (\rho uA)_w = 0 \tag{3.5}$$

Com isso, para se obter as equações discretizadas dos termos convectivos e difusivos é preciso aproximar esses termos da Equação 3.4. Podem-se definir duas variáveis F e D para

representarem o fluxo mássico convectivo por unidade de área e a condução difusiva nas faces do volume de controle, respectivamente:

$$F = \rho u \, e \, D = \frac{\Gamma}{\delta x} \tag{3.6}$$

Então, os valores nas faces de F e D:

$$F_{w} = (\rho u)_{w} e F_{e} = (\rho u)_{e}$$
 (3.7)

$$D_{w} = \frac{\Gamma_{w}}{\delta x_{wp}} e D_{e} = \frac{\Gamma_{e}}{\delta x_{pF}}$$
(3.8)

Considerando que  $A=A_e=A_w$  e empregando a aproximação por diferenças centrais para o termo difusivo, a Equação 3.2 pode ser escrita por:

$$F_{e}\phi_{e} - F_{w}\phi_{w} = D_{e}(\phi_{E} - \phi_{P}) - D_{w}(\phi_{P} - \phi_{W})$$
(3.9)

E pela equação da continuidade:

$$F_e - F_w = 0 (3.10)$$

Por fim, a última etapa consiste no cálculo dessas equações discretizadas que devem ser aplicadas para cada ponto nodal da malha. Para os volumes de controle que compartilham os mesmos limites do domínio, a equação discretizada é modificada para incorporar as condições de contorno deste domínio. Dessa maneira, o resultado do sistema de equações algébricas dará a distribuição de valores da propriedade  $\phi$  nos nós da malha.

### 3.4. Equações de transporte para uma única fase

As equações de transporte para apenas uma fase fluida são as que descrevem a conservação das quantidades que estão variando ao longo do escoamento, como massa, energia e momento. Assim, essas equações de balanço são desenvolvidas para um volume de controle que seja representativo da geometria. As equações serão apresentadas em sua forma diferencial completa, mas serão aproximadas para o problema.

- Transporte de massa global

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \hat{U}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \hat{U}_j)}{\partial x_j} = 0$$
(3.11)

Onde  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $\hat{U}_j$  a velocidade instantânea na direção j, t é o tempo e  $x_i$  são as coordenadas do sistema.

O primeiro termo, tanto para o lado esquerdo quanto para o direito, representa o acúmulo no sistema e o segundo, também para ambos os lados da equação, a convecção. Além disso, para fluidos incompressíveis, a equação de transporte de massa global, também chamada de equação da continuidade, pode ser simplificada para:

$$\frac{\partial \widehat{U}}{\partial x_j} = 0 \tag{3.12}$$

- Transporte de momento

$$\frac{\rho \partial \hat{U}_{i}}{\partial t} + \rho \hat{U}_{j} \frac{\partial \hat{U}_{i}}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial P}{\partial x_{i}} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_{i}} + \rho g_{i}$$
(3.13)

Sendo P, a pressão sobre o fluido e  $g_i$  o componente gravitacional.

Os termos à esquerda do sinal de igualdade são referentes às forças inerciais e os termos ao lado direito são referentes às forças de pressão, forças viscosas e de campo,

respectivamente. O tensor tensão,  $\tau_{ij}$  que representa o fluxo de momento devido às forças viscosas, é dado pela Equação 3.14, para um fluido incompressível newtoniano:

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial \hat{U}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{U}_i}{\partial x_j}\right) \tag{3.14}$$

Onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido.

Como o problema estudado no projeto não apresenta trocas térmicas, não será analisada a equação de balanço de energia, e as propriedades dos fluidos são consideradas constantes.

#### 3.5. Turbulência e seus modelos

Escoamentos turbulentos são caracterizados por estados de movimentos randômicos, nos quais a velocidade e a pressão variam constantemente com o tempo. Essa característica torna difícil a descrição dos violentos movimentos de flutuação, como, por exemplo, prever o local onde se formará um turbilhão ou vórtice turbulento, ou de descrever o campo de velocidades com precisão.

Um dos parâmetros que indica o caráter turbulento ou não de um escoamento é o número adimensional de Reynolds, Re, que pode ser usado para escoamentos internos e externos. Este é definido como a razão entre as forças de inércia e viscosas, de modo que, em escoamentos laminares, que apresentam altos efeitos viscosos e baixas velocidades, o Re é baixo e, em escoamentos turbulentos, o Re é alto; quanto mais alto, mais turbulento.

Devido aos movimentos caóticos, um escoamento tipicamente turbulento apresenta grandes e bruscas variações de velocidade em função da transferência de energia das grandes para as pequenas escalas (FREIRE; ILHA; COLAÇO, 2006). Devido a essa característica, a descrição dos violentos movimentos de flutuação ou dos campos de velocidade se torna uma tarefa muito complexa.

Uma modelagem adequada dos efeitos turbulentos dentro de um escoamento é muito importante, pois é um fenômeno que acarreta bons efeitos de mistura por promover o contato entre parcelas de fluidos com diferentes concentrações de propriedades que se conservam, processo chamado de difusão turbulenta. E também, a turbulência é um fenômeno altamente

dissipativo, onde fluidos com diferentes momentos entram em contato e a energia dissipada devido aos efeitos viscosos, é convertida irreversivelmente em energia interna do fluido (FERZIGER e PERIC, 2002).

Podem-se citar duas maneiras de se modelar os efeitos turbulentos de um dado sistema: resolução numérica direta da equação de conservação de momento para as variáveis instantâneas ou aplicação da média temporal nas equações de transporte e utilização dos modelos de turbulência.

A resolução numérica direta das equações de conservação para as variáveis instantâneas é a abordagem conceitualmente mais simples, por não promover a aplicação do operador média temporal e não utilizar modelos de turbulência, apresentando apenas os erros inerentes à discretização das equações, os quais podem ser controlados pela utilização de métodos de ordens superiores e refinamento da malha. Entretanto, para descrever com mais precisão os fenômenos turbulentos do escoamento, é necessária uma malha muito refinada. Segundo Ferziger e Peric (2002), para um estudo conciso dos fenômenos físicos, faz-se necessária uma malha onde o maior elemento tenha, no máximo, o tamanho do maior turbilhão. Contudo, para capturar os efeitos nas pequenas escalas, necessita-se de elementos do tamanho dos menores turbilhões. Tamanha precisão inviabiliza a simulação numérica direta para fins de engenharia prática, sendo utilizado em casos onde se desejam níveis altos de detalhamento do escoamento em regiões exatas.

Para facilitar a modelagem do escoamento turbulento é possível então decompor as variáveis em duas componentes, uma média e uma flutuante, e aplicar o operador média temporal sobre essas variáveis, de modo que, por exemplo,  $\widehat{U} = U + u$ , sendo U e u as velocidades média e flutuante respectivamente.

Após o tratamento matemático mencionado, as equações assumem as seguintes formas:

#### - Equação da Continuidade

$$\frac{\partial (U_j)}{\partial x_j} = 0 \tag{3.15}$$

#### - Transporte de momento

$$\rho \frac{\partial U_i}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial U_j}{\partial x_i} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) - \rho \overline{u_i u_j} \right] + \rho g_i$$
 (3.16)

Na definição da média temporal, tem-se que a média temporal de uma variável flutuante é zero, porém ao aplicar o operador média temporal na multiplicação de duas variáveis flutuantes, o resultado não será zero, a menos que as variáveis não estejam correlacionadas de forma alguma, o que é raro no caso de um escoamento turbulento (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995). Com o operador matemático média temporal sendo aplicado no termo convectivo surge o termo  $\overline{u_i u_j}$  que, multiplicado pela densidade, é chamado de tensor de Reynolds.

Mesmo existindo nove componentes no tensor de Reynolds (Equação 3.17), vale frisar que, como o produto é uma operação comutativa, esse é simétrico e, portanto, conhecendo-se os valores dos componentes acima da diagonal, também se conhecem os termos abaixo da mesma.

$$\bar{\tau}_{ij} = -\rho \begin{bmatrix} \overline{u_1^2} & \overline{u_1}\overline{u_2} & \overline{u_1}\overline{u_3} \\ \overline{u_2}\overline{u_1} & \overline{u_2^2} & \overline{u_2}\overline{u_3} \\ \overline{u_3}\overline{u_1} & \overline{u_3}\overline{u_2} & \overline{u_3^2} \end{bmatrix}$$
(3.17)

Com isso, tomando como exemplo um escoamento sem trocas térmicas, faz-se necessário resolver um sistema com quatro equações (continuidade e as três equações de Navier-Stokes, todas para as variáveis médias) e dez incógnitas  $(P,U,V,W,\overline{u^2},\overline{v^2},\overline{w^2},\overline{uv},\overline{uw},\overline{vw})$ , sendo seis delas, os componentes do tensor de Reynolds, que necessitam de modelagem, uma vez que são desconhecidos no sistema. A tentativa de controle do grau de liberdade do sistema a ser resolvido é chamada de "problema de fechamento" e, para estimar os componentes do tensor de Reynolds, utilizam-se os modelos de turbulência.

Os componentes do tensor de Reynolds podem ser calculados por meio de sete equações de transporte, em que seis são referentes aos componentes do tensor e uma referente

à dissipação viscosa turbulenta. Esses modelos são conhecidos como modelos dos Tensores de Reynolds.

Pode-se modelar os componentes do tensor de Reynolds através do modelo de Boussinesq que é análogo à lei da viscosidade de Newton. No entanto, tal abordagem define mais uma incógnita, a viscosidade turbulenta, a qual é então estimada através dos modelos de turbulência do tipo viscosidade turbulenta linear. Embora a utilização do modelo de viscosidade turbulenta tenha limitações físicas intrínsecas, como a previsão de isotropia dos componentes normais do tensor de Reynolds em escoamentos cisalhantes, este possui fácil implementação e, com correta utilização, produz resultados bastante consistentes (FERZIGER e PERIC, 2002), principalmente para escoamentos cisalhantes onde apenas um componente do tensor de Reynolds é dominante. Para estes modelos, os componentes do tensor de Reynolds podem ser calculados pela expressão (3.18).

$$\rho \overline{u_i u_j} = \rho \frac{2}{3} k_i \delta_{ij} - \mu_i \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$$
(3.18)

Onde  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta,  $k_t$  é a energia cinética turbulenta e  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker. A viscosidade turbulenta pode ser genericamente representada pelo produto de uma escala de velocidade e uma escala de comprimento da turbulência:

$$\mu_{t} = \rho C \mathcal{G}\ell \tag{3.19}$$

A seguir o presente trabalho discutirá o principal modelo de turbulência, que foi utilizado na maior parte das simulações do presente trabalho, o modelo k- $\varepsilon$ .

### 3.5.1. Modelo k-ε

O modelo k-ɛ é chamado de modelo de duas equações, pois utiliza o conceito de viscosidade turbulenta, calculando os componentes do tensor de Reynolds pela equação 3.18, e resolve duas equações de transporte extras, uma para determinar a escala de velocidade turbulenta e outra para a escala de comprimento, de modo a calcular a viscosidade turbulenta pela equação 3.19.

A escala de velocidade é dada pela raiz quadrada da energia cinética turbulenta,  $k_t$ :

$$\mathcal{G} = k_t^{1/2} \tag{3.20}$$

De modo que a equação de transporte para a energia cinética turbulenta é dada por:

$$\frac{Dk_{t}}{Dt} = -\overline{u_{i}}\overline{u_{j}}\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{j}} - \upsilon \frac{\overline{\partial u_{i}}}{\partial x_{j}}\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left[(\upsilon + \frac{\upsilon_{t}}{\sigma_{k}})\frac{\partial k_{t}}{\partial x_{j}}\right]$$
(3.21)

O primeiro termo do lado direito da equação de transporte da energia cinética turbulenta representa a taxa de produção de energia cinética turbulenta por unidade de volume, denominado  $P_k$ . O segundo termo representa a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de volume, processo que se dá por meio dos efeitos viscosos presentes no meio, sendo denominado de  $\varepsilon$ . O terceiro termo representa a difusão viscosa e turbulenta.

A escala de comprimento é então calculada em função da energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação viscosa:

$$\ell = \frac{k_t^{3/2}}{\varepsilon} \tag{3.22}$$

A taxa de dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de volume, ε, é normalmente calculada pela equação de transporte abaixo:

$$\frac{D\varepsilon}{Dt} = C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k_t} \left( -\overline{u_i u_j} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k_t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\upsilon + \frac{\upsilon_t}{\sigma_e}) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right]$$
(3.23)

A possibilidade de se modelar a escala de comprimento utilizando as variáveis  $k_t$  e  $\epsilon$  é proveniente do fato de que, sob condições de escoamentos com altos números de Reynolds, há uma cascata de energia sendo transferida das grandes escalas para as pequenas escalas, sendo, então, dissipada (MALALASEKERA e VERSTEEG, 1995).

Dessa maneira, o modelo k- $\varepsilon$  apresenta sua validade na região plenamente turbulenta, a partir da qual a lei logarítmica da parede é válida, ou seja, onde o parâmetro  $y^+=yu_v/v$  (sendo

 $u_{\tau}$  a velocidade de atrito, y a distância efetiva até a parede e v a viscosidade cinemática) no primeiro nó a partir da parede for maior ou igual a 30.

Uma vez que o modelo tem sua validade para altos números de Reynolds, faz-se necessária a obtenção de uma forma mais apropriada de descrever o valor de variáveis em regiões próximas à parede, onde o número de Reynolds turbulento é mais baixo. Para tal tarefa, utilizam-se funções de parede, as quais são fórmulas empíricas que estimam os valores das variáveis para camadas limite com gradiente de pressão nulo, sem resolver equações de transporte para a região da camada viscosa. Por mais que o procedimento agregue algum empirismo, ele também proporciona a redução do esforço computacional, uma vez que não se faz necessária a utilização de malhas refinadas próximo às paredes.

# 3.5.2. Modelos dos tensores de Reynolds

O modelo dos tensores de Reynolds, diferentemente dos modelos de viscosidade turbulenta, resolve seis equações de transporte para cada um dos seis componentes do tensor de Reynolds, e ainda precisa de uma equação para a dissipação viscosa de energia cinética turbulenta, pois ε surge nas equações de transporte dos tensores de Reynolds.

Dessa maneira, resolve-se, além das equações de Navier-Stokes e Continuidade, as 7 equações de transporte extras. Por causa disso, os modelos dos tensores de Reynolds demandam um maior esforço computacional, porém são mais precisos quando os escoamentos são mais complexos: escoamentos com fluido em rotação, escoamentos com mudanças repentinas nas taxas de tensão média, escoamento em que os campos de tensão reproduzem a anisotropia natural da turbulência do problema, escoamentos flutuantes.

As equações de transporte para os componentes do tensor de Reynolds podem ser escritas na seguinte forma:

$$\frac{D\overline{u_i u_j}}{Dt} = P_{ij} + \Phi_{ij} - \varepsilon_{ij} + d_{ijk}$$
(3.24)

Onde os termos do lado direito serão descritos abaixo. Dentre esses termos, o único que dispensa modelagem é o termo de produção:

$$P_{ij} = -\left(\overline{u_i u_k} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \overline{u_j u_k} \frac{\partial U_i}{\partial x_k}\right)$$
 (3.25)

Os demais termos são modelados e variam de modelo para modelo. Abaixo pode-se ver como esses termos são tratados no modelo LRR de Launder *et al.*(1975).

O termo difusivo é dado por:

$$d_{ijk} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ C_s \frac{k_t}{\varepsilon} \left( \overline{u_k u_l} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \upsilon \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} \right)$$
(3.26)

Onde  $C_s$  é uma constante.

O termo de redistribuição de energia é dado por:

$$\Phi_{ii} = \Phi_{ii,1} + \Phi_{ii,2} \tag{3.27}$$

$$\Phi_{ij,1} = -C_1 \rho \frac{\varepsilon}{k} (\overline{u_i u_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k)$$
(3.28)

$$\Phi_{ij,2} = -C_2(P_{ij} - \frac{2}{3}P\delta_{ij})$$
 (3.29)

Onde  $C_1 = 1.8$  e  $C_2 = 0.6P$ , em que  $P = 0.5P_{ii}$  para o modelo LRR (LAUNDER, 1975).

Já para o modelo SSG (SPEZIALE *et al*, 1991), tem-se que o termo de redistribuição de energia pode ser dado por:

$$\Phi_{ij} = -C_1 b_{ij} + C_1 \varepsilon (b_{ik} b_{kj} - \frac{1}{3} b_{mn} b_{mn} \delta_{ij}) + C_2 k_t S_{ij} + C_3 k_t (b_{ik} S_{jk} + b_{jk} S_{ik} - \frac{2}{3} b_{mn} S_{mn} \delta_{ij}) + C_4 k_t (b_{ik} W_{jk} + b_{jk} W_{ik})$$
(3.30)

Onde os  $C_i$  são constantes dependentes do modelo, os  $b_{ij}$  são tensores de anisotropia,  $S_{ij}$  são os tensores da taxa de deformação e  $W_{ij}$  são os tensores de rotação.

$$b_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{2k_t} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tag{3.31}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$$
 (3.32)

$$W_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$$
 (3.33)

Finalmente, o termo de dissipação é modelado como:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \tag{3.34}$$

Tanto no termo difusivo como no de dissipação, aparece a taxa de dissipação da energia cinética, ɛ. Por esse motivo, precisa-se de uma equação para essa variável. Poder-se-ia utilizar a equação 3.23, porém para levar em consideração a vantagem de calcular por equações de transporte os componentes do tensor de Reynolds, ela assume a forma:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k_t} P_k - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k_t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\upsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (C_{\varepsilon} \frac{k_t}{\varepsilon} \overline{u_k u_l} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k})$$
(3.35)

#### 3.6. Escoamentos multifásicos

Os escoamentos do tipo multifásico são aqueles em que mais de uma fase está envolvida no escoamento. Esse tipo de escoamento abrange uma enorme gama de aplicações e condições. No caso desses escoamentos, define-se componente como a espécie química presente e fase como o estado físico de cada componente, sólido, líquido ou gasoso (CROWE et al, 2012).

Os escoamentos bifásicos compreendem então os sistemas gás-líquido, gás-sólido e líquido-sólido. Todos essses sistemas são bastante comuns na indústria como colunas de

bolhas, suspensões de partículas em um gás ou um líquido, respectivamente. Em todos esses casos, é fácil identificar uma fase contínua e outra dispersa.

Já o caso de escoamentos de três fases ou mais fases também são encontrados no cotidiano da engenharia. É o caso de um vazamento de óleo e gás em água, como o que é abordado neste trabalho.

### 3.6.1. Modelagem de escoamentos multifásicos

Para o melhor entendimento de como cada escoamento multifásico pode se comportar, a modelagem de cada fenômeno faz-se estritamente necessária. Existem três tipos de modelagem que podem ser usadas: experimentalmente, por meio de escalas laboratoriais ou piloto, teoricamente, por utilização de equações matemáticas e modelos para cada escoamento, e computacionalmente, utilizando a capacidade de cálculo das máquinas modernas para resolver numericamente as equações matemáticas dos modelos físicos (BRENNEN, 2005).

Há muitas aplicações que podem ser modeladas por meio de pesquisas laboratoriais, porém outras que não podem. Os modelos teóricos e computacionais são essências para a extrapolação à escalas maiores que as do laboratório, o que justifica a grande demanda por esses dois tipos de modelagem.

Futuramente, pode ser que seja possível resolver as equações de Navier-Stokes para cada fase e calcular os detalhes do escoamento multifásico (BRENNEN, 2005). No entanto, o poder computacional presente ainda não é capaz de considerar todos os detalhes que os escoamentos multifásicos apresentam. Portanto, as simplificações dos modelos físicos são muito necessárias para a obtenção de resultados viáveis e que apresentem boa aproximação com os casos reais.

Nesse sentido, podem-se utilizar dois tipos de abordagem para os escoamentos dispersos, que é o caso da presente dissertação, a abordagem lagrangeana e a abordagem euleriana. Na abordagem lagrangeana, o movimento da fase dispersa é ditado pelo das partículas que a compõe. O escoamento em torno de cada partícula é modelado de acordo com o arraste, a sustentação e outros tipos de força que ajam sobre a partícula (BRENNEN, 2005).

Já nos casos de modelagem euleriana, a fase dispersa é considerada como uma segunda fase contínua interagindo com a fase contínua principal. Todas as equações de conservação de massa, momento e energia são desenvolvidas para todos os fluidos

(BRENNEN, 2005). Incluindo termos de interação entre elas, de troca de massa, momento e energia. Uma possível desvantagem dessa aproximação é que esta não considera a natureza discreta da fase dispersa, por considerá-la uma segunda fase contínua.

#### 3.6.2. Variáveis características dos escoamentos multifásicos

Uma descrição matemática será apresentada abaixo para escoamentos multifásicos e, nesse contexto, é importante definir certas variáveis e suas relações entre si.

Uma das variáveis que frequentemente é usada na modelagem dos escoamentos multifásicos é o fluxo volumétrico, que é uma vazão volumétrica por unidade de área, muitas vezes chamado de velocidade superficial. Pode-se representar o fluxo volumétrico para o componente A na direção i por  $j_{Ai}$ . Assim, o fluxo volumétrico total num sistema com N componentes é dado por:

$$j_i = j_{Ai} + j_{Bi} + \dots = \sum_{N} j_{Ni}$$
 (3.36)

Dessa forma, o fluxo mássico do componente A, de densidade  $\rho_A$ , na direção i, representado por  $G_{Ai}$ , é:

$$G_{Ai} = \rho_A j_{Ai} \tag{3.37}$$

Sendo  $u_{Ai}$  a velocidade do componente A na direção i, a velocidade relativa do componente A em relação ao componente B é:

$$u_{ABi} = u_{Ai} - u_{Bi} (3.38)$$

Denota-se  $\alpha_A$  a fração volumétrica do componente A. Brennen (2005) ressalta que, embora não haja dificuldade para definir essa variável para escoamentos de volume finito, não é fácil definir um valor para ela em um volume infinitesimal ou em um ponto qualquer do escoamento.

Com os valores de fração volumétrica definidos é possível relacionar o fluxo volumétrico e a velocidade do componente:

$$j_{Ai} = \alpha_A u_{Ai} \tag{3.39}$$

Pode-se ainda definir certas propriedades de mistura, como a densidade de mistura que é definida como:

$$\rho = \sum_{N} \alpha_{N} \rho_{N} \tag{3.40}$$

Além das velocidades relativas, pode-se definir uma velocidade de arrasto (*drift velocity*) que é a velocidade com a qual o componente A se movimenta em relação a um referencial que se move com uma velocidade de valor igual ao fluxo volumétrico total. Assim, essa velocidade é dada por:

$$u_{AJi} = u_{Ai} - \dot{j}_i \tag{3.41}$$

No entanto, uma propriedade que é ainda mais utilizada do que a velocidade de arrasto é o fluxo de arrasto que é o fluxo volumétrico do componente A em relação a um referencial se movendo com velocidade igual a  $j_i$ . Denotado por  $j_{NJi}$ .

$$j_{NJi} = j_{Ni} - \alpha_N j_i = \alpha_N (u_{Ni} - j_i) = \alpha_N u_{NJi}$$
 (3.42)

Um resultado interessante que se obtém através dessas considerações é que a soma dos fluxos de arrasto é igual a zero:

$$\sum_{N} j_{NJi} = \sum_{N} j_{Ni} - j_{i} \sum_{N} \alpha_{N} = j_{i} - j_{i} = 0$$
(3.43)

### 3.6.3. Equação da continuidade

Para que o escoamento disperso seja bem representado, um volume infinitesimal deve ser pequeno o bastante para que as propriedades do escoamento variem de forma significativa, pois dessa forma é possível definir as derivadas das propriedades do escoamento. No entanto, esse volume deve ser maior do que os tamanhos das gotas e das bolhas da fase dispersa, pois dessa forma é possível que o volume infinitesimal contenha uma amostra representativa de cada componente do escoamento (BRENNEN, 2005).

Considerando essa condição, a primeira equação de movimento, a equação da continuidade para um escoamento de fase dispersa pode ser construída (no caso, assumindo a abordagem euleriana).

Por simplicidade, escolhe-se um elemento cúbico com arestas paralelas às direções  $x_I$ ,  $x_2$  e  $x_3$ . O fluxo mássico do componente A através de uma das faces do cubo, perpendiculares à direção i, é  $\rho_A j_{Ai}$  e  $\rho_A \alpha_A$  é a massa da fase no interior do cubo. Dessa maneira, pode-se escrever que a conservação de massa de A no interior desse volume cúbico é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_A \alpha_A) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_A j_{Ai}) = \Gamma_A \tag{3.44}$$

Em que  $\Gamma_A$  é a taxa de transferência de massa da fase A para outras fases presentes no escoamento, por unidade de volume. No caso, essa transferência pode ser o resultado de mudanças de fase (líquido para vapor) ou de reações químicas (BRENNEN, 2005).

Da mesma forma que essa equação pode ser escrita para a fase *A*, ela vale para as demais fases presentes no escoamento. Assim, como a massa total do sistema deve ser conservada, tem-se que:

$$\sum_{N} \Gamma_{N} = 0 \tag{3.45}$$

Dessa forma, a soma de todas as equações de continuidade de cada fase é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{N} \rho_{N} \alpha_{N} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left( \sum_{N} \rho_{N} j_{Ni} \right) = 0$$
(3.46)

E substituindo  $j_{Ni}$  por  $\alpha_N u_{Ni}$ , tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{N} \rho_{N} \alpha_{N} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left( \sum_{N} \rho_{N} \alpha_{N} u_{Ni} \right) = 0$$
(3.47)

E considerando que a velocidade relativa entre as fases seja zero e a Equação 3.40, obtém-se uma equação que é idêntica à equação da continuidade para uma única fase:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \tag{3.48}$$

# 3.6.4. Equação da continuidade para o número de partículas

A equação da continuidade da massa nos escoamentos multifásicos deve ser complementada por uma equação da continuidade para o número de partículas (bolhas e gotas), que constituem a fase dispersa (BRENNEN, 2005).

Na condição de que essas partículas não sejam quebradas e nem criadas, tem-se que o número de partículas da fase dispersa por unidade de volume é  $n_D$  e a equação da continuidade para esse número por unidade de volume é:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_D + \frac{\partial}{\partial x_i} (n_D u_{Di}) = 0 \tag{3.49}$$

Relacionando essa equação com a 3.44 é possível obter uma nova equação que serve para determinar com que taxa as partículas de uma fase A são transferidas entre as unidades de volume.

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_D \rho_D v_D) + \frac{\partial}{\partial x_i}(n_D u_{Di} \rho_D v_D) = \Gamma_D$$
(3.50)

Sendo  $v_D$  o volume de uma partícula,  $\rho_D$  a densidade da partícula e  $\Gamma_D$  o termo de transferência das partículas da fase dispersa, que mostrará de que forma o número de partículas mudará entre as unidades de volume.

### 3.6.5. Equação de conservação do momento

Algumas simplificações são necessárias para o desenvolvimento da equação de conservação de momento. Considera-se que as superfícies do volume de controle não dividam as partículas de maneira que todas elas estejam inseridas nesse volume (BRENNEN, 2005).

A força por unidade de volume que age em A é:

$$F_{Ak}^{T} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_{A} \alpha_{A} u_{Ak}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} (\rho_{A} \alpha_{A} u_{Ai} u_{Ak})$$
(3.51)

A grande dificuldade no desenvolvimento dessa equação encontra-se na determinação das forças que agirão sobre a fase A. Dentro dessa força resultante, incluem-se as forças de pressão, viscosas e as forças que cada componente impõe uns nos outros dentro do volume de controle (BRENNEN, 2005).

Considera-se como uma força externa presente na força resultante a força gravitacional por unidade de volume:

$$\rho_A \alpha_A g_k \tag{3.52}$$

Em que  $g_k$  é a aceleração da gravidade. Outra força, que é devida às trações dentro do volume de controle e que apenas existe para a fase contínua, é definida pelo tensor tensão,

 $\sigma_{Cki}$ . O tensor tensão é derivado das trações superficiais sofridas pela fase contínua. O divergente desse tensor,  $\frac{\partial \sigma_{Cki}}{\partial x_i}$ , é inserido na equação de momento.

Além disso, o tensor tensão pode ser substituído por:

$$\sigma_{Cki} = -p\delta_{ki} + \sigma_{Cki}^{D} \tag{3.53}$$

Onde p é o componente de pressão (forças normais),  $\sigma^{D}_{Cki}$  é a tensão desvio devido aos movimentos relativos das partículas no fluido e  $\delta_{ki}$  é o delta de Kronecker.

Outra contribuição importante é a força de interação entre componentes dentro do volume de controle,  $F_{Ak}$ . Assim a equação da conservação de momento pode ser escrita por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_{A}\alpha_{A}u_{Ak}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\rho_{A}\alpha_{A}u_{Ai}u_{Ak}) = \alpha_{A}\rho_{A}g_{k} + F_{Ak} - \delta_{A}(\frac{\partial p}{\partial x_{k}} - \frac{\partial \sigma_{Cki}^{D}}{\partial x_{i}})$$
(3.54)

Em que  $\delta_D = 0$  para a fase dispersa e  $\delta_C = 1$  para a fase contínua. Para as forças de interação,  $F_{Ak}$ , sabe-se que por estas serem forças internas ao sistema do volume de controle, tem-se que:

$$\sum_{N} F_{Nk} = 0 \tag{3.55}$$

Dessa maneira, pode-se realizar a soma de todas as equações de momento e escrever a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{N} \rho_{N} \alpha_{N} u_{Nk} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left( \sum_{N} \rho_{N} \alpha_{N} u_{Ni} u_{Nk} \right) = \rho g_{k} - \frac{\partial p}{\partial x_{k}} + \frac{\partial \sigma_{Cki}^{D}}{\partial x_{i}}$$
(3.56)

### 3.6.6. Equação de momento para uma partícula individual

A equação de conservação de momento para uma partícula individual da fase dispersa pode ser escrita como uma equação de movimento de Newton, considerando a partícula com um volume  $v_D$ .

$$\frac{D_D}{D_D t} (\rho_D v_D u_{Dk}) = F_k + \rho_D v_D g_k \tag{3.57}$$

Em que  $D_D/D_Dt$  é a derivada substantiva e  $F_k$  é a força que a fase contínua exerce na partícula na direção k. Na realidade,  $F_k$  inclui as forças devidas ao movimento da partícula em relação à fase contínua e aos gradientes de pressão dentro da fase contínua.

#### 3.6.7. Partículas e a turbulência

Escoamentos turbulentos são os mais difíceis de serem resolvidos. Mesmo para um único fluido Newtoniano escoando em um tubo, são necessários diversos modelos empíricos para representar precisamente seu movimento (BRENNEN, 2005).

A inclusão de partículas nesse tipo de escoamento resultaria num grande aumento da complexidade na representação do escoamento, principalmente, devido à provável segregação, à aglomeração ou à fissão das partículas. Isso resultaria em grandes modificações na própria turbulência do sistema, por causa do aparecimento e desaparecimento dos vórtices que são o principal fator de complexidade dos escoamentos turbulentos (BRENNEN, 2005).

Nesse sentido, o estudo dos escoamentos turbulentos com partículas já foi bastante desenvolvido nos últimos anos, embora alguns casos ainda necessitem de mais entendimento.

No estudo da turbulência, as escalas de comprimento e tempo de Kolmogorov caracterizam o escoamento turbulento e são definidas como se segue:

$$\lambda = \left(\frac{\upsilon^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \tag{3.58}$$

$$\tau = \left(\frac{\upsilon}{\varepsilon}\right)^{1/2} \tag{3.59}$$

$$\tau = (\frac{\upsilon}{\varepsilon})^{1/2} \tag{3.59}$$

Em que v é a viscosidade cinemática e  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. Como  $\varepsilon$  é proporcional a  $U^3/l$ , em que U e l são a velocidade e a dimensão típicas do escoamento, tem-se que:

$$\lambda/l \propto \text{Re}^{-3/4}$$
 (3.60)

$$U\tau/l \propto \mathrm{Re}^{-1/2} \tag{3.61}$$

O que mostra que as dificuldades em se medir e computar o escoamento turbulento aumentam à medida que o número de Re aumenta.

Na verdade, a literatura mostra que quando o tamanho das partículas é muito menor do que a escala de comprimento do escoamento turbulento, elas tendem a seguir o movimento do próprio escoamento, absorvendo um pouco da energia turbulenta, assim diminuindo a turbulência do escoamento (BRENNEN, 2005).

Por outro lado, quando as partículas são maiores que as escalas de comprimento do escoamento turbulento, elas não seguem o movimento turbulento, ao invés disso, podem produzir novos vórtices aumentando a turbulência do sistema (BRENNEN, 2005).

O movimento relativo das partículas em relação ao escoamento turbulento é um grande fator complicador do problema. A literatura lista um grande número de métodos heurísticos para a solução de escoamentos turbulentos com partículas, contudo cada método funciona para apenas uma pequena quantidade de casos.

Uma alternativa aos métodos heurísticos é o uso das simulações numéricas diretas (DNS) que é capaz, em alguns casos, de representar os detalhes da interação entre a turbulência e as partículas. No entanto, as soluções por DNS consomem uma quantidade muito elevada de tempo, até mesmo para os escoamentos mais simples (BRENNEN, 2005).

### 3.6.8. Acoplamento de massa e momento entre as fases

Outro importante conceito na modelagem dos escoamentos multifásicos é o acoplamento entre as fases presentes no escoamento. O acoplamento é a influência que o escoamento de uma fase exerce no escoamento de outra. Se o escoamento de uma fase é influenciado por outro de outra fase, mas o escoamento desta última não é influenciado, o acoplamento é dito de uma via (CROWE *et al*, 2012).

Já quando ambos os escoamentos das fases são influenciados um pelo outro, o acoplamento é chamado de duas vias. O acoplamento é importante para transferência de massa, de momento e de energia.

O acoplamento da massa pode ser estimado por:

$$\prod_{massa} = \frac{M_d}{\dot{M}_C} \tag{3.62}$$

Em que  $M_d$  é a massa gerada pela fase dispersa por unidade de tempo e  $M_c$  é a massa transportada pela fase contínua. Se  $\Pi_{massa}$  for muito menor que 1, então os efeitos da adição de massa à fase contínua pode ser desprezado e, assim, o acoplamento de massa não precisa ser considerado.

Para o acoplamento de momento pode-se utilizar o parâmetro  $\Pi_{momento}$  que é definido pela razão entre a força de arraste da fase dispersa na fase contínua e o fluxo de momento da fase contínua.

$$\prod_{momento} = \frac{F_d}{Mom_C}$$
 (3.63)

Da mesma maneira que o acoplamento de massa,  $\Pi_{momento}$  sendo muito menor que 1 a troca de momento tem acoplamento de 1 via.

### 3.6.9. Balanço de forças nas partículas

O balanço de forças é muito importante para a compreensão da dinâmica do problema, pois com este se pode calcular a aceleração e a velocidade nas quais as partículas estão submetidas e, assim, prever sua trajetória e seu comportamento.

Pode-se escrever o balanço de forças, no caso para uma partícula sem rotação e imersa em um fluido contínuo:

$$m_{p} \frac{du_{pi}}{dt} = F_{Di} + F_{Bi} + F_{Vmi} + F_{DTi}$$
 (3.64)

Sendo  $m_p$  a massa da partícula,  $u_{pi}$  a velocidade da partícula na direção i,  $F_{Di}$  a força devido ao arrasto na direção i,  $F_{Bi}$  a força devido ao empuxo e peso da partícula,  $F_{Vmi}$  é a força de massa virtual e  $F_{DTi}$  é a força de dispersão turbulenta.

Cada uma dessas forças tem um papel muito importante numa boa descrição do sistema do escoamento com partículas. A força de arraste,  $F_{Di}$ , é a força que a partícula sofre à medida que este se move através de um fluido contínuo (DREW e PASSMAN, 1999).

Essa força, para a abordagem lagrangeana, é escrita em função do coeficiente adimensional de arrasto,  $C_D$ .

$$F_{Di} = \frac{1}{2} \rho_c C_D A_F |u_{ci} - u_{pi}| (u_{ci} - u_{pi})$$
 (3.65)

Sendo  $A_F$  a área de seção transversal da partícula,  $\rho_c$  é a densidade do fluído contínuo e sendo os subíndices p (partícula) e c (fase contínua). O coeficiente de arraste é definido de acordo com cada tipo de modelagem, em que cada uma delas pode considerar diferentes fatores, como efeitos turbulentos nas partículas e a concentração das mesmas no meio contínuo por exemplo.

Já para a abordagem euleriana, a força de arraste pode ser dada por:

$$F_{Di} = c_{cd} (u_{ci} - u_{di}) (3.66)$$

$$c_{cd} = \frac{C_D}{8} A_{cd} \rho_c |u_{ci} - u_{di}|$$
 (3.67)

Onde  $A_{cd}$  é área interfacial por volume onde as fases trocam momento. A forma da interface ditará como a transferência de momento será realizada entre as fases em cada volume de controle. No presente trabalho, a área interfacial é calculada pelo modelo de partícula que calcula essa área por:

$$A_{cd} = 6\frac{\alpha_d}{d_d} \tag{3.68}$$

Sendo  $\alpha_d$  a fração volumétrica da fase dispersa e  $d_d$  o tamanho médio das partículas da fase dispersa. Vale ressaltar que como a turbulência é importante no fenômeno do vazamento de óleo, a transferência entre a turbulência da fase dispersa e a fase contínua também pode ser considerada na abordagem euleriana. Essa transferência pôde ser considerada pelo modelo de Sato e Sekogushi (1975). Nesse modelo a viscosidade turbulenta da fase contínua é função da viscosidade turbulenta, do termo da tensão cisalhante no meio contínuo e de uma viscosidade turbulenta extra induzida pela fase dispersa.

Finalmente, o coeficiente de arraste para óleo foi calculado pelo modelo de Ishii e Zuber (DREW e PASSMAN, 1999). De acordo com a descrição dos modelos de força de arraste, o de Ishii e Zuber demonstra ser o mais ideal a ser utilizado, pois é o único capaz de modelar as deformações das gotas.

Para o modelo de Ishii e Zuber da força de arraste o cálculo do coeficiente de arraste é a mesma para abordagem euleriana e lagrangeana e pode ser expresso por:

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_m} (1 + 0.15 \,\text{Re}_m^{0.687}) \tag{3.69}$$

$$\operatorname{Re}_{m} = \frac{\rho_{c} |U_{d} - U_{c}| d_{p}}{\mu_{m}}$$
(3.70)

$$\frac{\mu_m}{\mu_c} = (1 - \frac{r_p}{r_{pm}})^{-2.5r_{pm}\mu_*} \tag{3.71}$$

$$\mu_* = \frac{\mu_d + 0.4 \mu_c}{\mu_d + \mu_c} \tag{3.72}$$

Em que  $U_d$  e  $U_c$  são as somas vetoriais das velocidades da fase dispersa (partículas) e da fase contínua em todas as três direções,  $r_{pm}$  é o maior valor de raio de partícula (caso aja uma distribuição de tamanhos configurada na simulação, esse é o maior valor da distribuição) e  $r_p$  é o raio da partícula em que é aplicado a força de arraste.

No caso do gás na abordagem lagrangeana, o coeficiente de arraste foi calculado pelo modelo de Schiller e Naumann (MARCHISIO e FOX, 2013) que utiliza a seguinte correlação para o coeficiente de arraste:

$$\operatorname{Re}_{p} \le 1000, \ C_{D} = (24/\operatorname{Re}_{p})(1+0.15\operatorname{Re}_{p}^{0.687})$$
 (3.73)

$$Re_P > 1000, \ C_D = 0.445$$
 (3.74)

Na realidade, esse modelo de coeficiente de arraste pode ser utilizado para qualquer tipo de partícula esférica, sendo sólida ou fluida. Utilizou-se esse modelo de coeficiente de arraste, porque este é um modelo padrão para partículas esféricas pouco densas, que é o caso das bolhas de gás (MARCHISIO e FOX, 2013).

Já as forças devido ao empuxo e ao peso da partícula para uma partícula imersa em um fluído contínuo podem ser definidas como:

$$F_{Bi} = (m_p - \rho_c v_p) g_i \tag{3.75}$$

Em que a Equação 3.75 representa o peso da partícula descontado do empuxo que o meio contínuo exerce sobre ela. E  $v_p$  é o volume de uma partícula e  $\rho_c$  é a densidade do fluído contínuo.

A força de massa virtual,  $F_{vm}$ , é uma força que surge quando a partícula, imersa em um fluído, é acelerada, por algum motivo, fazendo com que o fluido ao seu redor acelere também o que provoca essa força de interação entre o fluido e a partícula.

Para a abordagem lagrangeana em uma única partícula esférica, tem-se que a força de massa virtual pode ser expressa por:

$$F_{Vmi} = \frac{1}{2} C_{vm} \rho_c v_p \left( \frac{du_{ci}}{dt} - \frac{du_{pi}}{dt} \right)$$
 (3.76)

Onde  $C_{vm}$  é coeficiente de massa virtual, que para partículas esféricas recebe o valor de 1 (DREW e PASSMAN, 1999).

Já na abordagem euleriana, a força de massa virtual é escrita de uma maneira diferente da abordagem lagrangeana. Essa escrita é dada pela equação:

$$F_{VMi} = C_{VM} \alpha_d \rho_C \left[ \left( \frac{\partial u_{Ci}}{\partial t} + u_{Ci} \cdot \nabla u_{Ci} \right) - \left( \frac{\partial u_{di}}{\partial t} + u_{di} \cdot \nabla u_{di} \right) \right]$$
(3.77)

Em que  $\rho_c$  é a densidade do fluido,  $\alpha_p$  é a fração volumétrica da fase dispersa,  $u_{Ci}$  e  $u_{di}$  são as velocidade do fluido contínuo e da fase dispersa e  $C_{VM}$  é o coeficiente de massa virtual que para partículas esféricas recebe o valor de 1/2 (DREW e PASSMAN, 1999).

Além disso, o caso euleriano possui uma força a mais que o caso lagrangeano que é a força de sustentação. De acordo com Skjetne e Olsen (2012), a aceleração das bolhas e das gotas pode ser influenciada por essa força de sustentação. Ela pode surgir quando a fase dispersa atravessa um fluido que está em um movimento cisalhante, fazendo a fase dispersa experimentar uma força transversal ao seu próprio movimento (CROWE *et al*, 2012) e pode ser calculada por:

$$F_{Ii} = \alpha_d \rho_c C_I (u_{di} - u_{ci}) \times w_{ci}$$
(3.78)

Em que  $\alpha_d$  é a fração volumétrica da fase dispersa,  $\rho_c$  é a densidade da fase contínua,  $c_L$  é o coeficiente de sustentação (adimensional),  $u_{di} - u_{ci}$  é a diferença entre as velocidades das fases e  $w_d$  a velocidade angular da fase contínua.

Na presente dissertação, o cálculo do coeficiente de sustentação, considerou-se o modelo de *Tomiyama*, pois este é aplicável para gotas de líquidos com densidade próxima a do meio contínuo que as contem (TOMIYAMA, 1998)

A ultima força considerada na presente dissertação é a força de dispersão turbulenta que pouco é abordada nos livros sobre fluidodinâmica e sobre fenômenos de transporte. Essa força surge quando turbilhões do fluido contínuo exercem um arraste nas partículas em regiões de grande concentração das mesmas, produzindo oscilações de pequenas amplitudes. Porém, como os turbilhões sofrem grandes flutuações de intensidade ao longo do escoamento, as amplitudes das oscilações das partículas também sofrem essas flutuações que são sempre aleatórias.

De acordo com Davidson (1990), as variações na amplitude das oscilações das partículas farão com que esta se afestem cada vez mais das regiões de alta concentração das mesmas, o que provoca a dispersão das mesmas no domínio. Nas simulações da presente dissertação, esses efeitos da força de dispersão turbulenta são incluídos devido às velocidades flutuantes da água agindo na trajetória das partículas.

# 4. MATERIAIS E MÉTODOS

# 4.1. Simulação de óleo em um tanque com água

Primeiramente, foram realizadas simulações de injeção (vazamento) de óleo em um pequeno tanque com água para depois simular este material em um caso de grande escala, em elavadas profundidades marítimas. Na realidade, isso foi necessário para verificar que tipo de modelagem é mais adequado para simular o vazamento de óleo em grande escala.

A simulação de injeção de óleo em água em um tanque é a reprodução do experimento realizado por Masutani e Adams (2001), onde os autores reproduziram o vazamento de um óleo em um tanque com água, com cinco velocidades de injeção do óleo 0,281 m/s, 0,340 m/s, 0,435 m/s, 0,716 m/s e 0,966 m/s. O tanque tinha 1,3 m de altura e 0,55 m por 0,55 m de seção transversal e um orifício central de 2 mm de diâmetro.

Para a reprodução por simulação deste experimento, construiu-se uma geometria que pudesse representar o domínio adequadamente. Considerou-se um domínio para a malha de dimensões 0,25 x 0,25 x 0,25 m, em outras palavras, um domínio em forma de cubo e menor que o tanque do experimento real. Isso foi feito porque esse volume é apenas uma seção do volume utilizado nos experimentos desses autores, além de ser uma maneira de diminuir um pouco o esforço computacional. Foi realizado um teste de malha para eliminar interferências da malha nos resultados da simulação.

### 4.1.1. A malha

A malha que representa o domínio para o experimento no tanque de água foi construída utilizando o programa de construção de malhas, ANSYS ICEM versão 16.0. Como a malha é uma geometria cúbica, pode-se representá-la por uma malha hexaédrica. A geometria, aparentemente, é bem simples, contudo, o pequeno orifício coloca um pouco mais de dificuldade na construção da malha, pois a malha fica muito refinada na região próxima ao orifício o que pode aumentar a instabilidade da convergência da malha.

Para o teste de malha, considerou-se apenas o caso de maior vazão do experimento de Masutani e Adams (2001). Construíram-se três malhas que pudessem fazer parte do teste de

malha, considerando o mesmo método de construção para as três, diferindo-se apenas no número de nós de cada uma.

Os parâmetros de qualidade das três malhas foram verificados e apresentaram valores dentro do esperado para malhas de boa qualidade, conforme discutido na seção 3.2.2. Para as malhas empregadas, todos os parâmetros analisados apresentaram valores considerados ideais.

A Figura 4.1 apresenta a malha de 250 mil nós:

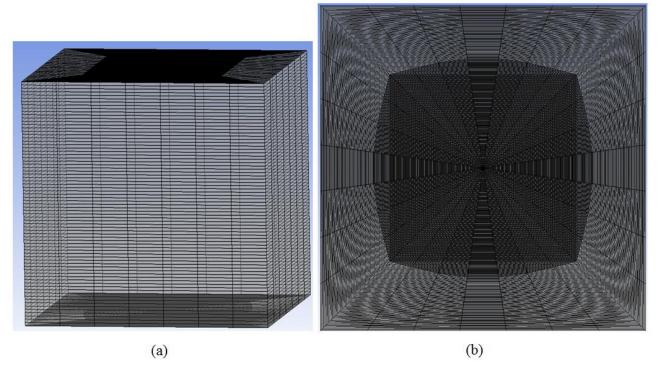


Figura 4.1 – (a) Vista em perspectiva da malha de 250 mil nós; (b) Base da malha de 250 mil nós com o orifício

Pela Figura 4.1, observa-se que o maior refinamento foi construído justamente na região do orifício, de diâmetro de 2\*10<sup>-3</sup> m, pois é onde estão os maiores gradientes de velocidade e fração volumétrica dos componentes. Essa estratégia foi utilizada para as três malhas. Assim, construíram-se as outras duas malhas. As malhas foram chamadas de *malha\_1* com 250.135 nós, a *malha\_2* com 500.400 nós e a *malha\_3* com 1.003.800 nós.

### 4.1.2. Configurações das simulações do vazamento de óleo

Para a simulação do vazamento de óleo no tanque com água foram consideradas diferentes configurações que pudessem reproduzir esse vazamento da maneira mais real possível. Dessa forma, foram realizadas diferentes simulações com água e óleo com diferentes modelos de turbulência, diferentes modelos de simulação de partículas e diferentes modelos para forças de sustentação, de arraste e de massa virtual.

Para todas as simulações definidas para estes dois materiais, consideraram-se as propriedades do óleo e da água as mesmas das utilizadas no experimento de Masutani e Adams (2001). A Tabela 4.1 mostra os valores da viscosidade dinâmica e da densidade de cada um desses materiais.

Tabela 4.1 – Propriedades da água e do óleo

Material	Densidade (kg m <sup>-3</sup> )	Viscosidade Dinâmica (kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )
Água	997	$8.89*10^{-4}$
Óleo	877	$1.8*10^{-2}$

Essas propriedades foram consideradas constantes por todo o domínio das simulações. Além disso, como a geometria na simulação tinha altura de 0,25 m e o tanque do experimento, 1,30 m, a pressão hidrostática foi especificada de acordo com a realidade para as simulações. Para isso, definiu-se uma expressão para todo o domínio para a pressão hidrostática:

$$p = p_o + \rho g(H - z) \tag{4.1}$$

Onde  $p_o$  é definida como a pressão atmosférica,  $1,01*10^5$  Pa,  $\rho$  é a densidade da água, 997 kg/m³, g é o valor da aceleração da gravidade, 9,8 m/s², H é a altura do tanque no experimento de Adams e Masutani (2001), 1,3 m, e z é a coordenada que representa a altura do domínio, variando de 0 a 0,25 m.

Para definir as forças de interação entre a água e óleo, que serviram para calcular a transferência de momento entre esses componentes, um valor de coeficiente de tensão superficial entre água e óleo era necessário. De acordo com o trabalho de Adams e Masutani (2001), o valor de coeficiente de tensão superficial entre a água e o óleo que eles utilizaram em seus experimentos foi de 25\*10<sup>-3</sup> N m<sup>-1</sup>. Esse valor foi aplicado para todas as simulações para esse domínio.

Quanto às condições de contorno, o óleo entra no domínio, já preenchido com água, com vazão constante. Foi especificado um diâmetro de gota de óleo constante e igual a 2 mm, que é o próprio diâmetro do orifício. No entanto, para se testar a influência desta variável no problema, realizou-se uma simulação do caso lagrangeano com tamanho de gota igual a 0,5 mm.

Todas as paredes da malha, incluindo a sua base, tiveram condições em que nenhum material pode sair nem entrar no domínio. No entanto, as velocidades dos materiais nas paredes não são nulas (condição de escorregamento), enquanto que na base estas são nulas (condição de aderência). Já para o topo da malha, configurou-se a opção em que todos os materiais podem deixar ou entrar no domínio, além de matematicamente considerar um valor de pressão igual ao da pressão hidrostática da Equação 4.1. No caso das simulações, o óleo sairá pelo topo o que garantirá que seu balanço de massa se mantenha nulo durante a simulação. Já a água poderá sair e voltar para que seu balanço de massa também seja nulo.

### 4.1.2.1. Abordagem Lagrangeana

Para o teste de malha, considerou-se uma simulação utilizada como base com um modelo lagrangeano para o óleo, em que o comportamento de cada partícula é calculado pela Equação 3.64, considerando cada partícula como uma amostra de várias outras que possuem, exatamente, o mesmo comportamento. Nessa configuração, forças como forças viscosas, forças de empuxo e forças de massa virtual de pressão podem ser incluídas na equação de movimento das partículas. A água, fase contínua, foi tratada pela forma euleriana, regida pela equação de Navier-Stokes.

O caso lagrangeano aborda que o óleo é uma dispersão em gotas, e as equações de conservação de massa, momento e energia serão aplicadas para cada uma dessas gotas.

A simulação foi configurada como estacionária e a velocidade de entrada do óleo foi especificada igual a 0,966 m/s, que é a maior velocidade aplicada no experimento de Masutani e Adams (2001). De acordo com Cloete *et al* (2009), uma modelagem lagrangeana poderia ser usada para vazões de óleo até 450 l/s, no caso dessa simulação com uma velocidade de 0,966 m/s passando por um orifício de 2 mm de diâmetro, a vazão de óleo seria de aproximadamente 3 ml/s. Por isso, nessas condições é possível sem perda de precisão utilizar a modelagem lagrangeana para este tipo de vazamento.

Para a abordagem lagrangeana, é preciso setar um número finito de gotas que entrarão no domínio. Para o caso base lagrangeano e a maioria das simulações lagrangeanas, o número de gotas que entram no domínio é 1000 para representar uma amostra do que foi testado pelos autores do experimento reproduzido, Adams e Masutani. No entanto, para se testar o efeito dessa variável no problema, fez-se uma simulação com número de partículas igual a 10000.

O modelo de turbulência adotado foi o modelo k- $\varepsilon$ , por uma questão de compromisso entre resultado e estabilidade-robustez, uma vez que a fase contínua está, inicialmente, parada e seu movimento deve-se apenas à passagem da fase dispersa.

Na simulação existe a interação de momento entre a fase dispersa e a fase contínua o que garante que a água também afete o movimento das gotas de óleo. Essa opção é necessária, pois a água tem papel importante no movimento das gotas de óleo, devido ao seu arraste para dentro da pluma de óleo (CROWE *et al*, 2012).

Para essa simulação, foi considerada a força de arraste, entre a água e o óleo do modelo de Ishii e Zuber (DREW e PASSMAN, 1999). Mesmo em situações estacionárias, os efeitos da força de arraste podem ser observados. No caso das gotas de óleo, a força de arraste será proporcional à velocidade relativa entre óleo e a água, podendo ser descrita pela Equação 3.65.

Além da força de arraste, foi considerada nessa simulação a força de dispersão turbulenta, pois ela gera uma maior dispersão das partículas presentes no escoamento (DREW e PASSMAN, 1999). E é esperado que pelos efeitos turbulentos, as gotas de óleo se dispersem formando uma pequena pluma de óleo, de acordo com o experimento de Adams e Masutani (2001).

Foi utilizado um esquema de advecção de segunda ordem e o critério de convergência empregado foi resíduo RSM (root mean square) menor que 10<sup>-5</sup> ou 15.000 iterações.

Com a configuração descrita até aqui, realizou-se a simulação para as três malhas construídas, para a realização do teste de malha. Após o teste de malha, foi possível realizar as demais simulações utilizando uma mesma malha, que não interfira nos resultados das simulações.

A Tabela 4.2 sumariza a configuração da simulação *Base*:

Tabela 4.2 – Configuração da simulação Base

Simulação Base	
Modo da simulação	Estacionária
Abordagem	Lagrangeana
Modelo de Turbulência	k-ε
Tipo de interação entre fases	Acoplada de duas vias
Força de Arraste	Ishii e Zuber
Força de dispersão turbulenta	Incluída
Número de partículas	1000
Número de iterações	15.000
Tipo do resíduo	RMS
Tamanho do resíduo	10 <sup>-5</sup>

Com a simulação base realizada, foi possível realizar outras simulações para a análise da inclusão de novas forças ou a utilização de outros modelos de turbulência. Por isso, considerou-se pela Tabela 4.3 as seguintes simulações:

Tabela 4.3 – Simulações da abordagem lagrangeana

Simulações		
Base	Caso Base (Tabela 4.2)	
TQ1	Base + força de massa virtual	
TQ2	Base + LRR	
TQ3	Base + SSG	
TQ4	Base + LLR + força de massa virtual	
TQ5	Base + SSG + força de massa virtual	
TQ6	Base+Tamanho de gota (0,5 mm)	
TQ7	Base+Número de partículas (10000)	

A simulação TQ1 considera, além das forças da simulação base, a força de massa virtual. A força de massa virtual é aplicável quando um corpo, imerso em um fluido, acelera ou desacelera provocando a desaceleração ou a aceleração de parte do fluido ao redor deste corpo. Isso resulta em uma força de interação entre o corpo e o fluido. É esperado que esse efeito acontecesse, já que uma gota pode interferir na acelaração de outras que estejam próximas dela.

A Equação 3.76 mostra a força de massa virtual para uma partícula esférica submersa em um fluido contínuo.

Já a simulação TQ2 considera a simulação base utilizando o modelo de turbulência LRR (LAUNDER *et al*,1975) no lugar do k- $\varepsilon$ . O modelo LRR utiliza uma correlação linear para o termo de redistribuição de energia.

Na realidade, os modelos de tensores de Reynolds são mais precisos para escoamentos envolvendo transportes turbulentos e efeitos de não equilíbrio do que os modelos de viscosidade turbulenta, como o k- $\varepsilon$ .

Além disso, os modelos de tensores Reynolds evitam a isotropia das variáveis flutuantes e podem ser mais precisos para escoamentos envolvendo empuxo e peso. No caso do óleo e da água, a anisotropia pode ser importante.

A simulação TQ3 é similar à TQ2, porém com o modelo SSG (SPEZIALE *et al*, 1991) no lugar do modelo LRR para a turbulência. Para se identificar a influência de um modelo mais complexo, foi escolhido o SSG, pois ele considera termos quadráticos para a correlação da redistribuição de energia,  $\phi_{ij}$ .

As simulações TQ4 e TQ5 foram realizadas para se identificar a influência de ambas as considerações da força de massa virtual e os modelos de turbulência mais precisos, LRR e SSG, na simulação base lagrangeana.

As simulações TQ6 e TQ7 exploraram a influência das variáveis tamanho de gota e número de partículas, respectivamente. De acordo com Cloete *et al* (2009), essas variáveis são significativas para a representatibilidade do problema dos vazamentos.

# 4.1.2.2. Abordagem Euleriana

As simulações a seguir, diferentemente do caso base lagrangeano, utilizou uma abordagem euleriana para modelar a fase dispersa e utilizando a mesma malha que apresentou resultado satisfatório no teste de malha no caso lagrangeano. Dessa forma, as Equações 3.44 e 3.54 foram utilizadas para descrever a pluma de óleo.

As simulações foram especificadas como estacionárias com velocidade de entrada do óleo igual a 0,966 m/s (maior velocidade do experimento de Masutani e Adams (2001)) e foi utilizado o modelo de turbulência k- $\varepsilon$ .

A interface entre o óleo e a água é modelada pelo modelo de partícula e a transferência de turbulência entre água e óleo é realizada pelo modelo de Sato e Sekogushi (1975).

Não se pensou em utilizar o modelo VOF para a interface água/óleo, pois este necessita de uma malha muito refinada para representar a dispersão do óleo de acordo com Cloete *et al* (2009).

As condições de contorno e as condições de convergência das simulações de abordagem euleriana foram exatamente as mesmas da simulação base lagrangeana. Assim a simulação base euleriana pode ser sumarizada pela Tabela 4.4:

Tabela 4.4 – Configuração da simulação base euleriana

Simulação base euleriana		
Modo da simulação	Estacionária	
Abordagem	Euleriana	
Turbulência	k-ε	
Força de Arraste	Ishii e Zuber	
Transferência na Interface	Modelo de Partlícula	
Número de iterações	15.000	
Tipo do resíduo	RMS	
Tamanho do resíduo	10 <sup>-5</sup>	

Com a simulação base euleriana realizada, pôde-se realizar outras 3 simulações eulerianas para servirem de comparação com o caso base euleriano. A Tabela 4.5 apresenta as demais simulações eulerianas, além do caso base euleriano:

Tabela 4.5 – Simulações Eulerianas

Simulações Eulerianas		
TQ6	Euleriana Base	
TQ7	Euleriana Base + força de sustentação	
TQ8	Euleriana Base + força de massa virtual	
TQ9	Euleriana Base + força de sustentação + força de massa virtual	
TQ10	Eulerianan Base + Diâmetro de gota (0,5 mm)	

Já a força de sustentação é exclusiva da abordagem euleriana, por isso ela ter sido utilizada apenas nessa abordagem. E esta foi considera, pois ela possível de aparecer em vazamentos de um líquido em outro líquido, de acordo com Skejetne e Olsen (2012).

Assim como foi feito para a abordagem lagrangeana em se testar a influência do tamanho das gotas de óleo, a simulação TQ10 utiliza a configuração da simulação euleriana base, mas com tamanho de partícula igual a 0,5 mm.

# 4.1.2.3. Simulação Transiente

A simulação transiente tem o propósito de verificar se a variável tempo tem influência nos resultados. É muito importante verificar essa questão, pois escoamentos multifásicos são intrinsicamente transientes (LINDERSEN, 2013).

Assim, fez-se uma simulação transiente com a mesma configuração que a da simulação base de abordagem lagrangeana. Foi definido um tempo de simulação de 3.6 s, que é um tempo suficientemente grande para que o óleo saia do domínio, de acordo com a velocidade inicial do mesmo e com o tamanho do domínio. O passo de tempo utilizado foi 0,005 s e testaram-se passos de 0,0025 s e 0,0075 s de modo a garantir que os resultados são independentes do passo de tempo.

### 4.1.2.4. Reprodução dos experimentos de Adams e Masutani (2001)

Para efeito de comparação, foram realizados mais 4 simulações para a reprodução do experimento de Adams e Masutani (2001). Essas simulações utilizaram a mesma configuração da simulação base lagrangeana, já que esta apresentou os melhores resultados em relação à comparação com os experimentos de vazamento de óleo de Adams e Masutani (2001).

No entanto, elas se diferenciam na vazão de entrada de óleo no sistema, de modo a simular todas as velocidades do experimento, 0,716 m/s, 0,435 m/s, 0,340 m/s e 0,281 m/s.

# 4.2. Simulação de vazamentode óleo e gás em grande escala

As simulações em grande escala foram realizadas utilizando óleo, água e gás, com a configuração que mostrou os resultados mais próximos do experimento real de Adams e Masutani (2001), a simulação base lagrangeana. A água e o óleo são modelados de acordo com a Tabela 4.2. Para efeito de comparação de resultados, utilizaram-se as condições de contorno para essa simulação, as condições do experimento *Deepspill* do grupo SINTEF (JOHANSEN, 2003) que considera um gás no vazamento, além de água e óleo.

O gás foi considerado também como na modelagem da Tabela 4.2, pois de acordo com o trabalho de Cloete *et al* (2009) o gás metano (no caso do experimento SINTEF) pode ser modelado por uma abordagem lagrangeana se sua vazão de lançamento não for muito grande, até 450 l/s. No caso do experimento SINTEF, a vazão de gás é de 400 l/s, que está dentro desse limite.

Portanto, água, óleo e gás serão modelados conforme a simulação base lagrangeana da Tabela 4.2. Além disso, as condições do experimento como pressão na coluna de água, vazões de entrada do óleo e do gás, corrente marítima e propriedades do gás e do óleo serão usadas nas simulações.

A Tabela 2.3 sumariza as condições do experimento SINTEF utilizadas na simulação de óleo e gás.

Algumas das medições desse experimento real que podem ser consideradas na presente dissertação estão apresentadas na Tabela 4.6:

Tabela 4.6 – Resultados encontrados pelo experimento do grupo SINTEF

SINTEF	Diâmetros medidos	Velocidades terminais
Óleo	1 a 6 mm	14 a 15 cm/s
Gás	1 a 6 mm	30 cm/s

No trabalho do grupo SINTEF é apresentado que os diâmetros das gotas e das bolhas e suas respectivas velocidades terminais foram medidas ao longo da profundidade marítima. Foi constatado pelos autores que os diâmetros, tanto das gotas de óleo quanto das bolhas de gás mediam ao longo de toda a profundidade do experimento de 1 a 6 mm.

#### 4.2.1. Geometria e Malha

Inicialmente, construiu-se uma geometria que pudesse representar o experimento real do grupo SINTEF, considerando os 100 m finais da profundidade marítima de 844 m. Em outras palavras, uma geometria com 100 m de altura (coordenada z) na forma de um paralelepípedo com dimensões de largura (coordenada y) de 18 m e comprimento (coordenada x) de 30 m e contendo um pequeno orifício de 0,12 m de diâmetro por onde entrarão óleo e gás. Acredita-se que essa geometria seja de um tamanho suficiente para gerar resultados que possam ser comparados com os do experimento SINTEF.

A Figura 4.2 apresenta a geometria inicial das simulações em grande escala e define regiões que serão os contornos da malha. Definindo cada região, tem-se que o Orifício é o próprio orifício, o Topo é o retângulo com z positivo, o Chão é o retângulo com z nulo, a Lateral 1 é com x nulo, Lateral 2 com x positivo, Lateral 3 com y positivo e Lateral 4 com y nulo.

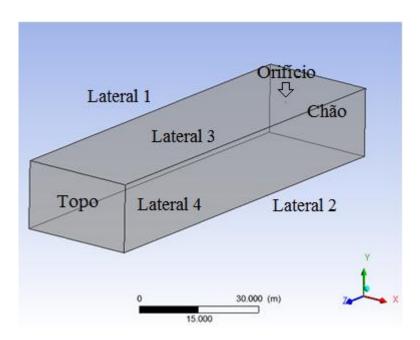


Figura 4.2 – Geometria inicial da simulação deitada

Já a figura 4.3 apresenta a base da geometria, mostrando onde se encontra o orifício de 0,12 m de diâmetro e por onde entra a corrente marítima no sentido crescente da coordenada x. Em todas as simulações em grande escala, a corrente entrará pela Lateral 1.

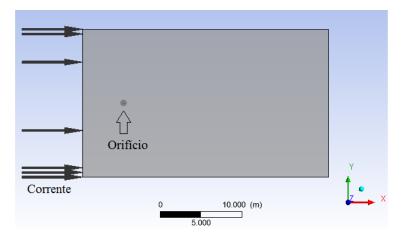


Figura 4.3 – Vista da base da geometria mostrando entram a corrente marítima e o orifício

Com a geometria definida, pôde-se construir a malha da simulação. Esta foi construída pelo ANSYS ICEM.

A Figura 4.4 mostra a vista da base da malha em grande escala construída.

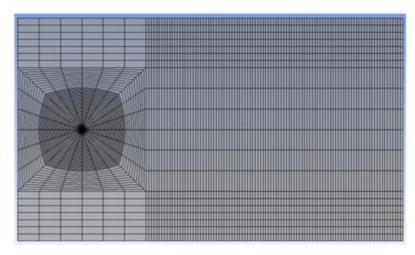


Figura 4.4 – Vista da base da malha

A Figura 4.4 mostra a visão da base da malha, em que existe um grande refino, justamente na região do orifício.

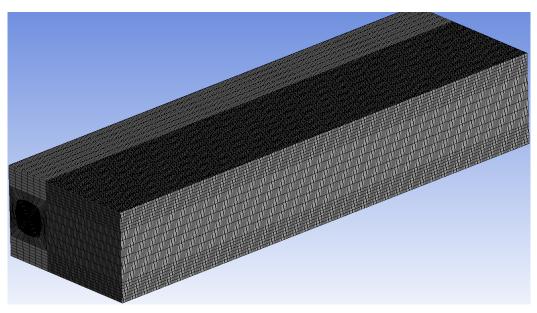


Figura 4.5 – Malha em perspectiva na simulação em grande escala

Dessa forma, foram construídas três malhas para a realização do teste de malha. A malha 1, com 2 milhões de nós, a malha 2, com 3 milhões, e a malha 3 com 4,5 milhões de nós. Todas as malhas apresentaram parâmetros de qualidade de malha ideais.

Com o teste de malha realizado, foi possível reduzir o domínio da simulação, pois os resultados apresentados possibilitaram essa modificação.

Assim, uma nova geometria e malha puderam ser construídas. Essa nova geometria foi construída de acordo com o valor do raio que a pluma de gás apresentou (raio R = 5,75 m). Essa nova geometria apresenta as mesmas regiões e o mesmo formato da geometria da Figura 4.2, contudo com dimensões um pouco reduzidas, 28,75 m de comprimento, 23 m de largura e os mesmos 100 m de altura.

Essa nova geometria foi definida de acordo com a Figura 4.10 de acordo com o raio que a pluma de gás apresentou nos resultados das malhas iniciais.

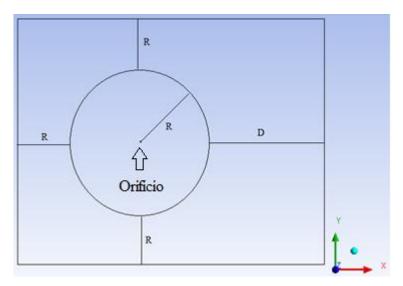


Figura 4.6 - Vista da base da nova geometria (R = 5,75 m e D = 11,5 m)

A partir dessa nova geometria, uma nova malha foi construída:

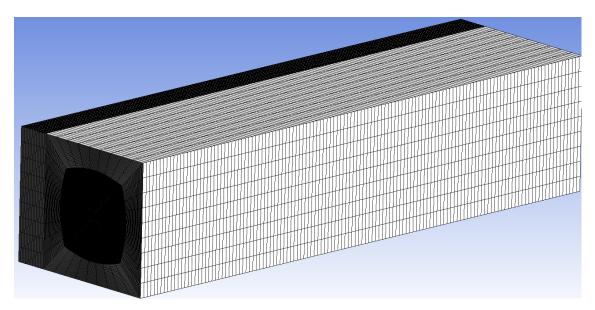


Figura 4.7 – Malha de geometria reduzida

Assim, foram construídas três malhas para um novo teste de malha, a malha 1` de 627 mil nós, malha 2` de 941 mil nós e malha 3`de 1,4 milhões de nós. Pela Figura 4.7, nota-se que o refino na região do orifício (*z* nulo) foi maior do que as malhas iniciais.

Com o teste de malha realizado, com os resultados apresentado por essa malha e para realizar uma nova análise dos resultados sem a presença da corrente marítima, o domínio mais uma vez foi reduzido, utilizando o valor de  $R=5,75\,$ m, ainda como critério.

No entanto, dessa vez não foi criado uma nova geometria e sim uma nova malha foi criada diretamente da malha 2`de 941 mil nós.

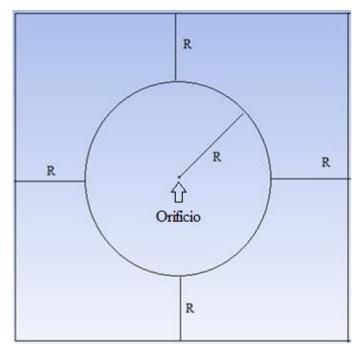


Figura 4.8 – Nova malha construída a partir da malha 2´

A Figura 4.8 representa o critério de construção da nova malha de dimensões de 23 m de largura e de comprimento e 100 m de altura. Essa nova malha apresentada na Figura 4.9, possui 791 mil nós e apresenta as mesmas regiões que as outras malhas construídas anteriormente.

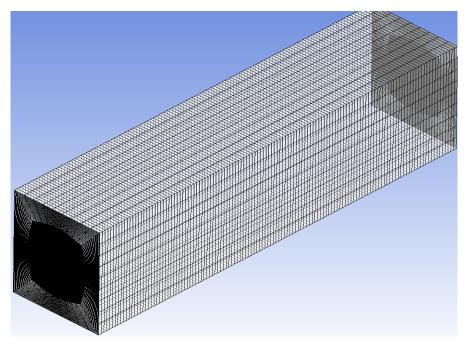


Figura 4.9 – Malha de 791 mil nós

### 4.2.2. As simulações

Nesta seção serão discutidas as condições de contorno que todas as simulações utilizaram envolvendo o óleo e o gás em grande escala. Primeiramente, consideraram-se os três materiais água, óleo e gás do experimento do grupo SINTEF, conforme a Tabela 2.3.

As simulações nessa escala utilizaram a configuração simulação lagrangeana base (Tabela 4.2), pois foi a que apresentou os melhores resultados nas simulações do tanque, envolvendo apenas a água e o óleo.

Para o gás, foi utilizada a mesma modelagem que para o óleo (abordagem lagrangeana), com exceção, apenas, da força de arraste que foi utilizado o modelo de Schiller e Naumann (MARCHISIO e FOX, 2013). Para essa abordagem, o número de partículas de óleo e gás deve ser especificado. Foram utilizadas amostras de 1000 gotas de óleo e de 1500 bolhas de gás para que o custo computacional das simulações não fosse muito grande.

Para a primeira simulação que serviu de teste para a malha da Figura 4.5, se considerou como condições de contorno nas superfícies da malha, as regiões definidas na Figura 4.2. Tem-se que a região do Oríficio é uma condição de entrada por onde óleo e gás entram com velocidades constantes da Tabela 2.3 e tamanhos de diâmetro constantes, nesse caso como metade do diâmetro do orifício, 6 cm. Já a região Lateral 1 é uma condição de entrada em que apenas corrente de água entra no domínio com velocidade constante da Tabela 2.3. A região Lateral 2 foi considerado como saída de materiais (*openings*), sendo que por essa região, apenas a água pode sair e entrar (caso aconteça). Nessa região foi definida uma pressão hidrostática referente aos últimos 100 m de uma profundidade marítima total de 844 m. A Equação 4.2 define essa pressão:

$$p_{hidráulica} = \rho_c g(844 - z) \tag{4.2}$$

Onde z é a coordenada cartesiana, que nesse caso representa a altura do domínio variando de 0 a 100 m do chão da malha ao topo.

A região Chão é definida como uma condição em que todos os materiais não podem nem sair nem voltar por esta. Além disso, as velocidades dos materiais nessa região são nulas (condição de aderência). Já a região Topo é uma condição de saída definida da mesma forma que a da Lateral 2, onde os materiais saem e existe uma pressão hidráulica (Equação 4.2). A

região Lateral 3 e Lateral 4 são, para essa primeira simulação, específicadas com condições fechadas em que nenhum material pode voltar e as velocidades dos mesmos nessas regiões não são nulas (condição de escorregamento).

Foi utilizado um esquema de advecção de segunda ordem e o critério de convergência empregado foi resíduo RSM (root mean square) menor que  $10^{-5}$  ou 15.000 iterações para todas as simulações desta seção.

A Tabela 4.7 sumariza essa simulação inicial de teste malha:

Tabela 4.7 – Simulação de teste de malha para as malhas da Figura 4.5

Simulação 1				
Modelagem	Simulação lagrangeana base (Tabela 4.2), gás com abordagem lagrangeana e força de arraste no gás Schiller e Naumann			
Malha	Figura 4.5			
Tamanho de Partícula	Constante e igual a 6 cm (diâmetro)			
Orificio	Entrada de óleo e gás (Tabela 2.3)			
Lateral 1 Entrada de corrente marítima (Tabela 4.6)				
Lateral 2 Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)				
Lateral 3	Sem saída de materiais e velocidades não nulas de materiais			
Lateral 4	Sem saída de materiais e velocidades não nulas de materiais			
Торо	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Chão	Sem saída de materiais e velocidades nulas de materiais			

Como dito na seção da geometria e da malha das simulações em grande escala, o domínio foi reduzido para as malhas da Figura 4.7 e uma nova simulação foi rodada como teste de malha para esse novo domínio utilizando a configuração da Tabela 4.9 a seguir:

Tabela 4.8 – Simulação de teste de malha para as malhas da Figura 4.7

Simulação 2				
Modelagem	Simulação lagrangeana base (Tabela 4.2), gás com abordagem lagrangeana e força de arraste no gás Schiller e Naumann			
Malha	Figura 4.7			
Tamanho de Partícula	Constante e igual a 6 cm (diâmetro)			
Orificio	Entrada de óleo e gás (Tabela 2.3)			
Lateral 1 Entrada de corrente marítima (Tabela 4.6)				
Lateral 2 Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)				
Lateral 3	Sem sáida de materiais e velocidades não nulas de materiais			
Lateral 4	Sem sáida de materiais e velocidades não nulas de materiais			
Торо	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Chão	Sem sáida de materiais e velocidades nulas de materiais			

Procedendo nas simulações, com a malha da Figura 4.7 testada, a malha de 941 mil nós desse conjunto de malhas pôde ser utilizada nas demais simulações que se seguem nessa seção.

De acordo com os resultados das simulações das Tabelas 4.7 e 4.8, a próxima simulação foi realizada com o intuito de se analisar o efeito das condições de contorno das regiões Lateral 3 e 4 ao passarem a ser condições de saída ou entrada (*Opening*) como as condições da região Lateral 2.

Assim, a Tabela 4.9 sumariza essa próxima simulação:

Tabela 4.9 – Simulação 3

Simulação 3				
Modelagem Simulação lagrangeana base (Tabela 4.2), gás com aborda lagrangeana e força de arraste no gás Schiller e Nauman				
Malha	Figura 4.7, malha de 941 mil nós			
Tamanho de Partícula	Constante e igual a 6 cm (diâmetro)			
Orificio Entrada de óleo e gás (Tabela 2.3)				
Lateral 1 Entrada de corrente marítima (Tabela 4.6)				
Lateral 2 Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)				
Lateral 3	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Lateral 4	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Торо	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Chão	Sem sáida de materiais e velocidades nulas de materiais			

De acordo com os resultados apresentados na simulação 3 da Tabela 4.9, considerouse uma nova simulação para analisar a influência do sentido da corrente nos resultados. Assim, essa nova simulação inverteu as condições das regiões das Lateral 1 e 2 como é apresentado na Tabela 4.10 e utilizou a malha de 941 mil nós da Figura 4.11.

Tabela 4.10 – Simulação 4

Simulação 4				
Modelagem Simulação lagrangeana base (Tabela 4.2), gás com abordag lagrangeana e força de arraste no gás Schiller e Naumani				
Malha	Figura 4.7, malha de 941 mil nós			
Tamanho de Partícula	Constante e igual a 6 cm (diâmetro)			
Orificio	Entrada de óleo e gás (Tabela 2.3)			
Lateral 1 Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)				
Lateral 2	Entrada de corrente marítima (Tabela 2.3)			
Lateral 3	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Lateral 4	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Торо	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Chão	Sem sáida de materiais e velocidades nulas de materiais			

Por fim, com todos os resultados analisados, ainda se dividiu mais o domínio da simulação, cortando a malha de 941 mil nós para a malha de 791 mil nós da Figura 4.9. Com essa nova malha, as próximas simulações serviram para analisar o efeito do tamanho das partículas de óleo e gás na modelagem e todas sem a presença da corrente marítima.

Assim, definiram-se mais 5 simulações com a malha de 791 mil nós, utilizando 5 tamanhos constantes em cada simulação. Os diâmetros das partículas utilizados em cada uma das simulações foram 6 cm, 1 cm, 6 mm, 3 mm e 1 mm para ambos óleo e gás. A Tabela 4.12 define essas simulações:

Tabela 4.11 – Simulações variando o tamanho das partículas de óleo e gás

Simulação 5				
Modelagem	Simulação lagrangeana base (Tabela 4.2), gás com abordagem			
	lagrangeana e força de arraste no gás Schiller e Naumann			
Malha	Figura 4.9, malha de 791 mil nós			
Tamanho de Partícula	Constante e igual a a) 6 cm b) 1 cm c) 6 mm d) 3 mm e) 1 mm (diâmetro)			
Orificio Entrada de óleo e gás (Tabela 2.3)				
Lateral 1	Lateral 1 Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Lateral 2	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Lateral 3	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Lateral 4	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Торо	Saída de Materiais e Pressão (Equação 4.14)			
Chão	Sem sáida de materiais e velocidades nulas de materiais			

# 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados de cada simulação serão discutidos a seguir. Os resultados das simulações do tanque com água e óleo foram comparados com os resultados do experimento de Adams e Masutani (2001) para identificar qual modelagem mostrou-se mais adequada para representar o fenômeno do vazamento. Posteriormente, essa configuração mais ideal foi utilizada para simular um vazamento de óleo e gás em uma profundidade de 100 m.

### 5.1. Resultados das simulações do tanque com água e óleo

Os resultados do teste de malha das simulações no tanque, bem como de todas as demais simulações neste domínio estão apresentados abaixo. Todas as simulações nessa escala convergiram com resíduo RMS menor que  $10^{-5}$  e, inclusive, com resíduo máximo também menor que  $10^{-5}$ , chegando nesse valor em menos de 15000 iterações. A Figura A1, no Apêndice A, apresenta o aspecto dos resíduos RMS e máximo em todas as simulações nos casos na escala do tanque com água.

## 5.1.1 Abordagem Lagrangeana

Os resultados referentes às simulações que utilizaram a abordagem lagrangeana estão apresentados abaixo. De modo a melhor analisar e comparar os resultados do teste de malha, cinco linhas foram traçadas em alturas diferentes da pluma, conforme ilustrado na Figura 5.1. As alturas de cada linha, a partir da base do tanque, foram de: 0,05 m para a linha 1, de 0,1 m para a linha 2, de 0,15 m para linha 3, de 0,20 m para a linha 4 e de 0,25 m para a linha 5.

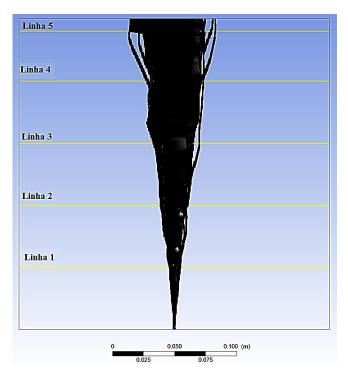


Figura 5.1 – Linhas traçadas na pluma de óleo para análise dos resultados. Pluma obtida com a simulação base (Isoconcentração de 10<sup>-3</sup>) e malha 2 (500 mil nós).

O perfil da pluma apresentado na Figura 5.1 é similar para todas as três malhas testadas. Dessa forma, para validar o teste de malha, foi traçado o perfil da velocidade de ascensão da pluma em cada uma das alturas indicadas na Figura 5.1. Os resultados estão na Figura 5.2, onde a coordenada x representa a largura do domínio, sendo o centro (x=0) o local onde se encontra o orifício.

Para o caso base lagrangeano, a Figura 5.2 apresenta as trajetórias das gotas de óleo. As trajetórias das gotas de óleo pode ser uma representação melhor da pluma de óleo do que as isoconcentrações. No entanto, a Figura 5.2 mostra que a isoconcentração de óleo representa a pluma de óleo de forma similar às trajetórias das gotas. De fato, utilizando as duas funções no *software CFD Post*, estas se sobreporam, mostrando que a pluma de óleo poderia ser representada pela isoconcentração de 10<sup>-3</sup> de fração volumétrica de óleo.

Com efeito, esse resultado foi o mesmo para as demais soluções dos casos lagrangeanos. Dessa maneira, os demais casos lagrangeanos poderam ser representados pelas isoconcentrações de 10<sup>-3</sup>, sem perda de representatividade da pluma.

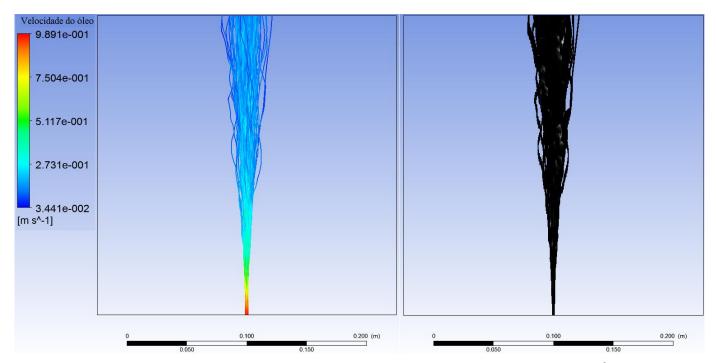


Figura 5.2 – Comparação entre a trajetória das gotas e a isoconcentração de óleo de  $10^{-3}$ .

Percebe-se na Figura 5.3 que, mesmo a *malha 1*, com 250 mil nós, já apresenta resultados bastante próximos das duas outras malhas mais refinadas. No entanto, há uma clara maior concordância entre os resultados das *malhas 2* e *3*, principalmente no que tange aos picos e regiões com baixa concentração de óleo. Portanto, definiu-se como a malha mais indicada a ser utilizada para as demais simulações, a *malha 2*, de 500 mil nós.

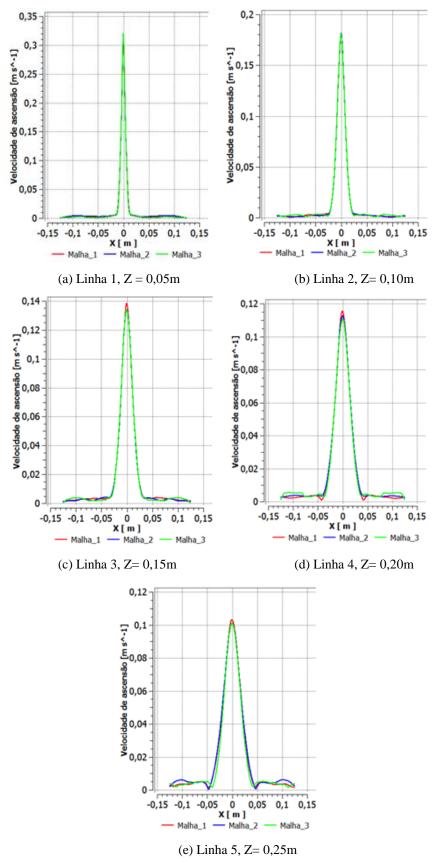


Figura 5.3 – Perfil de velocidade de ascensão da pluma nas (a) linha 1 (Z= 0,05m), (b) linha 2 (Z= 0,10m), (c) linha 3 (Z=0,15m), (d) linha 4 (Z=0,20m) e (e) linha 5 (Z=0,25m), conforme indicado na Figura 5.1.

Na Figura 5.4 esta apresentada a vista frontal das plumas obtidas com cada uma das modelagens definidas na Tabela 4.3 que utilizaram a abordagem lagrangeana para simular a injeção de óleo no tanque. Todos os resultados mostrados foram obtidos com a malha 2, de 500 mil nós com a maior velocidade de injeção do óleo (0,966 m/s), dentre as utilizadas por Adams e Masutani (2001).

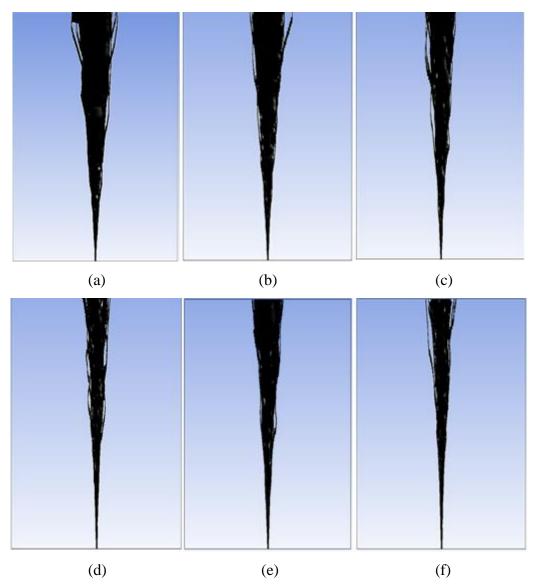


Figura 5.4 – Vista frontal da pluma de óleo obtida com as simulações (Isoconcentração de 10<sup>-3</sup>) (a) Base, (b) TQ1 – Base+MV, (c) TQ2 – Base, com LRR, (d) TQ3 – Base, com SSG, (e) TQ4 – Base, com LRR + MV e (f) TQ5 – Base, com SSG + MV.

Enquanto a Figura 5.4 apresenta comparações qualitativas entre as diferentes modelagens testadas, nas Tabelas 5.1 e 5.2, apresenta-se uma comparação quantitativa dos

resultados. Na Tabela 5.1, compara-se a largura da pluma em diferentes alturas da mesma, obtidas com as simulações e no experimento de Adams e Masutani (2001). Na Tabela 5.2, apresenta-se o erro relativo, tomando como valores corretos, os dados experimentais. Vale ressaltar que as alturas indicadas nas Tabelas 5.1 e 5.2 não são as mesmas da Figura 5.1, pois, com os resultados apresentados por Adams e Masutani (2001), consegue-se comparar a largura da pluma apenas até uma altura de 15 cm acima da base do tanque.

Tabela 5.1 – Comparação com os resultados de Adams e Masutani (2001) para a largura da pluma de óleo em diferentes alturas obtidas com as simulações CFD e abordagem lagrangeana.

Larguras (cm)							
Alturas (cm)	Experimento	Simulação Base	TQ1 (Base+MV)	TQ2 (Base+LRR)	TQ3 (Base+SSG)	TQ4 (Base+LRR+MV)	TQ5 (Base+SSG+MV)
h1 = 1,25	0,55	0,34	0,34	0,34	0,34	0,25	0,25
h2 = 2,5	1,1	0,55	0,42	0,42	0,34	0,42	0,34
h3 = 5,0	2,2	1	0,93	0,84	0,63	0,67	0,51
h4 = 10	4,2	2,5	2,1	1,8	1,3	1,4	1,2
h5 = 15	5,4	3,4	3	3	2,4	2,3	2,1

Tabela 5.2 – Erro relativo das simulações com base na Tabela 5.1

Erros relativos (%)						
Alturas (cm)	Simulação Base	TQ1 (Base+MV)	TQ2 (Base+LRR)	TQ3 (Base+SSG)	TQ4 (Base+LRR+MV)	TQ5 (Base+SSG+MV)
h1 = 1,25	38,18	38,18	38,18	38,18	54,55	54,55
h2 = 2,5	50,00	61,82	61,82	69,09	61,82	69,09
h3 = 5,0	54,55	57,73	61,82	71,36	69,55	76,82
h4 = 10	40,48	50,00	57,14	69,05	66,67	71,43
h5 = 15	37,04	44,44	44,44	55,56	57,41	61,11

Analisando a Figuras 5.4 e as Tabelas 5.1 e 5.2, pode-se ver que a modelagem base, Figura 5.4a, com o modelo de turbulência k-e e sem força de massa virtual (demais especificações na Tabela 4.2), apresentou maior abertura da pluma, se aproximando mais dos experimentos de Adams e Masutani (2001) e, portanto, mostrou-se a modelagem mais adequada para o caso.

O efeito de introduzir a força de massa virtual, Figura 5.4b, produziu um ligeiro estreitamento da pluma, mais claramente visto nas Tabelas 5.1 e 5.2, revelando que esta força contribuiu para acelerar mais a ascensão da pluma, o que parece não condizer com o problema

que se procura reproduzir. Assim, os efeitos da força de massa virtual não parecem contribuir na modelagem, não justificando sua inclusão.

O efeito de introduzir modelos de turbulência mais complexos, como os dos tensores de Reynolds, também não se mostrou uma opção vantajosa. As plumas obtidas com esses modelos (LRR - Figura 5.4c; SSG - Figura 5.4d) se mostaram claramente mais estreitas que as obtidas com o modelo k-e, como se pode comprovar nas Tabelas 5.1 e 5.2. E ainda, pode-se observar que, o modelo SSG, geralmente mais adequado para escoamentos fortemente cisalhantes, foi o que apresentou a pluma mais estreita. Assim, pode-se observar que quanto mais o modelo tende a capturar efeitos de anisotropia (SSG > LRR > k-e), mais eles tendem a acelerar excessivamente a pluma.

Ao introduzir a força de massa virtual com os modelos dos tensores de Reynolds, mais uma vez a força de massa virtual tendeu a acelerar ainda mais a pluma, resultando em plumas ainda mais estreitas, como pode ser visto nas Tabelas 5.1 e 5.2 e nas Figuras 5.4e e 5.4f.

Já os resultados das simulações TQ6 e TQ7 são apresentados a seguir pelas Figuras 5.5 e 5.6, respectivamente. Observa-se que aumentando o número de partículas e diminuindo o tamanho das partículas de 2 mm para 0,5 mm, a largura da pluma aumentou em relação ao caso base lagrangeano, aproximando-se mais dos experimentos de Adams e Masutani (2001).

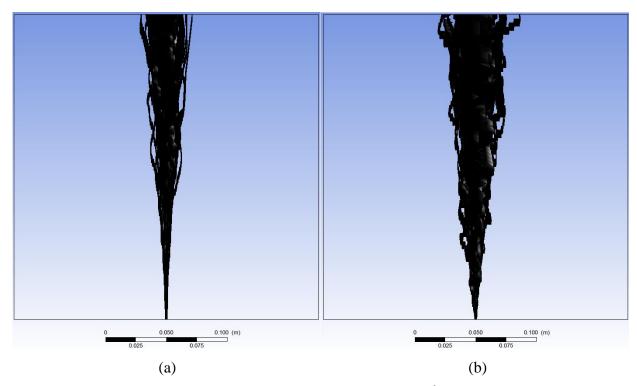


Figura 5.5 – Comparação da pluma de óleo para uma isoconcentração de 10<sup>-3</sup>. (a) Caso Base (b) TQ6- Caso base + Diâmetro de partícula igual a 0,5 mm.

Pelos resultados da Figura 5.5, percebe-se que com a diminuição do tamanho da gota de óleo, a pluma aumenta de largura. De fato, o tamanho da partícula de óleo é uma variável importante para a representação da dispersão da pluma. No entanto, pode-se notar na Figura 5.5b, que a malha originalmente utilizada parece grosseira, explicitando a necessidade de uma malha mais refinada para tamanhos menores de partícula, o que representa um ganho considerável de custo computacional.

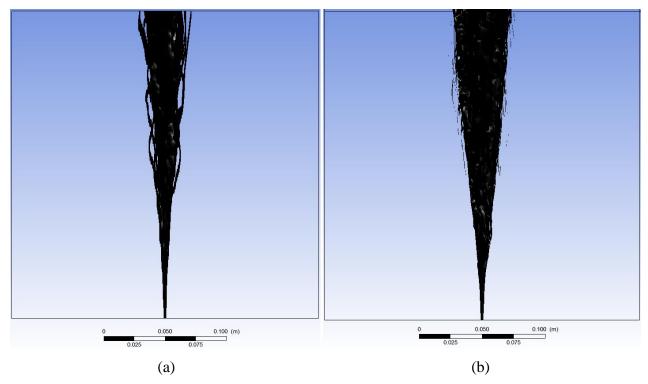


Figura 5.6 – Comparação da pluma de óleo para uma isoconcentração de 10<sup>-3</sup>. (a) Caso base (b) TQ7- Caso base+ Número de partículas igual a 10000

O número de partículas também influenciou no resultado do caso base lagrangeano, como o esperado, pois, com mais partículas, maior será a dispersão da pluma e, assim, maior o sua largura. Comparativamente com a simulação do caso base, esta simulação teve um custo computacional muito maior, levando a um mairo custo de tempo para convergir.

Tanto o diâmetro de partícula quanto o número de partículas são variáveis difíceis de serem definidas previamente às simulações. O ideal é que se tenha uma distribuição de tamanhos para cada caso e que o número de partículas seja estimado de acordo com a vazão de lançamento e o tempo de duração do vazamento.

### 5.1.2 Abordagem Euleriana

Os resultados referentes às simulações que utilizaram a abordagem lagrangeana estão apresentados abaixo.

Na Figura 5.7 está apresentada a vista frontal das plumas obtidas com cada uma das modelagens definidas na Tabela 4.4, que utilizaram a abordagem euleriana para simular a injeção de óleo no tanque. Todos os resultados mostrados foram obtidos com a malha 2, de

500 mil nós com a maior velocidade de injeção do óleo, dentre as utilizadas por Adams e Masutani (2001).

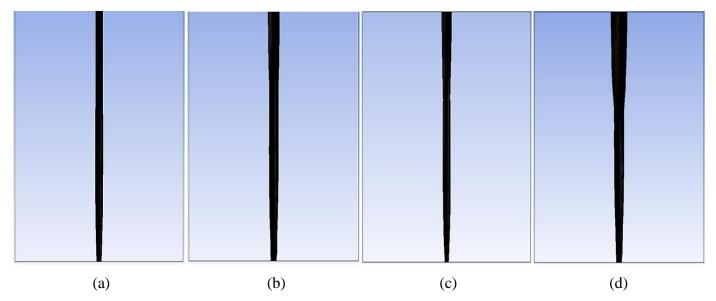


Figura 5.7 – Vista frontal da pluma de óleo obtida com as simulações (Isoconcentração de 10<sup>-3</sup>) (a) TQ6 – Euleriana Base, (b) TQ7 – Euleriana Base + FS, (c) TQ8 - Euleriana Base + MV e (d) TQ9 - Euleriana Base + FS + MV.

Conforme se pode notar na Figura 5.7, a modelagem euleriana não foi capaz de capturar o efeito de abertura da pluma, conforme as simulações lagrangeanas o fizeram. Claramente, nessas simulações, o vazamento de óleo sai como um jato e não há dispersão do óleo para a formação da pluma.

A inserção da força de sustentação, Figura 5.7b, causou uma leve abertura da pluma de óleo, porém ainda bastante aquém da abertura vista nos experimentos de Adams e Masutani (2001).

Como observado nas simulações lagrangeanas, pela Figura 5.7c, pode-se observar que a força de massa virtual parece tender a estreitar a pluma.

A combinação dos efeitos de força de sustentação e massa virtual, Figura 5.7d, favoreceram uma abertura da pluma e maior dispersão do óleo, porém esses resultados ainda estão, comparativamente, muito piores que aqueles obtidos com as simulações com abordagem lagrangeana.

Já a figura 5.8 apresenta o resultado da simulação TQ10 em comparação com a simulação do caso base euleriana.

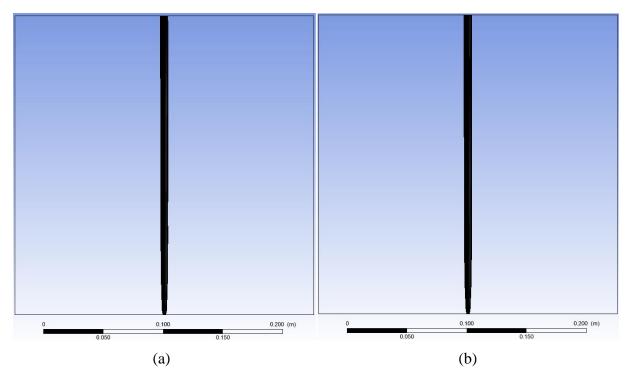


Figura 5.8 – Comparação entre os resultados do caso base euleriano (a) e (b) os resultados da simulação TQ10 (isoconcentração de  $10^{-3}$  de óleo)

Pela comparação entre os resultados, percebe-se que a diminuição do tamanho das partículas de óleo de 2 mm para 0,5 mm não alterou em nada o formato e o tamanho da pluma de óleo. A diminuição não aumentou o tamanho da pluma como ocorreu na abordagem lagrangeana. Esse fato pode ter ocorrido devido à abordagem euleriana ser capaz apenas de modelar a interface entre água e óleo e não modelar cada partícula individualmente.

Por causa dessa característica, a diminuição do tamanho de partícula não faz efeito no tamanho da pluma. De fato, de acordo com Cloete *et al* (2009) para simular uma pluma dispersa em gotas, a malha do domínio deveria ser extremamente refinada para captar cada parte do óleo de tamanho de 0,5 mm que representasse as gotas de óleo. E uma malha extremamente refinada levaria a um custo computacional muito grande e a dificuldades na convergência da solução.

A modelagem da Simulação Lagrangeana Base mostrou-se adequada para simular o experimento de Adams e Masutani (2001), porém o tamanho e o número de gotas deve ser ajustado de modo a aproximar os resultados entre simulação e experimentos. Assim, a modelagem descrita na Tabela 4.2, que caracteriza a chamada Simulação Lagrangeana Base, foi escolhida como a mais razoável para se prosseguir com o trabalho.

### 5.1.3. Simulação Transiente

Uma vez que a literatura traz trabalhos como os de Zhu *et al* (2014) e Cloete *et al* (2009) com as simulações transientes de vazamentos, resolveu-se testar a influência de se simular o vazamento de forma transiente.

Dessa forma, simulou-se o caso de maior velocidade de injeção de óleo, 0.966 m/s, com a *malha* 2, de 500 mil nós, com as configurações da Simulação Lagrangeana Base, (Tabela 4.2) que foi escolhida como a mais adequada, porém de forma transiente, por 3,6 segundos, tempo sufuciente para o óleo atravessar o tanque de óleo.

De modo a obter resultados independentes do passo de tempo, foram testados três passos tempos,  $10^{-3}$  s,  $5x10^{-4}$  e  $10^{-4}$  s. Identificou-se que a partir de  $5x10^{-4}$  s, os resultados não se alteravam mais de forma significativa e, assim, este foi o passo de tempo escolhido para apresentação dos resultados, mostrados na Figura 5.9, onde se pode ver a evolução da pluma de óleo com o tempo.

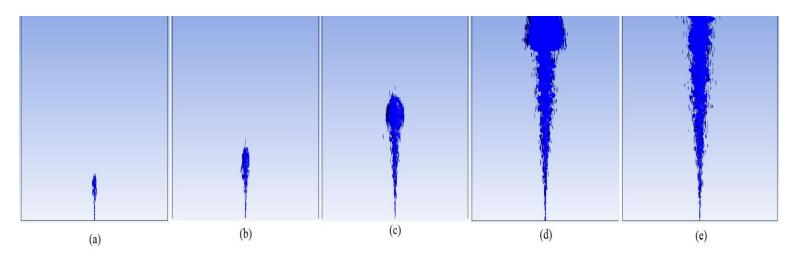


Figura 5.9 – Evolução da pluma de óleo com o tempo na simulação CFD: (a) t=0.1s; (b) t=0.72s; (c) t=1.68s; (d) t=2.64s; (e) t=3.6s

De acordo com os resultados acima, observa-se que a pluma, em 3,6 s, apresentou um formato bem parecido com o da simulação estacionária. Para se analisar melhor esse resultado transiente, compararam-se as larguras da pluma formada no tempo t = 3.6 s (tempo final da simulação transiente) nessa simulação transiente com as larguras da pluma no experimento e na simulação estacionária Lagrangeana Base. A Tabela 5.3 apresenta esses resultados:

Tabela 5.3 – Largura da pluma em diferentes alturas: simulação estacionária x transiente

Largura (cm)						
Alturas (cm)	Experimento	Estacionária	Transiente			
h1 = 1,25	0,55	0,26	0,21			
h2 = 2,5	1,1	0,53	0,32			
h3 = 5,0	2,2	0,92	0,77			
h4 = 10	4,2	2,37	3,09			
h5 = 15	5,4	3,42	5,12			

Pode-se observar na Tabela 5.3 que, a pluma obtida no instante final da simulação transiente é mais estreita que a estacionária até 5 cm acima do orifício e mais larga a partir de 10cm, aproximando-se, nessa região, bem mais dos experimentos de Adams e Masutani (2001).

Devido ao significativo maior tempo e esforço computacionais requeridos pela simulação transiente e aos resultados obtidos com a mesma, optou-se por manter a simulação estacionária como viável para prosseguimento do trabalho. Porém, chama a atenção, como a simulação transiente foi capaz de prever de forma muito mais próxima a largura da pluma nas regiões mais afastadas do orifício, para um número reduzido de partículas e diâmetro igual ao do orifício.

#### 5.1.4. Reprodução dos experimentos de Adams e Masutani (2001)

Conforme já mencionado, Adams e Masutani (2001) fizeram experimentos de injeção de óleo em um tanque para cinco diferentes velocidades do óleo. Os testes de modelagem conduzidos e explicados acima, foram feitos para o caso de maior velocidade, 0,966 m/s.

De modo a completar o trabalho de reprodução dos experimentos de Adams e Masutani (2001), foram simulados os demais casos com as diferentes velocidades de vazamento de óleo, utilizando as configurações da Simulação Lagrangeana Base.

A Figura 5.10 ilustra o resultado das simulações para os demais casos simulados, com velocidades do óleo de 0,716 m/s, 0,435 m/s, 0,340 m/s e 0,281 m/s. E a Figura 5.13 os resultados experimentais de Adams e Masutani (2001).

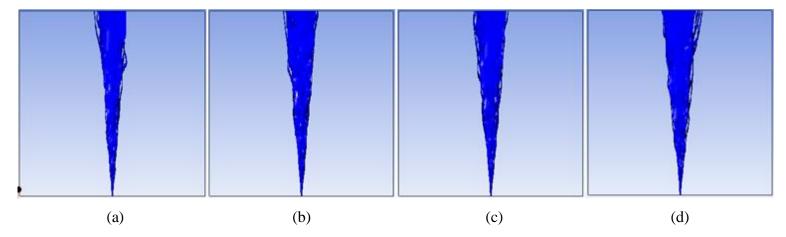


Figura 5.10 – Perfil da injeção de óleo no tanque, obtido com as simulações CFD com a configuração da Simulação Lagrangeana Base, para velocidade de injeçã de óleo de (a) 0,281 m/s; (b) 0,340 m/s; (c) 0,435 m/s; (d) 0,716 m/s.

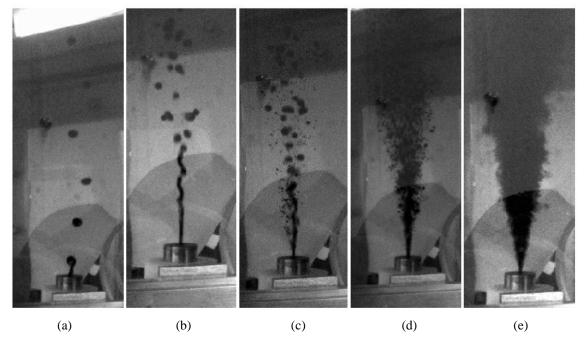


Figura 5.11 – Resultados dos experimentos de Adams e Masutani (2001). Vazões de óleo vão aumentando da esquerda para a direita; (a) 0,281 m/s; (b) 0,340 m/s; (c) 0,435 m/s; (d) 0,716 m/s; (e) 0,966 m/s

A primeira observação a ser feita sobre a Figura 5.10 é que as simulações se mostraram muito pouco sensíveis às variações de velocidade do óleo.

Comparando a Figura 5.10 com a Figura 5.11 pode-se notar que, enquanto nos experimentos, a pluma só ocorre para as velocidades de 0,966 e 0,716 m/s, pois para menores velocidades, nota-se uma dispersão isolada de gotas de óleo; nas simulações, uma pluma foi formada para todas as velocidades de óleo.

Na Tabela 5.4, pode-se ver a uma comparação quantitativa entre as plumas obtidas no experimento e na simulação, para o caso com velocidade de 0,716 m/s, onde são comparadas as larguras das plumas para diferentes alturas das mesmas. Para esse caso, os erros relativos das larguras da pluma em diferentes alturas são até menores que os obtidos para o caso com velocidade de 0,966 m/s, apresentados na Tabela 5.2 para a Simulação Base, indicando resultados mais razoáveis.

No entanto, para as velocidades de óleo mais baixas, pode-se concluir que as simulações não reproduziram, nem qualitativamente, os experimentos. Pode-se notar na Figura 5.11 que o tamanho das gotas de óleo, principalmente dos dois casos de velocidades mais baixas, 0,340 e 0,281 m/s, são comparáveis ao diâmetro do orifício de injeção. Talvez, para esses casos, a força de massa virtual pudesse contribuir para melhorar os resultados, ou um regime laminar poderia ser mais adequado. Porém, como o objetivo desse trabalho é prever vazamentos de óleo em grande profundidades, reproduzindo um hipotético vazamento de óleo real, espera-se velocidades de vazamento relativamentes maiores, como a indicada na Tabela 4.6 para o experimento SINTEF (JOHANSEN, 2003) e, portanto, maiores esforços para ajustar a modelagem para baixas velocidades no tanque não foram conduzidos.

Tabela 5.4 – Comparação da largura da pluma para diferentes alturas, *Tanque\_oleo\_10* 

Largura da Pluma (cm) para velocidade do óleo de 0,716 m/s					
Alturas (cm)	Experimento Adams e Masutani (2001) Simulação CFD %				
h1 = 1,25	0,36	0,26	27,78		
h2 = 2,5	0,72	0,53	26,39		
h3 = 5,0	1,43	0,92	35,66		
h4 = 10	3,21	2,37	26,17		
h5 = 15	5,36	3,42	36,19		

## 5.2. Resultados das simulações envolvendo óleo e gás em grande escala

Os resultados das simulações em grande escala com óleo e gás são discutidos a seguir. De acordo com os resultados da simulação no tanque com apenas óleo e água, a configuração que apresentou resultados mais razoáveis para os experimentos de Adams e Masutani (2001) foi a simulação Lagrangena Base.

Dessa maneira, a configuração base para todas as simulações nessa grande escala é da simulação Lagrangena Base, com força de arraste de Ishii e Zuber (Equação 3.57 a 3.60) para

o óleo, força de arraste de Schiller e Naumann (Equação 3.61 e 3.62) para o gás, força de dispersão turbulenta para ambos, modelo de turbulência k- $\varepsilon$  e óleo e gás sendo simulados com abordagem lagrangeana.

Todas as simulações em grande escala tiveram critério de término de 15000 iterações ou que as variáveis analisadas baixassem seu resíduo RSM para 10<sup>-5</sup>. As simulações nessa escala atingiram resíduos constantes em torno de 10<sup>-3</sup> dentro das 15000 iterações e foram consideradas convergidas. O Apêndice A ilustra o perfil do resíduo máximo para as variáveis do problema ao longo da altura do domínio, mostrando que estão com valores baixos, próximos do RSM, e corroborando a convergência da simulação.

Os resultados da Simulação 1, definida na Tabela 4.8, estão apresentados na Figura 5.12.

A Figura 5.12a apresenta a pluma de gás que efetivamente foi formada na simulação. Essa pluma foi obtida através de uma isosuperfície com concentração do gás igual a  $10^{-3}$ . Percebe-se que a corrente marítima, que está na direção x, influencia muito pouco o movimento das partículas de gás. Isso é esperado, pois a velocidade de saída de gás (53,1 m/s) é muito maior do que a velocidade da corrente (0,1 m/s).

Da mesma maneira que a pluma de gás, a pluma de óleo, Figura 5.12b, não foi arrastada pela corrente marítima. Isso também é esperado, pois, apesar de a velocidade de saída de óleo (1,47 m/s) ser bem menor do que a velocidade de saída do gás, ela ainda é bem maior do que a velocidade da corrente de água.

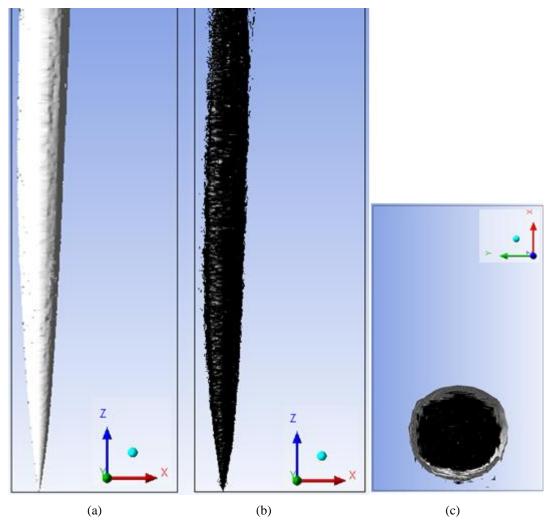


Figura 5.12 – Vista lateral da pluma de (a) gás e (b) óleo e (c) vista superior da pluma de óleo e gás, obtidas com a Simulação 1, definida na Tabela 4.8

Mesmo que não existia na configuração da simulação uma interferência direta entre gás e óleo, o gás, devido a sua grande velocidade, arrasta a água presente no domínio para dentro da pluma de óleo e gás, influenciando no movimento do óleo.

A Figura 5.12c apresenta as plumas de óleo e gás juntas, permitindo notar que as plumas de óleo e gás sobem juntas e que a pluma de gás é um pouco maior em diâmetro que a de óleo. Pode-se notar então que a pluma de gás contém a pluma de óleo em seu interior o que está de acordo com o que o ocorre na situação real (LINDERSEN, 2013).

Outro fenômeno importante de ser avaliado nessa simulação é o arraste sofrido pela água (Figura 5.13), onde se podem ver os vetores de velocidade da mesma. O arraste da água para dentro da pluma de óleo e gás está de acordo com o que é descrito pela literatura para plumas de óleo e gás submersas em água. No entanto, nota-se uma grande quantidade de água

sendo arrastada pela pluma no lado direito do domínio, por onde se se esperaria a saída da corrente marítima, uma vez que esta está no sentido positivo do eixo x. Avaliando os resultados, pode-se perceber que o que ocorre é, na realidade, um grande arraste da água no entorno da pluma, de modo que a presença da corrente marítima não é praticamente notada.

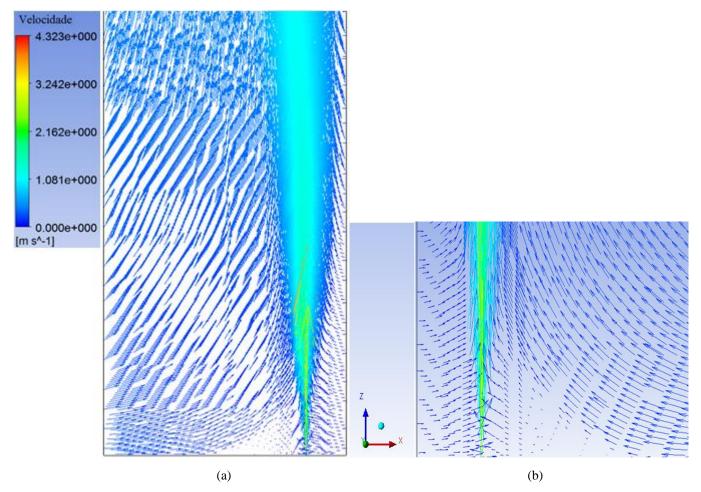


Figura 5.13 – Vetores de velocidade da água (m/s) (a) Para o domínio inteiro (b) Na região bem próxima do orifício, o eixo de coordenadas é para (a) e (b).

Dessa forma, a Simulação 1 atuou como um estudo preliminar do caso e permitiu que ajustes fossem feitos no domínio e nas condições de contorno. Vale comentar que havia sido feito um teste de malha para esta simulação, porém como se optou por mudar o domínio, o teste de malha que será apresentado adiante será para este novo domínio.

Diante dos resultados apresentados e discutidos das Figuras 5.12 e 5.13, decidiu-se diminuir o domínio da simulação, para reduzir o tempo computacional, que era da ordem de 5-6 dias, uma vez que a corrente marítima não seria capaz de tombar a pluma na direção de

escoamento da mesma, o que justifica, nos resultados apresentados acima, as plumas ocuparem apenas um volume restrito do domínio.

Dessa forma, utilizou-se o diâmetro da pluma de gás no topo da geometria, estimado em 5,75m na Figura 5.12c, para definir um novo tamanho para o segundo domínio, conforme pode ser visto na Figura 4.10.

Um teste de malha foi então conduzido, configurando a simulação 2 definida na Tabela 4.9 para este segundo domínio, utilizando as mesmas configurações da Simulação 1, definida na Tabela 4.8. Para o novo domínio definido, construíram-se então três novas malhas: uma com 627 mil nós, uma com 941 mil nós e outra com 1,4 milhões de nós. Para comparar os resultados nas três malhas, avaliou-se a velocidade da água em quatro alturas: 5, 30, 50 e 80m. Os resultados encontram-se na Figura 5.14, de onde se assumiu que a malha com 941 mil nós já apresentaria resultados independentes da malha. Com esse segundo domínio, o esforço computacional foi reduzido e o tempo para a convergência da simulação caiu para algo entre 1 e 2 dias.

Os resultados obtidos com a Simulação 2 estão apresentados nas Figuras 5.15 e 5.16. Como esperado, os resultados são muito semelhantes aos apresentados nas Figuras 5.12 e 5.13 para o domínio inicial, maior. Isto comprova que a corrente marítima pouco influencia no movimento da pluma, uma grande quantidade de água é carreada pela pluma pelo lado direito e a pluma de óleo está contida dentro da pluma de gás.

No entanto, comparando as Figuras 5.15 e 5.18, pode-se notar uma acentuação na assimetria do arraste da água: a ocorrência desse arrasto é muito maior do lado direito do que do esquerdo da pluma.

Isso pode ser consequência das condições de parede colocadas nas laterais do domínio, uma vez que se espera que o arrasto da água seja simétrico em torno da pluma, a menos da pouca influência da corrente marítima, uma vez que a água pode ser mover livremente em todas as direções (LINDERSEN, 2013).

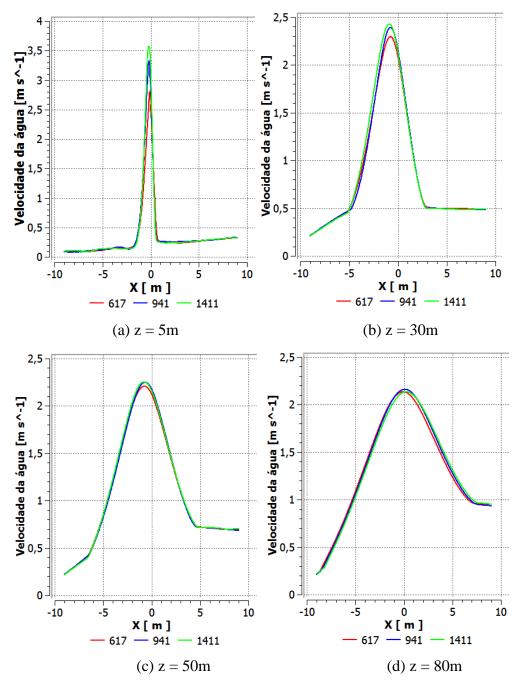


Figura 5.14 – Resultado do teste de malha para as simulações do vazamento em grande escala: perfil de velocidade da água a (a) 5m, (b) 30m, (c) 50m e (d) 80m, a partir da base do domínio.

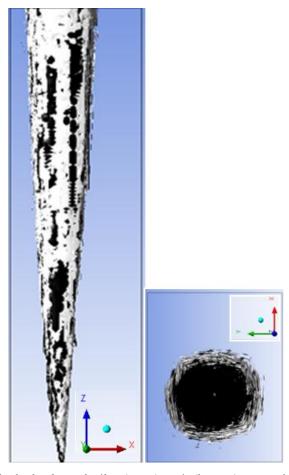


Figura 5.15 – Resultado da pluma de óleo (preto) e gás (branco) para a simulação 2: (a) vista frontal e (b) vista superior.

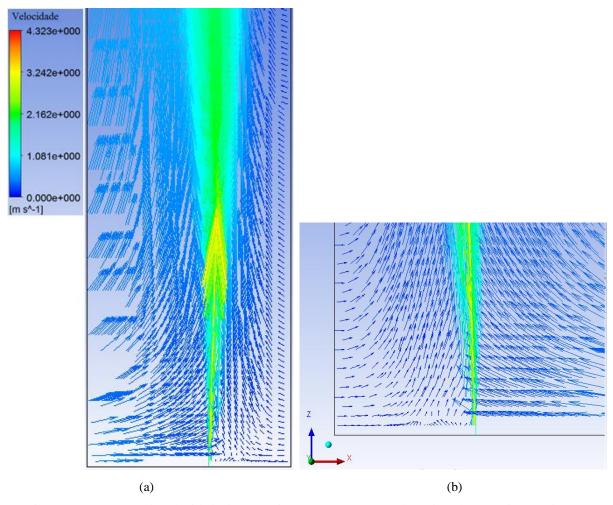


Figura 5.16 – Vetores de velocidade da água (simulação 2) para (a) o domínio e (b) na região próxima ao orifício, o eixo de coordenadas vale para (a) e (b).

A condição de deslizamento (tensão cisalhante nula) nas laterais do domínio, inicialmente especificadas na premissa de que o domínio seria suficientemente grande para não influenciar o escoamento, compromete a circulação da água na direção y, não se mostrando adequada.

Dessa maneira, a Simulação 3 foi configurada exatamente como a Simulação 2, mas com as laterais da malha definidas como condições de saída ou entrada (*opening*) dos materiais e com pressão hidráulica correspondente à coluna de água de 844 m de profundidade.

Os resultados da Simulação 3 estão mostrados nas Figuras 5.17 e 5.18.

Na Figura 5.17, pode-se notar que o formato da pluma não sofreu alterações qualitativas com a modificação da condição de contorno.

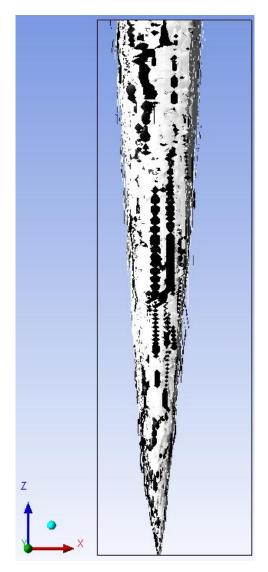


Figura 5.17 – Pluma de óleo (preto) e gás (branco) na Simulação 3, definida na Tabela 4.10 .

Na Figura 5.18, vê-se que, com a condição de contorno nas laterais sendo a própria pressão hidráulica, o arraste de água foi muito mais simétrico do que o da Simulação 2, como era de se esperar, indicando que esta condição de contorno é a mais adequada nesse caso.

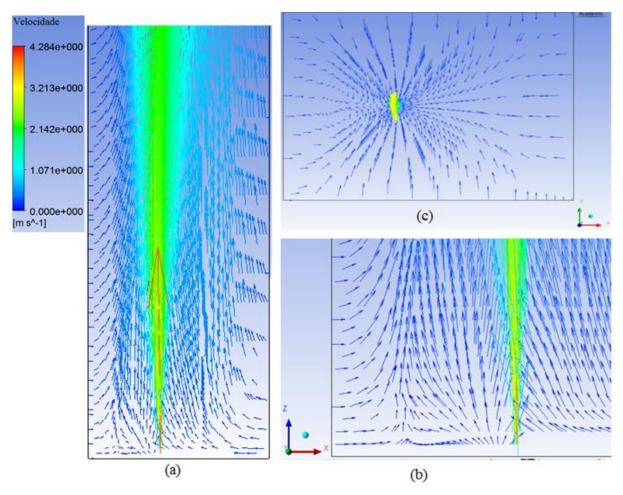


Figura 5.18 – Vetores de velocidade da água (simulação 3) (a) no domínio (b) na região próxima ao orifício (c) vista superior dos vetores de velocidade da água, (a) e (b) com o mesmo eixo coordenado.

No entanto, como o domínio da simulação não é simétrico, acredita-se que o sentido com que a corrente marítima entra no domínio possa influenciar o arraste e a forma da pluma de óleo e gás.

De forma a investigar a real contribuição da corrente marítima na simulação, definiuse como Simulação 4, a mesma configuração da Simulação 3, mas invertendo o sentido da corrente marítima, fazendo-a entrar do lado oposto.

Os resultados da Simulação 4 estão nas Figuras 5.19 e 5.20.

Pelos resultados das Figuras 5.19 e 5.20, nota-se que o sentido da corrente, vinda no sentido oposto de x, não alterou em praticamente nada os resultados em relação à Simulação 3. A forma das plumas não se alterou e o arraste da água se manteve praticamente idêntico em relação à Simulação 3.

Pode-se dizer que a corrente marítima, independentemente de seu sentido, praticamente não influencia o escoamento do óleo e do gás nesses primeiros 100 m de

profundidade, o que é o esperado já que a velocidade da corrente marítima (0,1 m/s) é muito baixa frente às velocidades do gás (53,1 m/s) e do óleo (1,47 m/s).

Já na Figura 5.20c, nota-se que a água é arrastada igualmente, com exceção do lado direito do domínio, onde o arrasto é um pouco diferente devido à condição de entrada de corrente (direção oposta a x) que fixa a velocidade de entrada de água em 0,1 m/s. Mesmo com uma quantidade de água maior do lado direito do que no esquerdo, houve apenas pequenas diferenças na direção do arrasto da água, que não é nada significativo para alterar a forma da pluma de óleo e gás.

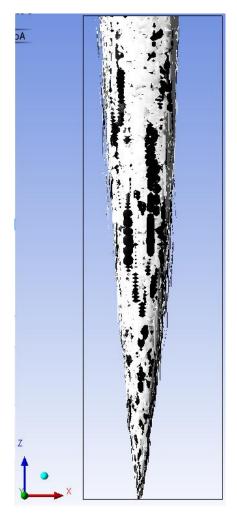


Figura 5.19 – Plumas de óleo (preto) e gás (branco) na Simulação 4, definida na Tabela 4.11.

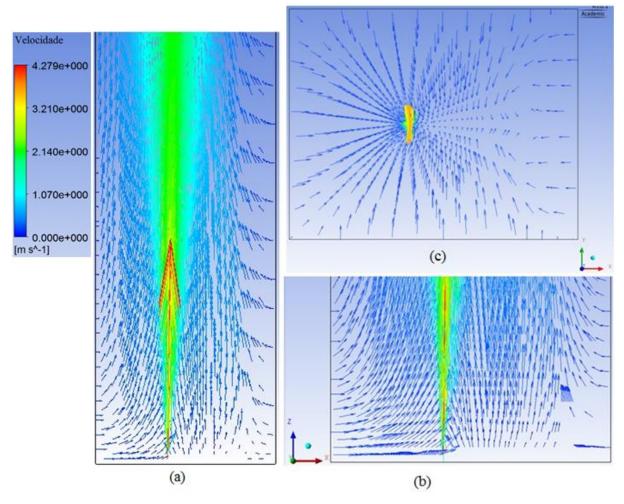


Figura 5.20 – Vetores de velocidade da água (simulação 4) (a) no domínio (b) na região próxima ao orifício (c) vista superior dos vetores de velocidade da água, (a) e (b) com o mesmo eixo coordenado.

Conclui-se então, pelas Simulações 3 e 4, que a corrente marítima não tem grande impacto no escoamento do óleo e do gás, independentemente de sua direção, nesses 100 m de profundidade, e que é importante considerar as laterais do domínio como condições de saída com pressão hidráulica especificada para que a água possa escoar em todas as direções.

Como a corrente marítima não tem impacto significativo nas simulações, uma opção de simplificação da simulação surge como bastante atrativa: ignorar a corrente marítima. Isso permite reduzir ainda mais o domínio, para torná-lo simétrico em relação à posição do orifício de vazamento, sem que os resultados sejam prejudicados.

Um terceiro domínio foi então criado, conforme a Figura 4.12.

A malha de 941 mil nós foi aproveitada, uma vez que já havia sido avaliada pelo teste de malha, cortando apenas o "excesso de domínio" na direção x. O terceiro domínio tem então 23 m de largura e comprimento e 100 m de altura, com um total de 791 mil nós na malha.

A Simulação 5 se constitui então na simulação que utilizou a nova malha de 791 mil nós, com as mesmas configurações da Simulação 3, porém sem a presença da corrente marítima, com todas as laterais do domínio consideradas como condições de saída dos materiais (*opening*) e com pressão hidráulica referente à profundidade de 744 a 844 m. E como resultado da diminuição do tamanho da malha, a simulação levou de 13 a 15 horas para convergir os resultados, sendo uma redução considerável em relação às demais simulações 1, 2, 3 e 4, em que cada uma levava mais de um dia para convergir. Esse tempo poderia ser ainda mais reduzido se fosse explorada a condição de simetria (poder-se-ia, por exemplo, simular apenas um quarto do domínio).

Até o momento, vinha-se especificando o tamanho das gotas de óleo e das bolhas de gás como sendo 6 cm, como base no diâmetro do orifício. Porém, de acordo com o relatório do grupo SINTEF (ADAMS e SOCOLOFSKY, 2004), que são as condições que as simulações nessa escala da presente dissertação se baseiam, os tamanhos das partículas foram medidas durante toda a ascensão das partículas na profundidade de 844 m e os valores foram de 1 a 6 mm para ambos os materiais. Assim, com a mesma configuração da Simulação 5, simulou-se o vazamento de óleo e gás com gotas e bolhas de diferentes tamanhos: 6 cm, 1 cm, 6 mm, 3 mm e 1 mm.

As plumas de óleo e gás formadas com a Simulação 5, para cada um dos diâmetros de gota e bolha, estão apresentados na Figura 5.21.

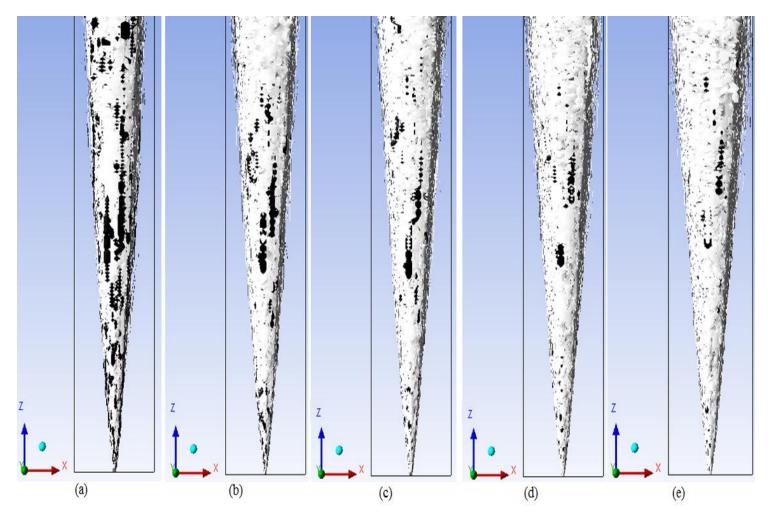


Figura 5.21 – Plumas de óleo (preto) e gás (branco) na Simulação 5, descrita na Tabela 4.12, para diâmetros de gota e bolha iguais a: (a) 6 cm, (b) 1 cm, (c) 6mm, (d) 3mm e (e) 1mm.

Pode-se ver na Figura 5.21 que as formas das plumas se mantem semelhantes, na forma de cone, mesmo com a diminuição do tamanho das bolhas e das gotas. Além disso, o óleo e o gás subiram unidos como uma pluma e não individualmente até a altura de 100 m, fato que está de acordo com o experimento real em que as gotas de óleo e as bolhas de gás movem-se unidas até a altura de 170 m (JOHANSEN, 2003).

O fato que explica que gotas e bolhas subam juntas até essa altura de 100 m é que a quantidade de momento ainda se sobrepõe sobre o efeito do tamanho das mesmas para todos os diâmetros analisados. O efeito do tamanho das gotas e das bolhas começa a ser maior do que o momento da pluma, quando estas desaceleram o suficiente para que cada uma tenha um movimento individual dependente de seu tamanho de partícula. Em outras palavras, para todos os tamanhos analisados, os resultados das simulações foram o mesmo, com o momento da pluma se sobrepondo ao efeito dos tamanhos de partícula, assim como ocorreu no

experimento real do grupo SINTEF com as partículas de óleo e gás variando de 1 a 6 mm (ADAMS e SOCOLOFSKY, 2004).

Na Figura 5.22, pode-se ver as plumas de óleo e gás, separadas, para a Simulação 5, com diâmetros de gota e bolhas iguais a 6cm e 1mm (os extremos testados). Nota-se que o tamanho da pluma de óleo pouco mudou da simulação com diâmetro de partículas de 6 cm para a simulação com diâmetros de 1 mm. No entanto, percebe-se uma grande mudança de tamanhos da pluma de gás. Isso pode ser devido à grande diferença entre as velocidades com que entram o óleo e o gás, o gás entra no domínio com uma velocidade muito maior do que o óleo, o que contribui para que as bolhas se espalhem mais devido aos efeitos turbulentos. Além disso, o gás é muito mais leve do que o óleo, favorecendo assim o espalhamento maior das bolhas de gás.

Como forma de comparação, mediu-se a largura das plumas de gás em cinco diferentes alturas, a partir da base do domínio, para cada simulação. Os resultados encontramse resumidos na Tabela 5.5 abaixo.

Tabela 5.5 – Largura das plumas de gás para cada diâmetro de bolha

Largura das Plumas de Gás (m)					
Diâmetros de Partícula/Altura	3 m	5 m	30 m	50 m	80 m
6 cm	1,58	2,03	7,15	10,2	12,9
1 cm	1,61	2,3	7,6	11,1	14,4
6 mm	1,64	2,33	7,62	11,2	14,9
3 mm	1,75	2,38	8,1	11,4	16
1 mm	1,78	2,41	8,3	11,6	17,6

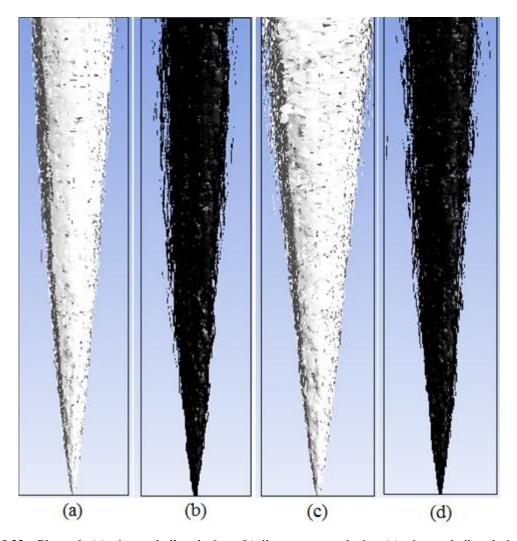


Figura 5.22 – Pluma de (a) gás com bolhas de 6cm, (b) óleo com gotas de 6cm (c) gás com bolhas de 1mm, (d) óleo com gotas de 1mm, obtidas com a Simulação 5, definida na Tabela 4.12

A Tabela 5.5 confirma a análise da Figura 5.22, mostrando que a pluma de fato aumenta de largura à medida que o tamanho das bolhas de gás diminui. Não há uma relação explícita entre as larguras das plumas e os tamanhos das partículas, contudo o tamanho das mesmas influencia diretamente na largura da pluma, já que quanto menores as partículas, mais sofrerão os efeitos turbulentos (CLOETE, OLSEN e SKJETNE, 2009).

Além disso, analisando a Figura 5.22, observa-se que de fato o tamanho da partícula, pelo menos para o gás, determinará em que altura as bolhas começarão a se separar e subir pela coluna de água individualmente. Para o tamanho de bolha de 1 mm, tem-se que antes dos 100 m de coluna de água, algumas bolhas já estão começando a se separar da pluma, mostrando que o efeito do tamanho da partícula começa a ser mais importante do que o momento da pluma para algumas bolhas. Dessa maneira, o tamanho das bolhas que compõem

a pluma determinará em que altura a pluma de gás deixará de existir (DASANAYAKA e YAPA, 2009).

Por fim, na Figura 5.23, pode-se ver como a velocidade de arraste da água é afetada pelo tamanho das partículas. Pode-se ver que quanto menor o diâmetro da partícula, maior será a velocidade com que a água é arrastada para dentro da pluma de óleo e gás. Esse fato pode ser explicado pela área superficial total das bolhas e gotas na pluma, pois como as partículas entram com a mesma velocidade em todas as simulações, a área superficial total das partículas terá papel determinante em influenciar a água que entra nas plumas de óleo e gás (CLOETE, OLSEN e SKJETNE, 2009). Pode-se pensar que, numa mesma altura de pluma, numa seção transversal na mesma, haverá mais partículas, quanto menor for o tamanho das mesmas, dado que a vazão especificada nas simulações foi a mesma.

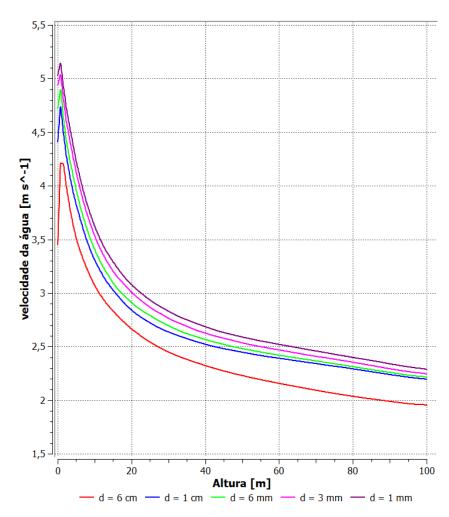


Figura 5.23 – Influência do diâmetro d das gotas de óleo e bolhas de gás na velocidade de arraste da água pela pluma

## 6. CONCLUSÃO

Analisando os resultados como um todo, o escoamento de óleo e gás em água pode ser representado a partir da ferramenta fluidodinâmica computacional (CFD), embora ainda sejam necessárias mais validações dos resultados das simulações com experimentos reais. Os resultados das simulações do escoamento com o óleo no tanque de água mostraram a dependência dos resultados no que tange ao tamanho e número de partículas especificados.

A modelagem identificada como mais apropriada para simular dispersão de óleo em água foi uma abordagem euleriana-lagrangeana, considerando as forças de arraste e dispersão turbulenta. O modelo de turbulência padrão, de viscosidade turbulenta linear, k- $\varepsilon$ , mostrou-se satisfatório. Uma abordagem transiente do problema trouxe algumas melhorias de predição, mas outras desvantagens, não justificando o aumento de esforço e tempo computacionais.

Já no caso da simulação em grande escala com óleo e gás fluindo em meio aquoso, algumas conclusões interessantes foram tiradas:

- Utilizando uma abordagem lagrangeana, o modelo de turbulência padrão k-ε e forças de arraste e dispersão turbulenta, mostraram que é possível representar as plumas de óleo e gás em seu formato cônico, como consta na literatura.
- No caso da corrente marítima ter velocidade significativamente menor que as de vazamento/injeção, ela pode ser desconsiderada, sem prejuízos de resultado, permitindo a utilização de um domínio simetria.
- O diâmetro da pluma de óleo é pouco influenciado pelo diâmetro das gotas de óleo e bolhas de gás.
- O diâmetro da pluma de gás aumenta conforme o diâmetro das gotas de óleo e bolhas de gás diminui.
- A velocidade de arraste da água pela pluma aumenta conforme o diâmetro das gotas de óleo e bolhas de gás diminui.

Os efeitos do diâmetro das gotas de óleo e bolhas de gás no diâmetro da pluma de gás e velocidade de arraste da água se devem ao fato de que, para mesmas vazões de injeção, a área superficial das partículas numa mesma seção transversal da pluma aumenta, à medida que o diâmetro das partículas diminui, aumentando a velocidade de arraste.

Embora ainda sejam necessários mais resultados experimentais para a comparação das medidas da largura das plumas de gás, foi possível verificar o efeito do tamanho da partícula

começar a ser mais importante do que o momento da pluma no movimento do gás na simulação 4 (diâmetro de 1 mm) próximo dos 100 m de altura no domínio.

Dessa forma, conclui-se que este trabalho, obteve, de forma relativamente simples, resultados que concordam com os dados experimentais disponíveis na literatura, sendo possível explicá-los através de motivações físicas, e, portanto, fornece um ponto de partida para investigações mais aprofundadas.

Para trabalhos posteriores nesse assunto, pode-se explorar a simetria proposta para o problema para facilitar uma simulação transiente. Avaliar a simulação transiente é importante para se avaliar o tempo que as gotas e as bolhas levam para alcançar os 100 m de altura, já que esse é um parâmetro bem apresentado na literatura.

Por fim, pode-se ainda simular mais de 100m de coluna de água, para se avaliar mais detalhadamente a ascensão do óleo e do gás. Para isso talvez fosse necessário levar em consideração a dissolução do gás na água, os modelos de quebra de gotas e bolhas e o número preciso das mesmas para se obter uma melhor reprodução do problema.

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADAMS, E. E.; SOCOLOFSKY, S. A. Deep Oil Spill Modeling Activity Supported By TheDeepspillJIPAnd Offshore Operators Committee. [S.l.]: University of Hawaii, 2004.

BISWAS, R.; STRAWN, R. C. Tetrahedral and hexahedral mesh adaptation for CFD problems. In: **Applied Numerical Mathematics**. [S.l.: s.n.], 1998.

BRENNEN, C. E. **Fundamentals of Multiphase Flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.

CHAN, G. K. Y. **Effects of Droplet Size on Intrusion of Sub-Surface Oil Spills**. 2013. Dissertação (MestradoemCiência da Computação) – MassachusettesInstituteof Technology.

CHEN, F.; YAPA, P. D. Three-dimensional visualization of multi-phase (oil/gas/hydrate) plumes. In: **Environmental Modelling e Software**. [S.l.: s.n.], 2003.

CHEN, F.; YAPA, P. D. Estimating the Oil Droplet Size Distributions in Deepwater Oil Spills. **Journal of hydraulic engineering**, Asce, v.133, n.1, p.197 – 207, Fevereiro 2007.

CLOETE, S.; OLSEN, J. E.; SKJETENE, P. **CFD modeling of plume and free surface behavior resulting from a sub-sea gas release**. Applied Ocean Research, v. 31, p. 220 – 225, Setembro 2009.

CROWE, C.T., SCHWARZKOPF, J. D. SOMMERFELD, M., TSUJI, Y. Multiphase flows with droplets and particles. CRC Press, 2012.

DASANAYAKA, L. K.; YAPA, P. D. Role of plume dynamics phase in a deepwater oil and gas release modelo.**Journal of Hydro-environment**, Postdam, v.2, n.1, p.243 – 253, Janeiro 2009.

DAVIDSON, M. R. Numerical calculations of two-phase flow in a liquid bath with bottom gas injection: The central plume, CSIRO Division of Mineral and Process Enginerring, Lucas Heights Research Laboratories, Lucas Heights, 1990.

DREW, D.A., PASSMAN, S.L. Theory of multicomponent fluids. Springer, 1998.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Computational Methods for Fluid dynamics .[S.l.]: Springer, 2002.

FREIRE, A. P. S.; ILHA, A.; COLAÇO, M. J. Turbulência. [S.l.]: ABCM, 2006.

HIRT, C. W.; NICHOLS, B. C. Volume of Fluid (VOF) Method for The Dynamics of Free Boundaries **.Journal of Computational Physics**, [S.1.], v.39, p.201 – 225, 1981.

JOHANSEN, O. DeepBlow - a Lagrangian Plume Model for Deep Water Blowouts .**Spill Science and Technology Bulletin**, [S.l.], v.6, n.2, p.103 – 111, Janeiro 2000.

JOHANSEN, O. Development and Verification of deep-water blowout models .**Marine Pollution Bulletin**, [S.1.], v.47, p.360 – 368, 2003.

JOHANSEN, O.; BRANDVIK, P. J.; FAROOQ, U. Droplet breackup in subsurface oil realeases - Part 2: predictions of droplet size distributions with and without injection of chemical dispersants .**Marine Pollution Bulletin**, [S.l.], v.73, p.327 – 335, 2013.

JOHANSEN, O.; RYE, H.; COOPER, C. DeepSpill - Field Study of a Simulated Oil and Gas Blowout in Deep Water. **Spill Science and Technology Bulletin**, [S.l.], v.8, p.433 – 443, 2003.

JOHANSEN, O.; RYE, H.; COOPER, C. DeepSpill - Field Study of a Simulated Oil and Gas Blowout in Deep Water. **Spill Science and Technology Bulletin**, [S.l.], 2003.

KLEIN, T. S.; CRAFT, T. J.; LACOVIDES, H. Developments in Two-Time-Scale Turbulence Models Applied to Non-Equilibrium Flows. 2012.

LAUNDER, B. E.; REECE, G. J.; RODI, W. Progress in the Development of a Reynolds-Stress Turbulent Closure .**Journal of Fluid Mechanics**, [S.l.], v.68, n.3, p.537 – 566, 1975.

LINDERSEN, P. J. B. **Modelling of Subsurface Releases of Oil and Gas**. 2013. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação) –NorwegianUniversityOf Science And Technology.

MALALASEKERA, M.; VERSTEEG, H. Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method.[S.l.]: LongmanScientificandTechnical, 1995.

MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: fundamentos, coordenadas generalizadas. [S.l.]: LTC Editora, 1995.

MARCHISIO, D. L.; FOX, R. O. Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems. [S.l.]: Cambriedge, 2013.

MASUTANI, M.; ADAMS, E. E. Experimental study of multi-phase plumes with application to deep ocean oil spills. [S.l.]: University of Hawaii, 2001.

SATO, Y. e SEKOGUCHI, K. Liquid Velocity Distribution in Two-Phase Bubbly Flow. Int. J. Multiphase Flow, 2, p.79, 1975.

SKJETNE, P.; OLSEN, J. E. A parcel based modelling concept for studying subsea gas release and the effect of gas dissolution, Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 12, p. 187 – 195, 2012.

SPEZIALE, C. G.; SARKAR, S.; GATSKI, T. B. Modelling the pressure-strain correlation of turbulence: an invariant dynamical systems approach, **Journal of Fluid Mechanics**, Vol. 227, pp. 245-272, 1991

TOMIYAMA, A. **Struggle with computational bubble dynamics**.ICFM'98, Third Int. Conf. Multiphase Flow, pp. 1-8, 1998.

XIE, H.; YAPA, P. D.; NAKATA, K. Modeling emulsification after an oil spill in the sea. **Journal Of Marine Systems**, [S.1.], p.489 – 506, 2007.

YAPA, P. D. et al. How does oil and gas behave when released in deepwater? **Journal Of Hydro-Environment Research**, [S.l.], p.275 – 285, 2012.

YAPA, P. D.; XIE, H. Underwater Oil/Gas Jets and Plumes: comparison with field data. **Journal Of Hydraulic Engineering**, [S.l.], p.855 – 860, 2002.

YAPA, P. D.; ZHENG, L. Modelling Oil and Gas Releases from Deep Water: a review. **Spill Science & Technology Bulletin**, [S.l.], p.189 – 198, 1998.

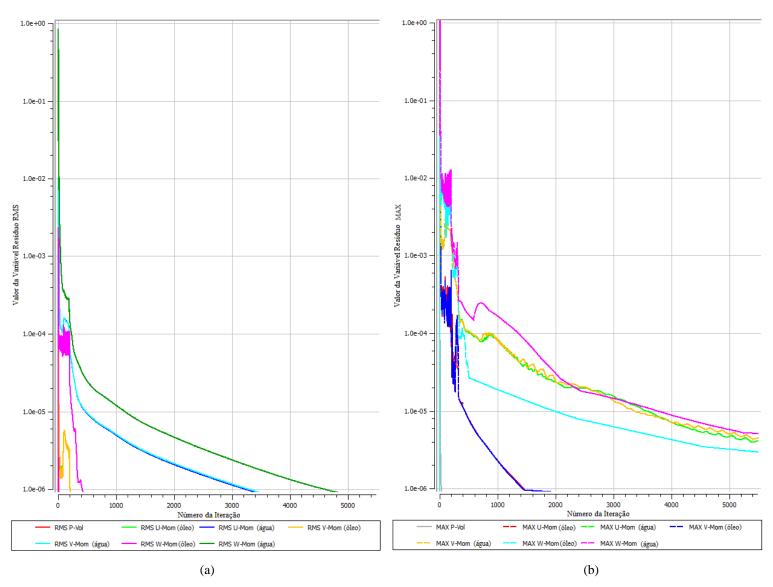
YAPA, P. D.; ZHENG, L.; CHEN, F.A Model for Deepwater Oil/Gas Blowouts. **Marine Pollution Bulletin**, [S.1.], p.234 – 241, Janeiro 2001.

ZHENG, L.; YAPA, P. D. Modeling gas dissolution in deepwater oil/gas spills.**Journal Of Marine Systems**, [S.l.], p.299 – 309, 2001.

ZHENG, L.; YAPA, P. D.; CHEN, F. A model for simulating deepwater oil and gas blowouts – Part I: theory and model formulation. **Journal Of Hydraulic Research**, [S.l.], p.339 – 351, 2003.

ZHU, H.; LIN, P.; PAN, Q. A CFD (Computational fluid dynamic) simulation for oil leakage from damaged submarine pipeline. Elsevier, n. 64, p. 887 – 899, Junho 2014.

## Apêndice A – Perfis de Resíduo Máximo e RMS



Figura~A1-Aspecto~dos~resíduos~RMS~(a)~e~m'aximo~(b)~para~todas~as~simulações~na~escala~do~tanque~com'agua.

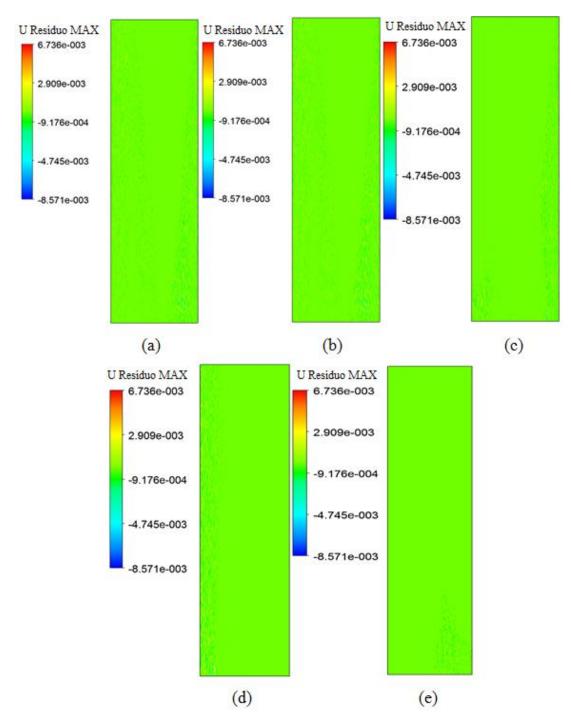


Figura A2 – Plano zx para a velocidade na direção de x (U (m/s)) para cada simulação em grande escala, (a) Simulação 1, (b) Simulação 2, (c) Simulação 3, (d) Simulação 4, (e) Simulação 5

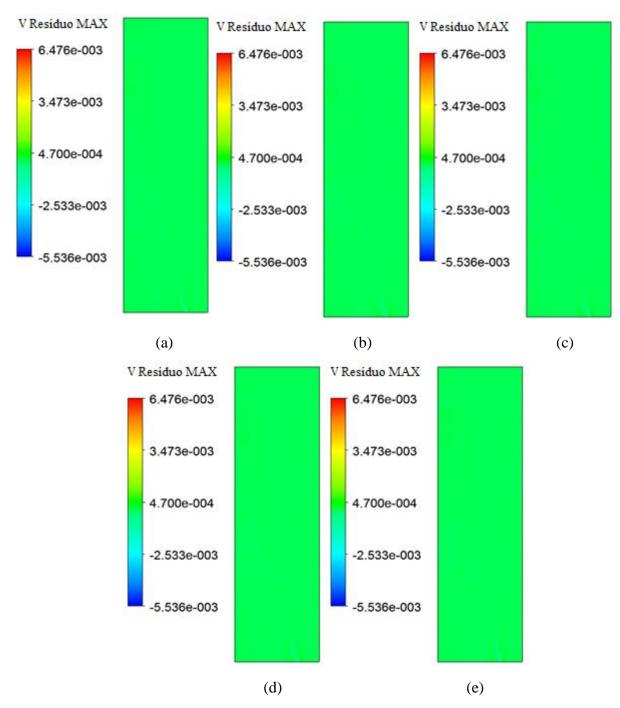


Figura A3 – Plano zx para a velocidade na direção de y (V (m/s)) para cada simulação em grande escala, (a) Simulação 1, (b) Simulação 2, (c) Simulação 3, (d) Simulação 4, (e) Simulação 5

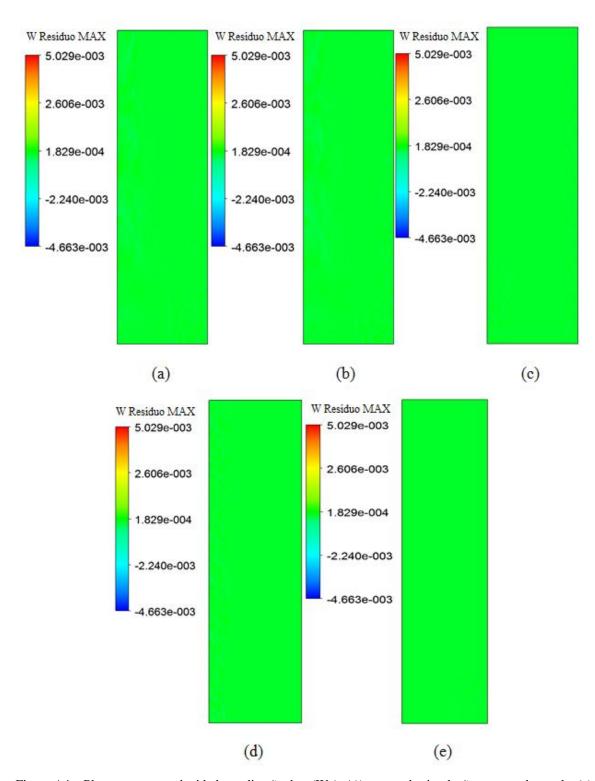


Figura A4 – Plano zx para a velocidade na direção de z (W (m/s)) para cada simulação em grande escala, (a) Simulação 1, (b) Simulação 2, (c) Simulação 3, (d) Simulação 4, (e) Simulação 5

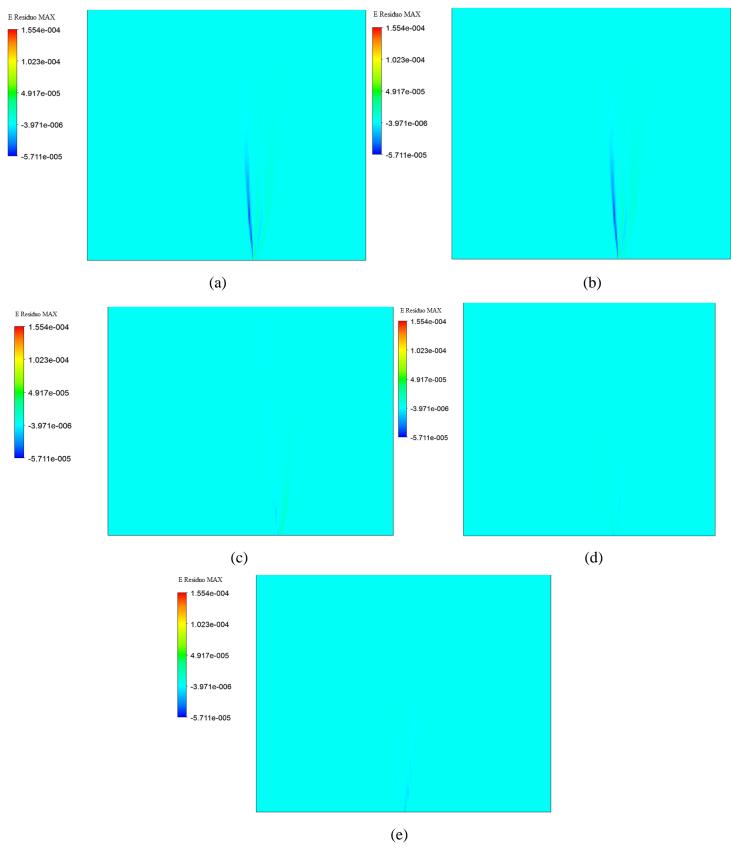


Figura A5 – Plano zx na região próxima do orifício para o resíduo do  $\varepsilon$  do modelo k- $\varepsilon$  para cada simulação em grande escala, (a) Simulação 1, (b) Simulação 2, (c) Simulação 3, (d) Simulação 4, (e) Simulação 5

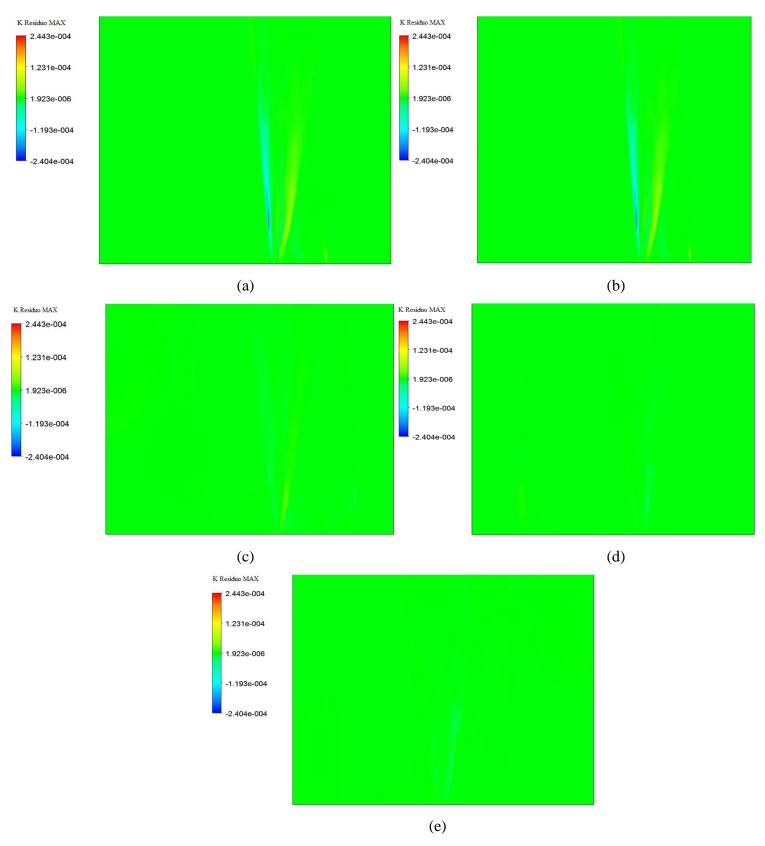


Figura A6 – Plano *zx* na região próxima do orifício para o resíduo do *k* do modelo *k-ε* para cada simulação em grande escala, (a) Simulação 1, (b) Simulação 2, (c) Simulação 3, (d) Simulação 4, (e) Simulação 5