PROGRAMA EQ-ANP

Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural

Métodos numéricos para solução de sistemas hiperbólicos aplicados aos escoamentos compressíveis mono e bifásicos

Raphael Moura Lopes Coelho

Tese de Doutorado

Orientadores

Prof. Affonso Carlos Seabra da Silva Telles, Ph.D.

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Agosto de 2006

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE SISTEMAS HIPERBÓLICOS APLICADOS AOS ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS MONO E BIFÁSICOS

Raphael Moura Lopes Coelho

Tese 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 a obtenção do grau de doutor em Ciências.

Aprovado por:

Affonso Carlos Seabra da Silva Telles, Ph.D.
(orientador – presidente da banca)

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.
(orientador)

Príamo Albuquerque Melo Jr., D.Sc.

Paulo Roberto Pagot, Ph.D.

Carlos Eduardo Fontes da Costa e Silva, D.Sc.

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Verônica Maria de Araujo Calado, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Agosto de 2006

Coelho, Raphael Moura Lopes

Métodos numéricos para solução de sistemas hiperbólicos aplicados aos escoamentos compressíveis mono e bifásicos/ Raphael Moura Lopes Coelho, Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2006.

xxii, 248 p.; il.

(Tese) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2006. Orientadores: Affonso Carlos Seabra da Silva Telles e Paulo Laranjeira da Cunha Lage.

1. Sistemas hiperbólicos conservativos e não conservativos. 2. Escoamento compressível. 3. Escoamento multifásico. 4. Tese. (Doutorado – UFRJ/EQ). 5. Affonso Carlos Seabra da Silva Telles e Paulo Laranjeira da Cunha Lage. I. Título.

à minha avó Ida Lopes Coelho e,

à memória de meu querido avô Joaquim Lopes Coelho

“O homem lúcido sabe que a vida é uma carga tamanha de acontecimentos e emoções que nunca se entusiasma com ela, assim como não teme a morte. O homem lúcido sabe que viver e morrer são o mesmo em matéria de valor, posto que a Vida contém tantos sofrimentos que a sua cessação não pode ser considerada um mal.

O homem lúcido sabe que é o equilibrista na corda bamba da existência. Sabe que, por opção ou acidente, é possível cair no abismo, a qualquer momento, interrompendo a sessão do circo.

Pode também o homem lúcido optar pela Vida. Aí então, ele esgotará todas as suas possibilidades. Passeará por seu campo aberto e por suas vielas floridas. Saberá ver a beleza em tudo. Terá amantes, amigos, ideais. Urdirá planos e os realizará. Resistirá aos infortúnios e até às doenças. E, se atingido por algum desses emissários, saberá suportá-los com coragem e mansidão.

Morrerá o homem lúcido de causas naturais e em idade avançada, cercado por filhos e netos que seguirão sua magnífica aventura. Pairará então, sobre sua memória uma aura de bondade. Dir-se-á: aquele amou muito e fez bem às pessoas.

A justa lei máxima da natureza obriga que a quantidade de acontecimentos maus na vida de um homem iguale-se sempre à quantidade de acontecimentos favoráveis. O homem lúcido que optou pela Vida, com o consentimento dos Deuses, tem o poder magno de alterar esta lei. Na sua vida, os acontecimentos favoráveis estarão sempre em maioria.

Esta é uma cortesia que a Natureza faz com os homens lúcidos.”

Autor desconhecido escrito no século VI antes de Cristo na Caldéia, região sul da Mesopotâmia, situada entre os rios Tigre e Eufrates

“...Quando eu penso no futuro, não esqueço o meu passado..,”

Paulinho da Viola, em ***dança da solidão***

“Vamos parar de olhar atravessado para os outros!

Podemos morrer a qualquer momento, pois não somos nada!

Vamos amar os seres humanos!*”*

Alfredinho do Bip-Bip

AGRADECIMENTOS

Ao apoio financeiro da **Agência Nacional do Petróleo** – ANP – e da **Financiadora de Estudos e Projetos** – FINEP – por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH-ANP/MCT, em particular ao **PRH 13**, da Escola de Química - Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural.

Agradecimentos a:

- ao meu país que tanto amo e juro lutar para vê-lo mais justo
- meus pais e meus irmãos, Ricardo, Anna Carolina e Ana Júlia.
- a todos os meus queridos "*..colegas de copo e de cruz...*" do Bip-Bip
- aos amigos da Escola Portátil de Música
- aos amigos do Quilombo da Mauá
- aos amigos da capoeira
- aos Velhos Chorões e Sambistas
- aos amigos do CENPES
- aos amigos Flavio Waltz Moreira e Silva, Rodrigo (Pulga), Ana Maura e Cachalote
- ao meu mestre Giulio Massarani por despertar-me o interesse pela pesquisa
- aos meus orientadores, em especial pela honra de ser orientado pelo prof. Affonso Carlos Seabra da Silva Telles e pelas discussões durante as aulas de Turbulência e Termodinâmica de Processos Irreversíveis.
- a Escola de Química da UFRJ pela minha formação

Agradecimentos especiais a:

- Alfredo Jacinto Mello, o Alfredinho
- Noel Rosa, Pixinguinha, Chico Buarque de Hollanda, Paulinho da Viola, Vinicius de Morais, Baden Powell, Raphael Rabello, Jacob do Bandolim, Cartola, Nelson Cavaquinho, Tom Jobim, Paulo César Pinheiro, Elis Regina, Elizeth Cardoso, Garoto, Dilermando Reis, Dino 7 cordas, Época de Ouro, Chico Alves, Orlando Silva, Nelson Gonçalves... por me emocionarem diariamente.

Resumo da Tese de Doutorado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Doutor em Ciências, com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural.

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE SISTEMAS HIPERBÓLICOS APLICADOS AOS ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS MONO E BIFÁSICOS

Raphael Moura Lopes Coelho
Agosto, 2006

Orientadores: Prof. Affonso Carlos Seabra da Silva Telles, Ph.D.
Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Na indústria de petróleo e gás a forma mais comum de transporte de fluidos é por meio de dutos. Sendo assim, a simulação do comportamento transiente destas linhas é de suma importância tanto no projeto como na operação desses dutos. Métodos numéricos clássicos e recentes para a solução de sistemas hiperbólicos que descrevem as leis de conservação foram analisados e testados comparando-se suas acurácias e eficiências computacionais quando aplicados ao escoamento compressível de gás ideal, gases reais e sistemas bifásicos descritos pelos modelos de mistura e de dois fluidos.

O método Roe-Pike baseado na solução do problema de Riemann, sua extensão à segunda-ordem pela estratégia MUSCL-Hancock (MUSCL-Roe Pike) e o método de Harten foram comparados para a solução do escoamento unidimensional de gás ideal. Estes métodos exigem o cálculo do chamado estado intermediário de Roe que freqüentemente é impossível de determinar. Outros métodos que não são baseados na solução do problema de Riemann associado são mais adequados para modelos que utilizem equações de estado mais complexas. Entre estes métodos estão o VFRoe, AUSM+ e o híbrido Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff (HLFW) que foram comparados na solução do escoamento unidimensional de gases de Van der Waals e Redlich-Kwong. Todos os métodos foram analisados tanto em relação à acurácia, para uma dada malha, quanto em relação à eficiência computacional, para uma dada acurácia requerida. Os resultados mostraram que os métodos de segunda-ordem exigem um tempo computacional reduzido quando comparados aos de primeira-ordem quando uma dada acurácia é requerida. Isto ocorre mesmo que estes exijam um maior número de operações de pontos flutuantes e indexações indiretas do que aqueles, devido ao fato de que malhas menores são necessárias para os métodos de ordem superior atingirem a mesma acurácia. Isso leva ainda ao aumento do passo temporal para um CFL fixo, exigindo menos passos de tempo para a completa integração. Os resultados mostraram que os métodos VFRoe e AUSM+ foram os mais acurados, sendo que o método AUSM+ foi o que exigiu o menor esforço computacional e é, portanto, o mais recomendado para escoamento de gases reais em sistemas monofásicos.

Além dos métodos AUSM+ e HLFW, outro método que não se baseia na solução do problema de Riemann é o AUSMDV. Os métodos HLFW, AUSM+, AUSMDV e suas extensões à segunda-ordem, MUSCL-AUSM+ e MUSCL-AUSMDV, foram empregados na solução das equações de conservação de sistemas multifásicos. O modelo de dois fluidos pode perder o caráter hiperbólico, de forma que métodos que não são baseados na solução do problema de Riemann são os mais adequados para este

modelo. No entanto, estes métodos não apresentam a propriedade TVNI podendo levar a oscilações numéricas. Uma forma bem posta do modelo pode ser obtida utilizando-se um termo de correção de pressão interfacial. Nesta tese, este termo foi utilizado e os resultados com os métodos do tipo AUSM e o método HLFW foram analisados. Os métodos AUSM+ e AUSMDV foram estendidos à segunda-ordem com a estratégia MUSCL-Hancock usando-se uma formulação conservativa. Adicionalmente, várias expressões para as funções de ponderação do método AUSMDV foram testadas e comparadas. Os métodos foram comparados na solução de dois problemas de referência, o de choque em tubo e o de jato d'água. O termo de correção de pressão interfacial foi eficiente em garantir a hiperbolicidade, mas aumentou a difusão numérica. Os métodos HLFW e MUSCL-AUSMDV foram os que, na média, apresentaram os melhores resultados. O método HLFW foi o mais estável quando o termo de correção de pressão interfacial foi utilizado.

Os métodos também foram implementados e usados para a solução de um problema de choque em tubo usando o modelo de mistura encontrado na literatura. Finalmente, um caso de intermitência promovida pelo terreno e um caso de simulação do aumento da vazão de gás em sistemas bifásicos foram simulados com várias relações de fechamento para os modelos mistura e de dois fluidos. Os métodos foram implementados no código computacional orientado a objeto escrito em FORTRAN95 chamado TITÃS.

Abstract of a Thesis presented to Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos - EQ/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science with emphasis on Petroleum and Natural Gas.

NUMERICAL METHODS FOR THE SOLUTION OF HYPERBOLIC SYSTEMS APPLIED TO ONE AND TWO-PHASE COMPRESSIBLE FLOWS

Raphael Moura Lopes Coelho
August, 2006

Supervisors: Prof. Affonso Carlos Seabra da Silva Telles, Ph.D.
Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

In the oil and gas industry the transportation of fluids are predominantly performed through pipelines. Therefore, the simulation of transient flow behavior in pipelines is important for their design and operation. Classical and recent numerical schemes for solving hyperbolic conservation laws were analyzed regarding their accuracy and computational efficiency when applied to ideal and non ideal gas compressible flows as well as two-phase compressible flows using the two-fluid and the drift-flux models.

The Roe-Pike approximate Riemann solver with entropy correction, the Harten second-order scheme and the extension of the Roe-Pike method to second-order by the MUSCL-Hancock strategy were compared for one-dimensional flows of an ideal gas. These methods require the so-called Roe's average state, which is frequently difficult and sometimes impossible to obtain. Other methods that do not require the average state are best suited for complex equations of state. Of these, the VFRoe, AUSM+ and Hybrid Lax-Friedrich-Lax-Wendroff (HLFW) methods were compared for one-dimensional compressible flows of a Van der Waals and Redlich-Kwong gases. All methods were evaluated regarding their accuracy for given mesh sizes and their computational cost for a given solution accuracy. It was shown that, even though they require more floating points and indirect addressing operations per time step, the second-order methods are less-time consuming than the first-order methods for a required accuracy. It was also shown that AUSM+ and VFRoe are the most accurate methods and that AUSM+ is much faster than the others, and it is thus recommended for non ideal one-phase gas flows.

Besides AUSM+ and HLFW, AUSMDV is other method which is not based on Riemann-solvers. These methods and their extension to second-order MUSCL-AUSM+ and MUSCL-AUSMDV have been extended to two-phase flows. The eigenstructure of the two-fluid model is complex due to the phase interactions leading to numerous numerical difficulties. One of them is the well-posedness of the equation system because it may lose hyperbolicity. Therefore, the methods which are not based on the wave structure are best suited for these flows. However, they are not TVNI and they could lead to strong oscillations. The common strategy to handle this problem is the adoption of a pressure correction due to interfacial effects. In this work, this procedure was extended to HLFW and AUSM-type methods and their results analyzed. The AUSM+ and AUSMDV were extended to achieve second-order using the MUSCL-Hancock strategy for which a conservative formulation was tested. Additionally, several AUSMDV weighting functions were compared.

The first and second-order AUSM-type and HLFW methods were compared for the solution of the water faucet and the shock tube benchmark problems. The pressure correction strategy was efficient to ensure hyperbolicity but numerical diffusion increased. The MUSCL-AUSMDV and HLFW methods with pressure correction strategy were, in average, the best of the analyzed methods for these test problems. The HLFW was more stable than the other methods when the pressure correction was considered. A shock tube problem with the drift-flux model was used to validate the code. Finally, terrain induced slugging and simulations with imposed increasing gas mass flow rates were performed with various closure relations for both drift-flux and two-fluid models. All methods were implemented in the FORTRAN95 objected-oriented code TITÃS.

ÍNDICE

Capítulo 1 - Introdução **1**

Simuladores de Escoamento em dutos 4

Escoamento Compressível 7

Métodos numéricos 7

Objetivos 11

Organização desta tese 13

Capítulo 2 - Modelagem de escoamentos compressíveis mono e multifásico **14**

2.1. Escoamento compressível monofásico 14

2.2. Escoamento compressível multifásico 16

2.2.1 – Introdução 16

2.2.2 – Histórico dos modelos de Two-fluid e Drift-flux 18

2.2.3 – O modelo de dois fluidos (two-fluid) 24

2.2.4 – O modelo drift-flux 30

2.2.5 – O modelo de quase-equilíbrio 31

2.2.6 – Relações de fechamento 31

2.3. A intermitência severa 41

Capítulo 3 - Sistema de equações diferenciais hiperbólicas: métodos de solução baseados no problema de Riemann **46**

3.1. Introdução 46

3.2. Noções sobre equações diferenciais hiperbólicas 54

3.2.1 – Sistemas Hiperbólicos Lineares 54

3.2.2 – Sistemas Hiperbólicos Não Lineares 59

3.2.3 – Ondas de Choque e rarefação 60

3.2.4 – Condições de Rankine-Hugoniot e Invariantes de Riemann 63

3.3 Discretização por Volume Finitos, Esquema de Godunov e Solvers de Riemann 67

3.3.1 – Introdução 67

3.3.2 – Discretização por Volumes Finitos 71

3.3.3 – Esquema de Godunov e Solver de Roe 72

3.3.4 – Esquema MUSCL para aumento de ordem 76

3.4 Aplicação ao escoamento monofásico de gases ideais 78
3.5 Aplicação ao escoamento monofásico de gases reais 84
3.5.1 – Gás de Van der Waals 86
3.5.2 – Gás de Redlich-Kwong 87
3.5.3 – Aspectos termodinâmicos da solução do campo ondulatório 88

Capítulo 4 - Sistema de equações diferenciais hiperbólicas: métodos de solução não baseados no problema de riemann 91
4.1 Métodos do tipo AUSM 91
4.1.1 – Introdução 91
4.1.2 - Apresentação dos métodos 94
4.1.3 – Métodos tipo AUSM para escoamento bifásico 101
4.2 Método híbrido de Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff 105
4.2.1 – Introdução 105
4.2.2 – Descrição do método 105
4.3 Variáveis primitivas no escoamento bifásico 109
4.4 Discretização dos termos não conservativos 110
4.4.1 – Termos de transferência interfaciais 110
4.4.2 – Surgimento e desaparecimento de fases 111
4.4.3 – Termos fonte 112

Capítulo 5 - Resultados 114
5.1. TITÃS - Um simulador de escoamentos compressíveis, monofásicos ou bifásicos em dutos 114
5.1.1 – Introdução ao simulador TITÃS 114
5.1.1.1 Escoamento Monofásico Compressível - Módulo RÉIA 114
5.1.1.2 Escoamentos Bifásico – Módulos CRONOS e HERA 115
5.2 Condições de contorno e iniciais 116
5.2.1 – Escoamento monofásico 119
5.2.2 – Escoamento multifásico 122
5.2.3 – Condições iniciais 125
5.3. Comparação dos métodos para escoamento compressível monofásico 126
5.3.1 –Gases Ideais 126
5.3.1.1 Problemas de choque 126

5.3.1.2 Partida isotérmica de gasoduto 137
5.3.2 –Gases Reais 148
5.4. Comparação dos métodos para escoamento compressível bifásico 162
5.4.1 – Módulo HERA - Escoamentos multifásicos a baixa velocidades 162
5.4.2 –Escoamentos multifásicos a altas velocidades- Módulo ZEUS 167
5.4.2.1 Choque em dutos com modelo two-fluid 167
5.4.2.2 Jato d'água (Water Faucet) 182
5.4.2.3 Choque em duto com o modelo de mistura 191
5.4.2.4 Transiente em dutos horizontais 193
5.4.2.5 Intermitência promovida pelo terreno 209

Capítulo 6 - Conclusões 217
Referências Bibliográficas 223
Apêndice A – Modelo de quase-equilíbrio 239
Apêndice B – Simulador TITÃS 244

NOMENCLATURA POR CAPÍTULO

Capítulo 2

A	área da seção
C	curvatura da interface
C_0	parâmetro da relação de deslizamento (*slip*)
C_D	coeficiente de arraste
C_{vm}	coeficiente de massa virtual
D	diâmetro
e	energia interna específica
E	energia total por unidade de volume, $E = \rho\left(v^2/2 + e\right)$
$\dot{E}$	taxa de troca de energia total
E^m	taxa de geração de energia pela interface
$E^m{}_H$	taxa de geração de energia total pela interface devido à curvatura
f	fator de atrito
g	aceleração da gravidade
h	entalpia específica, $h = e + p/\rho$
H^{21}	raio de curvatura da interface
$\underline{\underline{I}}$	matriz identidade
l	comprimento
L_s	inverso da área interfacial específica
$\dot{m}$	fluxo mássico
M^k	taxa de troca de massa entre as fases
$\underline{n}$	vetor normal
p	pressão
q	fluxo térmico
$\dot{Q}$	taxa de geração de calor
t	tempo
$\underline{v}$	vetor velocidade
$\underline{v}_r+$	velocidade relativa para cálculo de atrito interfacial
V	variável qualquer

$\overline{V}$	média temporal de uma variável *V* qualquer
$\overline{\overline{V}}^{k}$	média na fase de uma variável *V* qualquer
W	trabalho
x	coordenada espacial

LETRAS GREGAS

Símbolo	**Descrição**
α	fração volumétrica
$\Im$	função indicadora de fase
Γ	taxa de troca de momento
Γ^{k}	taxa de troca de *momentum* entre as fases
Γ^{d}_{k}	taxa de troca de *momentum* entre as fases por arrasto
Γ^{m}	taxa de geração de *momentum* pela interface
Γ^{m}_{H}	taxa de geração de *momentum* pela interface devido à curvatura
δ_i	espessura da interface
ζ	parâmetro de pequeno valor na função Q
ψ	variável extensiva
ρ	massa específica
τ	tensor tensão
σ	tensão superficial
θ	ângulo entre a direção do escoamento e a horizontal

SUBSCRITOS

Símbolo	**Descrição**
d	*drift*
f	referente ao filme de líquido da unidade *slug*
j	valor na célula *j*
g	referente à fase gasosa
gs	variável superficial do gás
l	referente à fase líquida
ls	variável superficial do líquido

m	referente à mistura
r	variável relativa entre as fases
s	referente ao pistão de líquido da unidade *slug*
t	referente à parte traseira da unidade *slug*
w	referente à parede

SOBRESCRITOS

Símbolo	**Descrição**
k	relacionado à fase k
k_i	relacionado à fase k na interface
i	relacionado à interface
T	relacionado à turbulência

Capítulo 3

LETRAS LATINAS

Símbolo	**Descrição**
A_{AUSM}	constante auxiliar do método AUSM+
a_{RK}	parâmetro no EdE de Redlich-Kwong
a_{vw}	parâmetro no EdE de Van der Waals
$\underline{\underline{A}}$	matriz jacobiana
$\underline{\underline{\tilde{B}}}$	matriz de parâmetros de Roe
b_{AUSM}	auxiliary AUSM+ constant
b_{cv}	parâmetro da EdE de covolume
b_{RK}	parâmetro no EdE de Redlich-Kwong
b_{vw}	parâmetro da EdE de Van der Waals
c	velocidade do som
C	parâmetro da equação de estado isentrópica
$\underline{\underline{\tilde{C}}}$	matriz de parâmetros de Roe
C_p	calor específico a pressão constante

C_v	calor específico a volume constante
D	diâmetro
e	energia interna específica
E	energia total por unidade de volume, $E = \rho\left(0{,}5v^2 + e\right)$
$\underline{f}$	vetor fluxo
$\underline{F}$	vetor fluxo numérico
f_{at}	fator de atrito
$\underline{g}$	vetor de termos não homogêneos nas equações de conservação
$\underline{\tilde{g}}$	função auxiliar do método de Harten
G	derivada fundamental
$\underline{\underline{K}}$	matriz de autovetores
h	entalpia específica, $h = e + p/\rho$
$\tilde{h}$	função auxiliar no método de Harten
H	entalpia específica total, $H = 0{,}5v^2 + h$
$\underline{L}$	autovetores esquerdos da matriz jacobiana
m	fluxo mássico
$\underline{\underline{Mx}}$	matrizes de coeficientes das eqs. de Navier-Stokes e continuidade após discretização (x= u, v, w ou p)
p	pressão
$\underline{\tilde{q}}$	vetor de parâmetros de Roe
Q_v	função viscosidade no método de Harten
$\dot{Q}$	taxa de geração/consumo de energia
$\underline{R}$	autovetores direitos da matriz jacobiana
$\Re$	constante universal dos gases / massa molecular
s	entropia
s(t)	descontinuidade
$\tilde{S}$	variável auxiliar no método de Harten
t	tempo
T	temperatura
$\underline{u}$	vetor de variáveis
$\underline{u}_{exact}$	solução do RP local

$\underline{U}$	vetor de variáveis inicialmente alteradas no esquema MUSCL
$\underline{\overline{U}}$	vetor de variáveis reconstruídas pelo esquema MUSCL
v	velocidade
$\bar{v}$	volume específico
x	coordenada espacial
$\bar{x}$	coordenada espacial local
$\underline{w}$	vetor de variáveis não conservativas ($\underline{w} = \left[\alpha_g, v_g, v_l, p\right]^t$)

LETRAS GREGAS

Símbolo	**Descrição**
α	intensidade de onda
$\underline{\tilde{\beta}}$	variável auxiliar no método de Roe-Pike e Harten
γ	razão dos calores específicos, $\gamma = C_p/C_v$
$\tilde{\gamma}$	função auxiliar do método de Harten
Γ	variável auxiliar do esquema MUSCL
δ_{vw}	parâmetro da EdE de Van de Waals, $\delta_{VW} = \Re/C_v$
Δ	variação
$\underline{\Delta}$	variável auxiliar do esquema MUSCL
ε	razão $\Delta t/\Delta x$
$\underline{\underline{\Lambda}}$	matriz de autovalores
ζ	parâmetro de pequeno valor na função Q_v
θ	fração implícita da integração temporal
λ	autovalor da matriz jacobiana
Π	derivadas termodinâmicas
ρ	massa específica
$\underline{\tilde{\upsilon}}$	variável auxiliar nos métodos Roe-Pike e Harten
ς	volume específico
Ω	Função auxiliar no método de Harten

SUBSCRITOS

Símbolo	**Descrição**
j	valor na célula j
j+1/2	valor em $x_{j+1/2}$ (face da célula)
L	estado à esquerda
R	estado à direita
0	valores iniciais

SOBRESCRITOS

Símbolo	**Descrição**
n	valor no instante n
k	relacionado à k-ésima onda
*	indica valor no estado estrela

SUPERSCRITOS

Símbolo	**Descrição**
~	designa valor calculado no estado intermediário

Capítulo 4

LETRAS LATINAS

Símbolo	**Descrição**
A_k	parâmetro da EdE
$\underline{B}$	vetor de termos não-conservativos
c	velocidade do som
C_d	coeficiente de arraste
C_p	calor específico à pressão constante
C_v	calor específico à volume constante
CFL	número de Courant-Friedrichs-Lewy, CFL = $\Delta t\ (c+\max(v))/\Delta x$
$\underline{f}$	vetor fluxo

$\underline{F}$ vetor fluxo numérico

F_k^D força de arraste na interface e parede

F_k^{Di} força de arraste na interface

F_k^{Dw} força de arraste na parede

g_x componente na direção *x* do vetor aceleração da gravidade

$\underline{g}$ vetor de termos não homogêneos nas equações de conservação

G derivada da função convexa do método HLFW

h entalpia específica

H entalpia total

$\underline{\lambda}$ função para tratamento de frações volumétricas próximas de 0 e 1

$\dot{m}$ fluxo mássico

M número de Mach

p pressão

P_k parte acústica do fluxo

p_i pressão interfacial

$\wp^{\pm}$ polinômios do método AUSM+ para a parte acústica do fluxo

S função convexa do método HLFW

t tempo

$\underline{u}$ vetor de variáveis ($\underline{u} = [\alpha_g \rho_g, \alpha_g \rho_g v_g, \alpha_l \rho_l, \alpha_l \rho_l v_l]^t$)

$w^{\pm}$ função de ponderação do método AUSMDV

v velocidade

x coordenada espacial

Y variável usada pela função de ponderação do método AUSMDV

LETRAS GREGAS

Símbolo Descrição

α fração volumétrica

η função dissipação

σ parâmetro de correção interfacial

Δ variação

ε razão $\Delta t/\Delta x$

γ	razão dos calores específicos, $\gamma = C_p/C_v$
ι	fator de atrito
$\mu^{\pm}$	polinômios dos métodos AUSM
Π	parâmetro da EdE
$\underline{\psi}_k$	parte advectiva do fluxo
Ψ	fluxo de entropia
ρ	massa específica
θ	função de ponderação do método HLFW
χ	parâmetro do método Lax-Wendroff modificado

SUBSCRITOS

Símbolo	**Descrição**
j	valor na célula j
j+1/2	valor em $x_{j+1/2}$ (na face)
k	denota fase k

SOBRESCRITOS

Símbolo	**Descrição**
AUSM	relacionado do método AUSM
c	parte convectiva do fluxo
L	estado à esquerda
LW	relacionado do método Lax-Wendroff modificado
LWO	relacionado do método Lax-Wendroff original
MLF	relacionado do método Lax-Friedrichs modificado
n	valor no instante *n*
R	estado à direita
±	relativo às ondas que se propagam para a direita e esquerda

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Redes de escoamento constituem importante item de investimento e de custeio associado ao processamento e transporte de fluidos em sistemas industriais como redes de gasodutos, oleodutos, redes de distribuição de combustíveis, redes de distribuição de matérias-primas e produtos em plantas químicas e refinarias de petróleo, plantas de geração de energia nuclear, plataformas *offshore* (marítimas) de gás e óleo, etc. A maioria dos acidentes nestas aplicações industriais acarretam a emissão de materiais tóxicos, radioativos, inflamáveis e explosivos. A sua contínua monitoração, simulação e otimização, em tempo real, são, portanto, essenciais à materialização de projetos viáveis, bem como à obtenção de regimes operacionais seguros e próximos da condição econômica ótima e, ainda, para a avaliação das conseqüências em casos de acidentes. Devido aos seus grandes tamanho e capacidade, vazamentos para o ambiente são notoriamente apontados como as principais causas de incêndios vinculados, por exemplo, à indústria do petróleo.

Quando é realizado o projeto de uma plataforma de produção e processamento primário de petróleo, a avaliação do escoamento nas tubulações tanto submarinos (*subsea*) quanto na plataforma (*topside*) é de suma importância. Quando um engenheiro tem a tarefa de fazer o projeto de uma linha de transporte multifásico, ele deverá a executar programas de computador que usam modelos estacionários e/ou transientes para cálculo de queda de pressão, fração de cada fase, efeitos de fechamento de válvulas, etc. Inicialmente, diversas correlações empíricas para cálculos estacionários foram desenvolvidas. No entanto, essas correlações estão restritas a sistemas similares àqueles para os quais foram obtidas (mesmos diâmetros, mesmos fluidos, etc.). Com o aumento das escalas dos dutos, com a exploração *offshore* em grandes profundidades e com as restrições associadas a aspectos econômicos, de segurança e relativos ao meio ambiente, a solução usando modelos baseados em fluidodinâmica fez-se necessária. Afinal, a acurácia das correlações empíricas, obtidas quase sempre em sistemas de pequenas escalas e com pouca variação das propriedades dos óleos, é fortemente

prejudicada pelos efeitos da profundidade sobre a transferência de calor que, pelas dimensões consideradas em casos reais de operação, leva a uma forte variação das propriedades dos fluidos. A viabilidade econômica da produção de campos de óleos pesados dependerá fortemente dos custos de produção que, por sua vez, dependem dos métodos de elevação artificial utilizados. A predição acurada do comportamento dos sistemas de produção torna-se importante fator na redução dos riscos de investimentos *offshore*. Normas nacionais e internacionais de segurança e ambientais acarretam grandes restrições ao projeto e operação dos sistemas industriais. Atualmente, restrições de BSW (teor de sedimentos e água) nos óleos exportados das plataformas de produção exigem um projeto adequado de processamento primário.

Os equipamentos de processamento primário devem ser projetados para uma dada curva de produção que informa as vazões de óleo, água e gás e, também, as frações de cada uma destas fases. Estes equipamentos de separação possuem grande restrição de tamanho e peso em função de critérios técnicos e econômicos, visto que o custo do metro quadrado de uma plataforma *offshore* é tão elevado quanto o dos bairros mais nobres das grandes cidades. Freqüentemente, não é possível projetar os equipamentos para os picos de vazões que ocorrem quando o escoamento intermitente (*slug*) se forma nos *risers* de produção. Sendo assim, flutuações deverão ser absorvidas pela planta de processamento primário. *Slug catchers* são equipamentos pulmão que servem para absorver essas flutuações. No entanto, este equipamento também, por vezes, não pode ser usado devido à falta de espaço. Em condições severas de escoamento intermitente (*severe slugging*) uma válvula do tipo *choke* é parcialmente fechada para reduzir tais efeitos reduzindo, porém, a produção. Válvulas de controle podem ser usadas para combater a intermitência severa, mas precisam de um algoritmo de controle robusto que possa prever o comportamento extremamente não linear do escoamento nas linhas de produção. Além disso, as válvulas de controle deverão ser de falha aberta. No entanto, se após um longo período de restrição da vazão, a válvula falha, abrindo-se bruscamente, grandes vazões de gás podem ser observadas e até mesmo a necessidade de abertura de válvulas de segurança para alívio de pressão. Por estas razões, é de suma importância que se tenha bons simuladores transientes de escoamentos multifásicos.

Com relação à segurança, a simulação transiente é útil quando aplicada à previsão de inventários de vazamentos nas linhas onde ocorrem escoamentos monofásicos e multifásicos. Estes inventários podem dar uma idéia tanto da gravidade dos cenários quanto servem de dados de entrada para simuladores de dispersão de gases e explosões que usam a taxa de vazamento como termos fonte do material de interesse (gases tóxicos, inflamáveis, etc.). A aplicação de métodos de solução de sistemas hiperbólicos é usual nos programas de computador (*softwares*) para simulação da propagação de ondas de choque provenientes de explosões. Estudos de análise de riscos são atualmente obrigatórios para os projetos novos de E&P (exploração e produção) e envolvem CFD (Fluidodinâmica Computacional) nos cálculos de dispersão de gases tanto em regiões restritas, como pequenas salas, quanto em conveses (decks) inteiros. Estudos de explosões também exigem o uso de CFD. A previsão das ondas de choque (*blast waves*) em distâncias superiores àquelas atingidas pela combustão é essencial para o projeto estrutural. No caso da PETROBRAS, o uso de CFD é regulamentado pela Filosofia de Segurança que é um documento interno que tem que ser obedecidos durante a fase de projeto e de operação das plataformas. Nesta área, pouca importância tem sido dada à predição das taxas de vazamento, que são dados de entrada para as simulações citadas. O cálculo destas taxas envolve simulações unidimensionais em dutos mono ou bifásicos. Devido às grandes quedas de pressão envolvidas, espera-se que o caráter hiperbólico das equações se manifeste exigindo o uso de métodos adequados. Durante o período inicial do vazamento, o caráter hiperbólico das equações de conservação será marcante e altas taxas de vazamento serão observadas. Em um curto período de tempo o estado estacionário será atingido e as taxas de vazamento são reduzidas. A princípio, é difícil determinar esse período.

Além disso, a determinação de *set-points* de válvulas de segurança também pode ser baseada na simulação transiente. Freqüentemente, válvulas encontradas nas árvores de natal molhadas são responsáveis pela segurança da plataforma, interrompendo a produção, quando for necessário. O fechamento acidental de uma válvula na plataforma poderá elevar a pressão nas instalações de superfície acima do valor limite correspondente à classe de pressão adotada no projeto. Sendo assim, as válvulas na árvore de natal deverão ser fechadas para evitar esse aumento de pressão. Essas válvulas

precisam de um tempo para o seu completo fechamento. Portanto, após o controlador enviar o sinal para fechamento das válvulas na árvore de natal ainda ocorrerá um aumento de pressão, e o *set-point* deverá contemplar este aumento, ou seja, tendo um valor inferior à pressão permitida pela classe de pressão. Por outro lado, este *set-point* não poderá ser demasiadamente reduzido, pois flutuações normais de produção poderiam acarretar em paradas de produção. Com a simulação transiente, é possível obter o comportamento transiente de aumento de pressão na plataforma e escolher um valor de pressão para o *set-point*.

Nos gasodutos, a simulação dinâmica tem várias aplicações. Os gasodutos mantêm gás comprimido e uma vez que haja falta de gás na alimentação dos mesmos, ter-se-á o suprimento em termoelétricas, por exemplo, mantido durante um certo período. A simulação dinâmica pode ser usada tanto para estudo de logística, quanto na fase de projeto para determinação do tamanho das linhas a serem utilizadas ou de *loops* para armazenamento de gás próximo à demanda. Com relação à segurança, o mesmo que foi dito para a produção/processamento de óleo é valido para os gasodutos.

SIMULADORES DE ESCOAMENTO EM DUTOS

A partir dos anos 80 diversos simuladores comerciais foram desenvolvidos, dentre eles, o RELAP (Ransom *et al.*, 1982), o TRAC (Borkowski e Wade, 1982) , o CATHARE (Micaelli, 1987), o PLAC (Black *et al.*, 1990), o OLGA (Bendiksen *et al.*, 1987 e 1991), o TACITE (Pauchon *et al.*, 1993 e 1994), criados pelos laboratórios mais conceituados de universidades e empresas tanto européias quanto americanas. O OLGA e o PLAC, originados da Noruega e da Inglaterra, respectivamente, foram inicialmente desenvolvidos para a indústria nuclear, que normalmente apresenta dinâmicas rápidas, enquanto, nas indústrias de petróleo, o mais comum é uma dinâmica relativamente lenta (Masella *et al.* 1998). Sendo assim, Taitel *et al.* (1989) e Taitel e Barnea (1997) propuseram a utilização de um modelo em quase-equilíbrio no qual a equação de conservação de momento é suposta estacionária, sendo o transiente restrito à equação da continuidade. Esta abordagem, porém, apresenta resultados insatisfatórios para problemas com considerável aceleração das fases. Nas situações em que grandes

flutuações de vazão e pressão ocorrem, os modelos simplificados, usualmente estacionários e empíricos, falham grosseiramente. Algumas destas situações típicas são:

- Alternância de escoamento bifásico com escoamento monofásico devido a despressurização e/ou pressurização, o que pode ocorrer devido ao fechamento de válvulas, acidentes geográficos pelos quais a linha passa, ou ainda, devido à ruptura da linha ou abertura de válvulas para alívio de gás (*blowdown*).
- Intermitência promovida pelo terreno - variações na geografia pela qual um duto passa pode provocar grandes variações na distribuição das fases e, portanto, provocar grandes acelerações que os modelos simplificados não conseguem predizer.
- Partida e parada de operações envolvendo escoamentos multifásicos em dutos. Um exemplo deste tipo de problema é o estabelecimento de *set-points* de controle de válvulas de bloqueio descrito anteriormente.

Algumas das linhas de trabalho relacionadas ao desenvolvimento de modelos unidimensionais são:

- Desenvolvimento de modelos simplificados - tem o objetivo de acelerar a simulação de escoamentos bifásicos, evitando problemas de convergência e aumentando a eficiência na simulação de escoamentos transientes quando comparados às correlações empíricas. A simplificação mais comum é a utilização de modelos de quase-equilíbrio, baseada no fato de que os escoamentos bifásicos em dutos mais comuns na indústria de petróleo possuem dinâmica de resposta relativamente lenta (Taitel e Barnea, 1997). Esta abordagem fornece resultados bem superiores aos modelos empíricos, porém ainda falham em diversas situações, dependendo das velocidades observadas.
- Desenvolvimento de métodos de previsão do padrão do escoamento - tem por objetivo melhorar a qualidade das simulações dinâmicas que se caracterizam pela possibilidade da ocorrência de variação do padrão de escoamento em cada trecho do duto e ao longo do tempo. A dificuldade dessa previsão se deve ao grande número de variáveis envolvidas, podendo haver situações nas quais as

correlações disponíveis para previsão do padrão não são válidas (Dziubinski *et al.*, 2004, Lovick e Angeli, 2004). Na realidade, a previsão do padrão de escoamento é altamente não linear e para a solução implícita do sistema de equações a configuração deve ser previamente conhecida, o que não ocorre. Assim sendo, deve-se supor um padrão e, após a atualização das variáveis para o próximo instante de tempo, os novos valores devem corresponder ao padrão suposto, caso contrário, deve-se adotar um novo padrão e refazer a atualização das variáveis, gerando um processo iterativo.

- Relações de fechamento dos modelos - para a utilização dos modelos baseados em conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia, necessita-se de relações constitutivas ou empíricas, geralmente particulares para cada tipo de padrão de escoamento. Destaca-se nesta linha, a obtenção de relações para cálculo dos fluxos das grandezas conservativas pela interface entre dois fluidos que é objeto de estudo da termodinâmica de processos irreversíveis.

O TACITE e o RELAP são exceções à regra na qual os simuladores comerciais são baseados em métodos numéricos que apresentam elevada difusão numérica que proporciona redução gradientes obtidos numericamente em relação à realidade. O TACITE é desenvolvido pela empresa TOTAL e também por pesquisadores das universidades francesas e do IFP (Instituto Francês do Petróleo). Tanto o TACITE quanto o RELAP são baseados em métodos numéricos que calculam a estrutura ondulatória do escoamento, apresentando reduzida difusão numérica e elevada robustez e acurácia. No entanto, os modelos unidimensionais ainda necessitam de elevado grau de empirismo para cálculo de efeitos de transferência de calor, energia e *momentum*, dependendo ainda de correlações experimentais. Quanto a este ponto, o OLGA leva vantagem, pois é baseado em um banco de dados mais extenso.

Em um trabalho anterior (Coelho *et al.* 1999a, 1999b, 2000) desenvolveram um sistema computacional para o gerenciamento de redes de escoamento incompressível dotado de: (i) modelagem estacionária de redes de topologia variável permitindo simulação do sistema a partir de um quadro mínimo de medições; (ii) algoritmo para reconciliação não linear de dados e estimação de parâmetros do sistema e de variáveis

não medidas a partir de quadros redundantes de medições; (iii) analisador estatístico dos resultados da reconciliação e estimação quando a variância é desconhecida. Desenvolveu-se metodologia para detecção simultânea de múltiplos vazamentos, regras heurísticas para acelerar buscas destes por aquela metodologia, e teste estatístico para variâncias desconhecidas diferentemente do encontrado na literatura. Além das aplicações citadas anteriormente, uma extensão da metodologia de detecção de vazamentos pode ser conseguida pela inclusão de modelos físicos mais complexos como escoamentos compressíveis, bifásicos e transientes. No entanto, este é um passo ainda longínquo, pois este tipo de modelagem estatística parte do princípio que os modelos físicos e suas soluções numéricas são suficientemente confiáveis ao ponto de questionarem medições de instrumentos instalados nas linhas reconciliando-as frente ao modelo.

ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL

A simulação do escoamento compressível mono e bifásico em diversas aplicações como as citadas dependem da solução de sistemas de equações diferenciais parciais não lineares com advecção predominante. A dominância da advecção leva o sistema de equações diferenciais a ser hiperbólico. A solução desses sistemas freqüentemente é composta por descontinuidades devido à ondas de choque.

MÉTODOS NUMÉRICOS

O método dos Volumes Finitos é o mais popular para a solução de equações de conservação de sistemas hiperbólicos. Sua formulação, baseada na forma integral das equações, permite uma melhor interpretação das equações discretizadas.

Os métodos numéricos capazes de capturar descontinuidades e, portanto, representar, com reduzida difusão numérica, elevados gradientes das variáveis físicas, são o objeto deste estudo (desta tese de doutorado). Estes métodos foram desenvolvidos sobre forte base matemática aplicada ao estudo das equações diferenciais hiperbólicas. Esta é a característica das equações de transporte com dominância da advecção. A

extensão destes métodos a equações com caráter parabólico ou elíptico é normalmente realizada tomando-se os termos de difusão de massa, energia e momento como termos fonte.

As equações diferenciais hiperbólicas aparecem em diversos problemas de engenharia como escoamentos compressíveis mono ou multifásicos, acústica, ótica, geofísica, etc. Os métodos ditos de Volumes Finitos de Alta-Resolução (*High-Resolution Finite Volume*) têm provado serem úteis na solução de diversos problemas de engenharia. O desenvolvimento destes métodos se deu marcantemente na área de escoamento compressível monofásico para problemas de aeronáutica, astrofísica, detonação, dentre outros casos onde ondas de choque estão presentes. Geralmente, estas são as áreas de aplicação nas quais novas formulações de métodos numéricos são testadas. As equações de Euler, que descrevem os problemas citados, são não-lineares, podendo gerar ondas de choque, que trazem diversas dificuldades numéricas e matemáticas, que motivaram o desenvolvimento dos métodos de alta-resolução. Duas referências recomendáveis são os livros de Toro (1999), intitulado *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Mechanics*, e o de Leveque (2002), intitulado *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*.

O clássico método *upwind* foi desenvolvido primeiramente para sistemas lineares. Sua extensão para sistemas não lineares foi proposta por Godunov (1959) dando origem ao método de mesmo nome. Este método baseia-se na solução de um clássico problema matemático, o Problema de Riemann. O método de Godunov é de primeira ordem, levando à excessiva difusão das grandezas conservadas. Métodos de maior ordem, como o clássico método de Lax-Wendroff, foram desenvolvidos. No entanto, se os métodos de primeira ordem tendem a apresentar elevada difusão numérica, os de segunda ordem tendem a apresentar oscilações (*overshooting*) próximas aos elevados gradientes, que são chamadas de dispersões numéricas. A extensão do método de Godunov para ordens superiores deu origem aos métodos de alta-resolução que introduzem limitações nos fluxos numéricos, reduzindo tanto a difusão quanto a dispersão numéricas.

Basicamente, os métodos de ordem superior devem apresentar uma limitação ao fluxo por eles calculado. A questão é: quando e em que quantidade fazê-lo? Harten (1983) definiu o conceito de TVD (*Total Variation Diminishing*), que na realidade, tornou-se uma propriedade que define uma certa classe de métodos, os métodos TVD. A variação total da solução u de uma EDP é definida como $\mathrm{TV}(u^n)=\sum_{j=-\infty}^{\infty}|u_j^n-u_{j-1}^n|$ onde j e j-1 indicam dois pontos discretos consecutivos. Um método TVD deverá apresentar a variação total não crescente ao longo do tempo, ou seja, para os instantes t^n e t^{n+1} tem-se que $\mathrm{TV}(u^{n+1})\leq\mathrm{TV}(u^n)$. Na realidade, a terminologia mais adequada, mas quase não usada, é TVNI (*Total Variation NonIncreasing*). A importância dessa propriedade é que um método dessa natureza poderá até apresentar difusão numérica, mas nunca apresentará oscilações, pois, se a condição $u^n_j \geq u^n_{j+1}$ for verdade para qualquer instante t^n, ela o será para todos os instantes seguintes. Isto, na verdade, define outro tipo de método: os que preservam a monotonicidade. Todo método TVD é também deste tipo.

O método de Godunov exige a solução do problema de Riemann entre duas células com valores respectivos, u_j e u_{j+1}. A solução exata deste problema é extremamente custosa em termos computacionais. Sendo assim, diversos métodos aproximados foram propostos. Dois tipos de métodos são os mais populares, o *Flux Vector Splitting* (FVS) e o *Flux Difference Splitting* (FDS). O primeiro baseia-se na separação do vetor de fluxo nas faces das células em dois vetores representando as ondas que se propagam da esquerda para a direita e da direita para a esquerda. O segundo baseia-se no cálculo do fluxo em um estado intermediário entre os estados nas células à esquerda e à direita de uma dada face. Ambos os métodos apresentam formulações TVD e de alta-resolução. No entanto, a acurácia e a eficiência computacional destes métodos podem ser bastante distintas. Os FDS são baseados na solução aproximada do problema de Riemann, o que exige a decomposição do campo ondulatório correspondente à solução do problema hiperbólico. Este tipo de decomposição envolve o cálculo de autovalores e autovetores da matriz jacobiana do fluxo. O método mais conhecido do tipo FDS é o de Roe (1983) que se tornou extremamente popular e já é aplicado em softwares de CFD multi-propósito. Os métodos FVS não são baseados na solução do problema de Riemann.

Desta forma, são mais eficientes em termos computacionais mas são também menos acurados que os FDS.

No entanto, métodos híbridos alternativos têm sido propostos no intuito de reduzir o tempo de CPU exigido pelos métodos FDS e FVS, e não são baseados na solução do problema de Riemann. Recentemente, foi proposta uma família de métodos chamada de AUSM (*Advection Upwind Splitting Methods*, Liou e Steffen, 1993, Liou Wada e Liou, 1997, Liou, 1996 e Liou 2006). Esta família de métodos apresenta diversas vantagens em relação aos clássicos métodos de alta-resolução, como o de Lax-Wendroff, com acurácia equivalente aos métodos FDS, porém, com elevada redução no tempo de CPU. Recentemente, foi proposto também um método híbrido entre os clássicos métodos de Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff (De Vuyst, 2004). O segredo do sucesso desses métodos híbridos está na correta determinação dos pesos que terão o método de ordem inferior, geralmente de primeira ordem, e o método de ordem superior, geralmente de segunda ordem.

A literatura ainda apresenta uma escassez de estudos comparativos entre os métodos citados. Os resultados para cada método são mostrados para diferentes problemas e em diferentes fontes ficando difícil uma comparação. Diversas vezes, a comparação é realizada com intuito apenas de verificar a acurácia sem se preocupar com o custo computacional que o método proporciona. Isto dificulta a escolha dos métodos e a identificação de suas vantagens e desvantagens.

Para sistemas monofásicos, os métodos baseados na solução do problema de Rieamnn apresentam elevada acurácia e um tempo computacional aceitável. Existem diversos métodos disponíveis. No caso de problemas multifásicos, o tempo computacional exigido por estes métodos começa a ficar proibitivo. Além disso, a solução do problema de Riemann exige a obtenção de um dito estado intermediário, o qual é difícil, ou mesmo impossível, de ser obtido caso equações de estado cúbicas sejam empregadas ou dependendo da complexidade das equações hiperbólicas a serem resolvidas. Por esta razão, os métodos não baseados na solução do problema de Riemann têm se popularizado. Estes métodos possuem diversas formulações e

parâmetros que não foram objeto de um estudo mais detalhado. Além disso, é sabido que equações de estado cúbicas podem ser facilmente implementadas nos métodos não baseados na solução do problema de Riemann mas, no entanto, não há referências sobre estas soluções.

OBJETIVOS

Do exposto nas seções anteriores, pode-se listar os objetivos do presente trabalho de doutorado na simulação de escoamentos mono e bifásicos compressíveis unidimensionais.

(i) Analisar e comparar os métodos FDS de Roe, Harten e MUSCL-Roe baseados na solução do problema de Riemann para solução de problemas de choque em dutos e partidas de gasodutos com escoamento de gás ideal. A comparação é feita tanto do ponto de vista da acurácia quanto do desempenho computacional. O método de Roe, de primeira ordem, é estendido para segunda ordem pela popular técnica de reconstrução de dados MUSCL-Hancock, e foi chamado de MUSCL-Roe. Tanto as formulações MUSCL-Roe MINMOD quanto MUSCL-Roe SUPERBEE foram comparadas.

(ii) Analisar e comparar o método aproximado de Roe, de primeira ordem, desenvolvido pelos grupos franceses (Faille e Heintzé, 1999 e Buffard *et al.*, 2000) chamado de VFRoe e sua extensão a segunda ordem chamada de MUSCL-VFRoe, com o método híbrido AUSM+ e sua extensão a segunda ordem chamada de MUSCL-AUSM+, e com o método híbrido *Hybrid Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff* (HLFW) de segunda ordem. Com exceção do método VFRoe, os métodos não são baseados na solução do problema de Riemann. A comparação foi feita para escoamento monofásico compressível de gases reais. As EdE de Van der Waals e Redlich-Kwong foram empregadas. Neste caso, apenas problemas de choque em dutos foram usados.

(iii) Analisar e comparar os métodos híbridos, AUSM+, MUSCL-AUSM+, AUSMDV, MUSCL-AUSMDV e HLFW, não baseados na solução do problema de Riemann, para a solução de problemas de escoamentos bifásicos. Uma EdE simplificada para materiais reais é usada. São estudados problemas de referência (*benchmark*) de propagação de ondas de choque e fração de vazio. Simulações de problemas de escoamento bifásico em dutos horizontais devido à partida da operação e devido ao aumento da vazão de gás também são apresentadas. Os problemas foram resolvidos para dois modelos de escoamento bifásico, o modelo de dois fluidos (*two-fluid*) e o modelo de mistura (*drift-flux*). Um termo de correção de pressão interfacial foi usado para garantir a hiperbolicidade do modelo de dois fluidos. Finalmente, o fenômeno de intermitência severa foi simulado com o modelo de mistura com uma relação de fechamento complexa.

As inovações/contribuições apresentadas neste trabalho na realização dos objetivos acima são listadas a seguir.

(i) Extensão dos métodos VFRoe, MUSCL-VFRoe, AUSM+ e MUSCL-AUSM+ para a aplicação em EdE cúbicas, em especial para a EdE de Redlich-Kwong que não havia sido aplicada a nenhum destes métodos.

(ii) Comparação consistente dos métodos de Roe, Harten e duas formulações MUSCL-Roe, baseados na solução do problema de Riemann, tanto quanto a acurácia, quanto ao desempenho computacional para sistemas monofásicos com gás ideal.

(iii) Comparação consistente dos métodos VFRoe, baseado na solução do problema de Riemann, AUSM+, MUSCL-AUSM+ e HLFW, não baseados na solução do problema de Riemann, tanto quanto a acurácia quanto ao desempenho computacional para sistemas monofásicos com gás real.

(iv) Extensão do método HLFW para o modelo de mistura.

(v) Extensão do método HLFW para modelo de dois fluidos com correção de pressão interfacial.

(vi) Comparação consistente dos métodos AUSM+, MUSCL-AUSM+, AUSMDV, MUSCL-AUSMDV e HLFW, não baseados na solução do problema de Riemann, para sistemas bifásicos com EdE de material real. Foram usados problemas de propagação de ondas de choque, partida e variações de vazão de dutos com escoamento bifásico. Parâmetros do método AUSMDV, a intensidade da correção de pressão interfacial para o modelo de dois fluidos e diversos tamanhos de malha foram usados nas comparações, permitindo avaliar os efeitos dos valores destes parâmetros.

ORGANIZAÇÃO DESTA TESE

O trabalho foi dividido da seguinte maneira. No Capítulo 2, são apresentados os modelos básicos de escoamento monofásico, bifásico com os modelos de dois fluidos e de mistura compressíveis, um modelo em quase-equilíbrio simplificado, e as relações de fechamento para os modelos bifásicos. No Capítulo 3, uma base matemática para compreensão dos sistemas hiperbólicos e dos métodos numéricos baseados na solução do problema de Riemann é apresentada e aplicada à equação de Euler com EdE de gás ideal. No Capítulo 4, são apresentados os métodos híbridos de solução de sistemas hiperbólicos que não fazem uso da solução do problema de Riemann e suas aplicações ao escoamento de gases reais e sistemas bifásicos são discutidas. No Capítulo 5, são apresentados os resultados para sistemas monofásicos de gás ideal e gases reais e para sistemas bifásicos de materiais reais. O simulador TITÃS foi desenvolvido com base nesta tese de doutorado. No apêndice A, algumas características do simulador TITÃS são apresentadas. O simulador foi escrito em linguagem de programação FORTRAN 95, utilizando os recursos de programação orientada a objeto, o que permite a criação de variáveis estruturadas, *general interfaces*, permitindo a rápida adição de novos modelos, EdEs, relações constitutivas, termos fonte, condições iniciais e de contorno.

CAPÍTULO 2

MODELAGEM DE ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS MONO E MULTIFÁSICO

2.1. Escoamento compressível monofásico

O escoamento monofásico compressível apresenta uma modelagem clássica encontrada em livros de mecânicas dos fluidos e no livro de Toro (1999). Este modelo é composto pelas equações de conservação de massa, ou equação da continuidade, da quantidade de movimento e da energia, dadas por:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla.(\rho \underline{v}) = \dot{m} \\ &\frac{\partial}{\partial t}(\rho \underline{v}) + \nabla.(\rho \underline{v} \otimes \underline{v} + p \underline{\underline{I}}) = \underline{\Gamma} \\ &\frac{\partial}{\partial t}(E) + \nabla.[(E + p)\underline{v}] = \dot{Q} \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $\dot{m}$ é um termo fonte ou consumo de massa, devido a entrada ou retirada de massa no interior do domínio, por exemplo, $\underline{\Gamma}$ é uma força cisalhante que gera ou consume momento, como, por exemplo, as perdas viscosas e atrito, $\dot{Q}$ é um termo de difusão, consumo ou geração de energia, como por exemplo em reações químicas. Adicionalmente, ρ é a densidade, $\underline{v}$ é o vetor velocidade, E é a energia total, $\underline{\underline{I}}$ é a matriz identidade.

Se as seguintes hipóteses forem adotadas: (i) escoamento unidimensional; (ii) escoamento sem difusão, geração ou consumo de energia; (iii) sem consumo ou geração de massa, as equações (2.1) ficam:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0 \\
&\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v^2 + p) = \tau \\
&\frac{\partial}{\partial t}(E) + \frac{\partial}{\partial x}[v(E + p)] = 0
\end{aligned} \tag{2.2}$$

A solução deste sistema é tratada neste trabalho para a análise dos escoamentos compressíveis. O sistema deverá ser completado com a adoção de uma equação de estado. Esta equação poderá ser o modelo de gás ideal ou uma equação de um gás dito real. No capítulo seguinte será vista a importância da escolha da equação de estado sobre a dita hiperbolicidade do sistema. A tensão τ é representada por um termo que depende do fator de atrito, que, por sua vez, pode ser calculado por diversas correlações conhecidas.

2.2. Escoamento compressível multifásico

2.2.1 – Introdução

Basicamente, dois modelos são utilizados em simulação de escoamento multifásico em dutos: o modelo de dois fluidos ou *two-fluid* (Ishii, 1975) e o de mistura ou *drift-flux* (Truesdell e Toupin, 1960; Truesdell, 1969). O primeiro modelo é o mais geral, válido para uma grande variedade de sistemas multifásicos. Este modelo é também o mais utilizado em *softwares* de CFD (fluidodinâmica computacional) e é constituído de equações de conservação de massa, momento e energia para cada fase presente.

O modelo de mistura pode ser obtido a partir do modelo de dois fluidos quando as equações de conservação de momento e de energia para as fases são somadas obtendo-se uma equação de conservação das mesmas grandezas para a mistura como um todo. As velocidades das fases separadamente são obtidas a partir de uma relação adicional chamada de relação de deslizamento ou *slip*. Normalmente, o modelo de mistura é utilizado para escoamentos do tipo intermitente ou do tipo disperso (bolhas ou gotas). Nestes casos as velocidades das fases são próximas, enquanto que, em escoamentos estratificados, o modelo de dois fluidos é preferido (Sarica, 2006). Devido ao grande número de problemas simulados neste trabalho e ao desejo de se ter em mãos um simulador o mais completo possível, ambos os modelos foram implementados.

Para problemas multidimensionais, além destes modelos, outros foram propostos. No entanto, todos podem ser obtidos a partir do modelo de dois fluidos. Um exemplo, de modelo usado nos *softwares* de CFD é o VOF (*Volume of Fluid*, Nichols e Hirt, 1975). Freqüentemente, os manuais afirmam erroneamente que este modelo é o mais apropriado para escoamentos de superfície livre. Ao se realizar testes com esses mesmos *softwares*, esta impressão é reforçada. No entanto, o que não é explicado nos manuais é que esse fato é conseqüência de como cada modelo é resolvido. O modelo VOF resolve apenas equações para a mistura com um todo, acarretando em limitações quando aplicado à sistemas com diferença de velocidade marcante entre as fases. No entanto, uma equação hiperbólica para a fração volumétrica das fases é resolvida com um método numérico especialmente desenvolvido para solução desse tipo de equação,

reduzindo a difusão numérica. O modelo de dois fluidos, diversas vezes chamado simplesmente de Euleriano pelos *softwares* comerciais de CFD, pode prever melhor as variáveis de escoamento. No entanto, para este modelo, os *softwares* comerciais utilizam métodos numéricos com grande difusão numérica quando comparados com os métodos usados para solução das equações do modelo VOF. Sendo assim, as vantagens do modelo de dois fluidos são perdidas em relação ao VOF devido ao método numérico selecionado. Se imaginarmos uma onda de fração volumétrica se propagando, nos *softwares* comerciais, o modelo de dois fluidos será capaz de prever corretamente sua posição, porém, com grande difusão numérica. O modelo VOF será capaz de remover a difusão numérica mas poderá predizer uma posição errada para a onda. Obviamente, estes efeitos serão mais ou menos acentuados dependendo das condições de escoamento. Isso mostra a importância do conhecimento da natureza dos modelos e dos métodos numéricos envolvidos.

Comparações entre as soluções dos modelos devem ser baseadas nas mesmas formulações numéricas para ambos os modelos. Por sua vez, comparações entre métodos numéricos devem ser feitas para o mesmo modelo e mesma malha, quando se quer avaliar a acurácia do método, ou mesma acurácia para malhas diferentes, quando se quer comparar o desempenho computacional dos métodos. Esse tipo de análise também é objeto de estudo desta tese e será oportunamente apresentada.

Neste capítulo, apenas os modelos serão discutidos, sem abordagem de aspectos numéricos. Este capítulo está composto pelos seguintes itens: (i) o modelo de fluidos; (ii) o modelo de mistura; (iii) modelo de quase-equilíbrio e (iv) as relações de fechamento.

2.2.2 – Histórico dos modelos de dois fluidos e de mistura

Do ponto de vista matemático, o escoamento multifásico pode ser tratado por equações de campo para as fases com contornos móveis onde condições de salto podem ser impostas. Isso possibilita a obtenção de um modelo de dois fluidos local e instantâneo. No entanto, esse modelo deve ser aplicado a um sistema com múltiplos contornos móveis com acoplamento entre as condições de contorno de cada campo. As equações locais e instantâneas podem ser aplicadas às fases com as condições de salto e de contorno interfaciais mas não podem conter qualquer sub-região da outra fase devido à hipótese de continuidade.

As condições de salto são equações de conservação para a interface e exigem adicionalmente a imposição de condições de contorno interfaciais, as quais são equações constitutivas para a interface (Ishii, 1975). Estas são, normalmente, obtidas a partir de restrições em relação à entropia e são obtidas pelos argumentos da termodinâmica de processos irreversíveis, proporcionando equações para os fluxos na região da interface em acordo com os princípios da mecânica do contínuo.

Freqüentemente, embora o sistema como um todo não esteja em equilíbrio termodinâmico, supõe-se que, localmente, na interface, este equilíbrio ocorra. Com isso, a produção de entropia através da interface é nula e os processos de transferência de grandezas conservativas através da interface é dominado pelas condições no seio das fases.

No entanto, tanto o modelo de dois fluidos como o modelo de mistura tem formulações baseadas em variáveis médias que podem ser resolvidas para escoamentos turbulentos sem a utilização de supercomputação, o que não ocorre para a formulação local e instantânea. Na realidade, no processo de média do modelo de dois fluidos, a informação a respeito das descontinuidades são perdidas, levando a um modelo com equações de transporte médias para cada fase que, certamente, não tem maior rigor que o modelo de mistura. Sendo assim, não é de se estranhar que o modelo de mistura possa ser obtido pela soma das equações do modelo de dois fluidos médio. Apenas alguma informação específica, usualmente sobre o escorregamento entre as fases, deverá ser

obtida por equação adicional relacionando as grandezas conservativas à informação desejada.

Já o modelo de dois fluidos local e instantâneo não reproduz o modelo de mistura local e instantâneo visto que o primeiro não pode ser aplicado a mais de uma fase na mesma região, não contendo a fração volumétrica das fases, enquanto que o segundo é obtido por suposição de que dois *continua* coexistem.

Freqüentemente, depara-se com propostas de modelos baseados nas equações do modelo de mistura onde as variáveis são decompostas em um valor médio somado a uma flutuação que inclui a flutuação da fração volumétrica das fases. Entretanto, esta é uma abordagem equivocada que só pode ser entendida quando se observa as equações do modelo de dois fluidos local e instantâneo e a média do mesmo. Quando isto é realizado, percebe-se que a fração volumétrica da fase constitui em uma propriedade média que, rigorosamente falando, só aparece nas equações médias e não aparece nos termos de flutuação.

No modelo de mistura local e instantâneo, a coexistência de dois *continua* é aplicada às fases da mesma forma que, classicamente, aplica-se aos componentes químicos de uma solução, para a definição das concentrações dos mesmos. No entanto, a escala de tamanho de uma molécula foge aos limites da mecânica do contínuo, enquanto que a escala de tamanho de uma bolha (ou gota), por menor que seja, permanece representando uma região do espaço. Neste sentido, embora seja possível falar em flutuações na concentração de um componente químico, o mesmo não pode ser dito a respeito da concentração de uma fase. Por esta razão, o modelo de mistura obtido por Ishii (1975) com as devidas flutuações de velocidade (representadas pelos tensores turbulentos) não apresenta flutuações de fração volumétrica das fases.

Ishii (1975) também apresenta diversos processos de média aplicados ao modelo de dois fluidos. A solução das equações na sua forma original em termos das variáveis instantâneas e locais constitui a chamada simulação direta (DNS) que ainda está restrita à super-computação mesmo em sistemas monofásicos (Dubois *et al.* 1999). Sendo

assim, a maioria dos trabalhos, mesmo aqueles que aplicam os modelos a problemas tridimensionais, acabam optando por algum tipo de simplificação, seja na substituição das equações do modelo de dois fluidos local e instantâneo pelas equações obtidas pela decomposição das variáveis em um valor médio somado a uma flutuação, como é feito tradicionalmente nos escoamentos monofásicos, seja nas relações constitutivas na interface.

Claramente, estas abordagens acarretam a necessidade de novas relações empíricas, muitas vezes não objetivas (i.e. em desacordo com o princípio da objetividade material) como leis de parede e modelos de tensões de Reynolds, e/ou na perda de informação seja pelo processo de média, seja pela restrição quanto ao movimento da interface, ou ainda pelas hipóteses relativas às condições termodinâmicas da mesma.

No que diz respeito ao tratamento das tensões de Reynolds, todas as dificuldades encontradas nos escoamentos monofásicos, devido à necessidade de informações constitutivas adicionais, continuam existindo, sendo que os parâmetros relativos a este empirismo deverão ser diferentes para escoamentos multifásicos.

Nos sistemas multifásicos, pode-se dizer que a interface adiciona considerável complexidade na modelagem da turbulência. Espera-se que a contribuição da simulação direta seja ainda maior na medida em que a completa descrição dos fenômenos relacionados a este tipo de escoamento só será possível com a utilização do modelo de dois fluidos local e instantâneo sem qualquer tipo de média que proporcione a perda de informação a respeito das descontinuidades e movimentos existentes nas interfaces. Entretanto, se a utilização desta abordagem já é complexa em sistemas monofásicos, nos sistemas multifásicos as dificuldades são bem maiores. Sendo assim, grande investimento deve ser realizado no sentido de se modificar os modelos de turbulência para sistemas multifásicos.

Um dos primeiros modelos de CFD turbulentos para escoamentos estratificados foi apresentado por Shoham e Taitel (1984). A região gasosa foi tratada como escoamento desenvolvido e na região líquida a equação do movimento axial foi resolvida usando

diferenças finitas, com modelos de turbulência de ordem zero, para dutos horizontais e pouco inclinados e para apenas um diâmetro. Issa (1988) também obteve soluções para o escoamento estratificado gás-líquido em dutos com interface lisa. A solução para ambas as fases foi obtida pela solução do modelo κ-ε convencional. Os resultados apresentaram boa concordância com os resultados obtidos pelo modelo de Taitel e Dukler (1976), no entanto, a solução foi obtida para apenas um diâmetro de duto.

Newton e Behnia (2000) estenderam o trabalho de Issa (1988) para cálculo de gradientes de pressão e *hold-up* de líquido para escoamento turbulento, estratificado e com interface lisa, para diâmetro maior que o de Shoham e Taitel (1984). A viscosidade turbulenta é obtida com um modelo κ-ε para baixos Reynolds, o qual fornece a solução para o escoamento viscoso na sub-camada da parede e da interface.

Mols e Oliemans (1998) e Mols *et al.* (2000) avaliaram, do ponto de vista teórico e experimental, a aplicação de modelos turbulentos para escoamento anular com líquido penetrante, usando um modelo de difusão turbulenta. Biberg e Halvorsen (2000) obtiveram uma solução analítica para o modelo de dois fluidos em escoamento estratificado laminar, avaliando as correlações existentes para o caso resolvido.

Bai e Joseph (2000) usaram a teoria da perturbação para avaliar a formação de ondulações em escoamento anular, através da solução iterativa do sistema de equações para as fases modificando a cada iteração a forma da interface previamente estimada.

Moe e Bendiksen (1993) e Moe (1993) apresentaram um modelo turbulento de dois fluidos sem transferência de massa entre as fases. O trabalho de Moe (1993) enfoca escoamentos estratificados e intermitentes, ou seja, aqueles com interfaces longas. O autor despreza a tensão superficial e assume um campo de pressão único para ambas as fases. Após a obtenção dos valores das frações volumétricas, ainda é necessário determinar a topologia da interface no interior dos elementos. O mais usual é resolver-se a equação do movimento para uma fase, juntamente com a função indicadora de fase ou função coloração, através de uma equação hiperbólica. Como será mostrado mais adiante, a média desta função no volume corresponderá à fração volumétrica da fase. A

informação da função indicadora de fase é utilizada em conjunto com um esquema para determinação da posição da interface. Esta tarefa é chamada de *interface tracking* ou acompanhamento da interface. Estes poucos trabalhos foram citados apenas para exemplificar a variedade de abordagens que foram tentadas a fim de se modelar corretamente a turbulência em sistemas multifásicos em dutos, embora existam muitas outras.

Outro desafio é a escolha das condições de contorno a serem utilizadas, principalmente para variáveis do modelo de turbulência. O que foi dito quanto à dificuldade de se calcular as variáveis do modelo de turbulência devido à ação da interface, também vale para determinação desses mesmos valores no contorno pois, geralmente, as condições tradicionalmente impostas para sistemas monofásicos não são válidas para escoamentos multifásicos. Akai, *et al.* (1981), Naot e Rodi (1982), Celik e Rodi (1984), Demuren e Rodi (1984), Patel *et al.* (1985), Suzanne, (1985), Nallasamy (1987), Benkirane *et al.* (1990), Benkirane *et al.* (1990), Murata *et al.* (1991), Lorencez *et al.* (1991), Rodi (1993), Edwards e Jesen (1993), Lorencez *et al.* (1991), Lorencez *et al.* (1997), Nordsveen e Bertelsen, (1997), Mols e Oliemans (1998), Mols *et al.* (2000), Meknassi *et al.* (2000), Newton e Behnia, (2000 e 2001), Troshko e Hassan (2001) e Nordsveen, (2001) são alguns trabalhos que discutem a aplicação dessas condições de contorno e os efeitos da interface sobre a turbulência, principalmente quanto à geração de movimentos secundários.

A observação dos resultados desses trabalhos mostra que as tensões na interface são não uniformes e têm comportamentos diferentes dependendo da distância da parede. Sendo assim, os valores tradicionais de parâmetros dos modelos de turbulência, leis de parede e as condições de contorno não são válidas para escoamentos multifásicos. A maioria dos trabalhos citados aborda escoamentos estratificados ou estratificados ondulados e propõem alguma modificação nas condições de contorno, leis de parede e relações de fechamento na interface, como por exemplo, o cálculo do atrito interfacial.

No entanto, escoamentos dispersos, com forças de campo, fenômenos interfaciais, mudança de fase, etc., podem apresentar uma complexidade ainda maior, visto que a

área interfacial é muito superior e as bolhas ou gotas são ainda mais sensíveis à turbulência. Praticamente todos os trabalhos citados não chegam a uma conclusão quanto à natureza da turbulência gerada pela interface e como a mesma atua no sentido de produzir ondulações na interface. Sabe-se apenas que é a turbulência secundária que produz a rugosidade da superfície mas nenhum modelo ajudou a desvendar completamente o fenômeno.

O escoamento bifásico pode se desviar do equilíbrio termodinâmico dependendo das características térmicas e dinâmicas de escoamento. Como dito anteriormente, por vezes se supõe equilíbrio local na interface, tornando o transporte através da mesma dominado pelas condições nos seios das fases. Porém, pode-se levar em consideração efeitos de não equilíbrio, devido à não homogeneidade do escoamento, através de relações empíricas.

O equilíbrio termodinâmico irá assumir a máxima taxa de transferência mássica durante a mudança de fase e simplificar a modelagem da transferência de calor e massa interfacial, calculando-se apenas o equilíbrio líquido-vapor. É possível empregar coeficientes de transferência entre as fases para impor alguma não homogeneidade ao escoamento.

Raramente são encontrados trabalhos em que o equilíbrio termodinâmico não é admitido, como os de Chen *et al.* (1995a e b) e Richter *et al.* (2001) para escoamentos dispersos com bolhas que abordam casos mais simples nos quais a transferência de calor e massa interfacial pode ser modelada mais facilmente.

Quando o escoamento é não homogêneo, os estados termodinâmicos médios das fases podem ser diferentes. A não homogeneidade pode ser causada por dois efeitos dinâmicos: (i) distribuição não uniforme das fases e (ii) velocidade de deslizamento local entre as fases diferente de zero. Chen *et al.* (1995a) analisaram estas causas concluindo que o efeito de deslizamento entre as fases é o mais importante e, por isso, a não homogeneidade do escoamento é medida pela diferença entre as velocidades médias

das fases. Isto é percebido nas mais diversas formas de cálculo de atrito interfacial que são proporcionais à velocidade relativa entre as fases.

2.2.3 – O modelo de dois fluidos (Ishii, 1975)

Considerando-se um ponto do espaço x_0, deseja-se obter a média temporal das propriedades físicas no mesmo. No caso em que o ponto x_0 encontra-se sempre em uma das fases, o valor médio é trivial e idêntico ao caso monofásico. Estamos interessados no caso em que, ao longo do intervalo de tempo $\Delta t = \Delta t_1 + \Delta t_2 + \Delta t_s$, onde, no intervalo de tempo Δt_1, encontramos a fase 1 no ponto, no intervalo Δt_2, encontramos a fase 2 e, no intervalo Δt_s, encontramos a interface, definido a escala de tempo, Δt, adotada no processo de média. Pode-se definir uma função indicadora de fase por:

$$\begin{aligned} &\Im^k(x,t) = 1 \quad \text{se (x, t)} \in \text{fase k} \\ &\Im^k(x,t) = 0 \quad \textit{c}\text{aso contrário} \end{aligned} \tag{2.3}$$

Assim, uma variável local instantânea qualquer da fase *k*, V^k, pode ser expressa por

$$V\Im^k(x_0,t) = V^k \tag{2.4}$$

No caso limite em que a espessura da interface, δ_i, tende a zero, $\Delta t_s \to 0$, o intervalo de média será dado por $\Delta t_1 + \Delta t_2$, e pode-se definir a fração volumétrica no ponto x_0:

$$\begin{aligned} &\alpha^k(x_0,t_0) = \lim_{\Delta t_s \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \Im^k(x_0,t)dt \\ &\sum \alpha^k = 1 \end{aligned} \tag{2.5}$$

Assim, a fração volumétrica pode ser interpretada como a probabilidade de se encontrar uma dada fase no intervalo correspondente à escala de tempo tomada no processo de média. A média temporal para uma propriedade qualquer *V* e, para a mesma propriedade na fase *k*, podem ser definidas por:

$$\overline{V}(x_0,t_0) = \lim_{\Delta t_s \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} V(x_0,t)dt$$
$$\overline{V}^k(x_0,t_0) = \lim_{\Delta t_s \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} V^k(x_0,t)dt \qquad (2.6)$$

Logo,

$$\alpha^k = \overline{\Im}^k \qquad \text{e}$$
$$\overline{V} = \sum \lim_{\Delta t_s \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} V^k(x_0,t)dt = \sum \overline{V}^k \qquad (2.7)$$

onde aqui e na seqüência, os somatórios são implícitos para as fases *k*.

Outra média importante é aquela obtida pela multiplicação da propriedade local instantânea pela função indicadora de fase, denominada média nas fases:

$$\overline{\overline{V}}^k = \overline{\Im^k V}/\overline{\Im^k} = \overline{V}^k / \alpha^k \Rightarrow \overline{V} = \sum \alpha^k \overline{\overline{V}}^k \qquad (2.8)$$

Para variáveis extensivas, deve-se utilizar a densidade como função peso na média, obtendo-se a seguinte relação para a média da propriedade extensiva:

$$\tilde{\psi} = \overline{\overline{\rho\psi}}^k / \overline{\overline{\rho}}^k = \overline{\rho^k \psi^k} / \overline{\rho}^k = \frac{\sum \alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k \tilde{\psi}^k}{\sum \alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k} = \frac{\sum \overline{\rho}^k \tilde{\psi}^k}{\sum \overline{\rho}^k} \qquad (2.9)$$

Ishii (1975) apresenta as relações para obtenção das médias das derivadas das propriedades envolvidas no modelo de dois fluidos. Estas relações não serão apresentadas aqui novamente. Finalmente, as equações médias para o modelo de dois fluidos são dadas por:

Conservação da massa:

$$\frac{\partial \alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k}{\partial t} + \nabla.(\alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k \overline{\overline{\underline{v}}}^k) = M^k \tag{2.10}$$

onde M^k é um termo de troca de massa entre as fases.

Conservação do momento:

$$\frac{\partial \alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k \overline{\underline{\tilde{V}}}^k}{\partial t} + \nabla.(\alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k \overline{\underline{\tilde{V}}}^k \overline{\underline{\tilde{V}}}^k) = -\alpha^k \nabla(\overline{\overline{p}}^k) + \nabla.\left[\alpha^k (\overline{\overline{\overline{\tau}}}^k + \overline{\overline{\tau}}^{T,k})\right] + \alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k \underline{\tilde{g}} + \\ + M_k(\bar{v}_i - \bar{v}_k) + \underline{\Gamma}_k^d \tag{2.11}$$

onde M_k é o termo de troca de momento devido à troca de massa entre as fases e $\underline{\Gamma}_d^k$ é um termo de arraste que, por vezes, substitui as tensões normal e tangencial na interface, n^t e n^n são os vetores tangente e normal à interface e os τ's os tensores tensão correspondentes.

Nos modelos unidimensionais que serão apresentados, por vezes, os efeitos das tensões interfaciais e descontinuidades são calculados através de coeficientes que levam em consideração a aceleração e a diferença de velocidade entre as fases, como, por exemplo, o coeficiente de massa virtual relacionado à aceleração entre as fases.

Conservação da energia:

$$\frac{\partial \alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k \bar{h}^k}{\partial t} + \nabla \cdot [\alpha^k \overline{\overline{\rho}}^k \bar{h}^k \overline{\underline{\tilde{V}}}^k] = \\ \nabla \cdot (\cdot \alpha^k \overline{\overline{\tau}}^k \overline{\underline{\tilde{V}}}^k) - \nabla \cdot \left[\alpha^k (\overline{\overline{q}}^k + \overline{\overline{q}}^{T,k})\right] + \frac{\partial \alpha^k \overline{\overline{p}}^k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^k \overline{\overline{p}}^k \overline{\underline{\tilde{V}}}^k) + \dot{E}^k \tag{2.12}$$
$$\dot{E}^k = M^k(\bar{h}^{ki} - \bar{h}^k) + \frac{\overline{\overline{q}}^k}{L_s}, h^k = (e + \overline{\underline{\tilde{V}}}^2/2)^k$$

onde q^k e q^{Tk} indicam o fluxo térmico difusivo e turbulento, respectivamente, $\overline{\overline{q}}^k$ é o fluxo médio de calor por unidade de área interfacial, e $1/L_s$ é a concentração total de área superficial, *e* e *h* são a energia interna e a entalpia específicas. As equações de transporte interfacial ficam:

$$\begin{aligned} &\sum M^k = 0 \\ &\sum \underline{\Gamma}^k = \sum (\overline{\overline{p}}^k \nabla \alpha^k + \underline{\Gamma}_d^k) = \underline{\Gamma}^m = 2/\overline{\overline{H}}^{21} \sigma \nabla \alpha_2 + \underline{\Gamma}_H^m \\ &\sum \dot{E}^k = \sum M^k \overline{h}^{ki} + \overline{\overline{q}}^{ki} / L_s = 0 \end{aligned} \qquad (2.13)$$

Onde $\underline{\Gamma}^m$ é o termo de geração de momento pela interface que serve para o cômputo da influência da tensão superficial σ e H^{21} representa o raio médio de curvatura da interface. Notoriamente, estas equações são obtidas supondo-se que a interface não produz as grandezas conservativas e não possui massa.

Estas equações foram chamadas por Ishii (1975) de equações de transporte interfaciais para diferenciá-las das condições de salto obtidas pela termodinâmica de processos irreversíveis, presentes no modelo de dois fluidos local e instantâneo. O conjunto das equações (2.10) a (2.13) formam o modelo de dois fluidos médio, adotado nos principais códigos computacionais comerciais de CFD (PHOENICS, CFX, Fluent, Star-CD, dentre outros) para solução do escoamento multifásico, sendo a principal diferença entre os códigos as relações de fechamento permitidas.

Se o objetivo é modelar o escoamento bifásico em dutos, com a configuração dada pela Figura 2.1, pode-se escrever as equações da continuidade para as fases gasosa e líquida unidimensionais, isotérmicas e sem reações químicas, conforme as Equações (2.14).

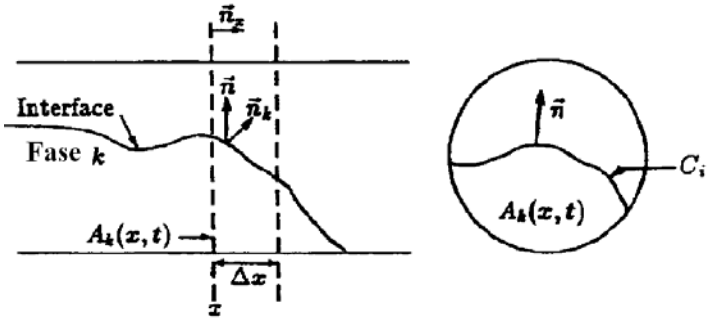


Figura 2.1 - Esquema do escoamento bifásico em duto.

$$
\begin{aligned}
A\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_g \rho_g v_g) &= \dot{m}_{gi} \\
A\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l) + \frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_l \rho_l v_l) &= \dot{m}_{li}
\end{aligned}
\tag{2.14}
$$

Onde $\dot{m}_{ki}$ é um termo fonte ou consumo de massa da fase *k* devido à mudança de fase, *A* é a área da seção, α_k, ρ_k e v_k são a fração volumétrica, a densidade e a velocidade, respectivamente, para a fase *k*. E as equações do movimento para as mesmas fases são:

$$
\begin{aligned}
A\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g v_g) + \frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_g \rho_g v_g^2) + A\alpha_g \frac{\partial p_g}{\partial x} + A\alpha_g \rho_g g.sen(\theta) = \\
\Delta p_g^i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \Gamma_{gW} + \Gamma_{gi} \\
A\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l v_l) + \frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_l \rho_l v_l^2) + A\alpha_l \frac{\partial p_l}{\partial x} + \\
+ A\alpha_l \rho_l g.sen(\theta) = \Delta p_l^i \frac{\partial \alpha_l}{\partial x} + \Gamma_{lW} + \Gamma_{li}
\end{aligned}
\tag{2.15}
$$

onde Γ representa as forças cisalhantes por unidade de comprimento, *g* é a aceleração da gravidade e θ é o ângulo entre o duto e a direção horizontal. Δp_k^i é a diferença entre as pressões no seio da fase k e na interface. A modelagem deste termos será apresentada oportunamente. A equação de conservação do momento para a interface supondo-a de espessura zero é dada pela seguinte equação:

$$\left\langle \underline{n}_x \cdot \underline{n}_g (p_{gi} - p_{li}) \right\rangle_i - \left\langle \underline{n}_x \cdot \underline{n}_g \cdot (\tau_{gi} - \tau_{li}) \right\rangle_i = \left\langle 2\sigma / \overline{\overline{H}}^{12} \, \underline{n}_g \cdot \underline{n}_x \right\rangle_i \qquad (2.16)$$

onde σ é a tensão superficial, o primeiro termo representa as forças de pressão agindo na interface, o segundo termo representa as tensões de cisalhamento agindo na interface e $\overline{\overline{H}}^{12}$ o raio de curvatura médio da interface, tomado positivo no sentido do vetor normal $\underline{n}_g$. A operação definida por $\langle\rangle_i$ é uma integral ao longo da curva C_i formada pela intercessão da interface líquido-gás e a seção transversal do duto, e é dada para uma variável V qualquer por:

$$\left\langle V \right\rangle_i = \int_{C_i} V \frac{dC}{\underline{n}_k \cdot \underline{n}} \qquad (2.17)$$

Para completar o modelo, ainda são necessárias uma equação de estado e as relações constitutivas para Γ_{kw}, Γ_{ki}, p_{ki}, p_k *e* τ_{ki}. Neste trabalho, o modelo de dois fluidos será aplicado apenas a sistemas com área constante e, portanto, a área nas equações acima pode ser retirada das derivadas.

Normalmente, adota-se que as pressões das fases, p_g e p_l são iguais, o que leva à perda de hiperbolicidade do modelo de dois fluidos. Essa discussão é de suma importância e será retomada quando os métodos numéricos forem apresentados, pois são eles que são afetados por este fato.

Ransom e Hicks (1984) propuseram um modelo com pressões diferentes para as fases. Este tipo de modelo é chamado de modelo a duas pressões. Com relação à curvatura da interface, a maioria considera que a curva C_i é, na realidade, uma reta que não varia com x em cada célula de discretização. No entanto, Brauner *et al.* (1998) obtiveram relações para interfaces curvas. A partir deste ponto, a aplicação do modelo de dois fluidos exige equações constitutivas que, como vimos anteriormente, variam para cada padrão de escoamento.

Alguns autores exploraram estas relações a fim de utilizar o modelo para várias configurações, podendo-se citar os trabalhos de De Henau e Raithby (1995b,c) para escoamento intermitente, Taitel e Barnea (1997) para escoamento estratificado e disperso, e Liné e Lopez (1997) para escoamento estratificado ondulado.

Supondo-se que a tensão superficial é desprezível, a equação (2.13) leva à igualdade de forças que atuam na interface provenientes de cada fase, que em termos da nomenclatura da equação (2.18), leva a:

$$\Gamma_{gi} = -\Gamma_{li} \tag{2.18}$$

2.2.4 – O modelo de mistura

Quando o padrão de escoamento é intermitente ou de bolhas, o modelo de mistura é normalmente preferido. Este modelo é composto por uma equação de conservação de massa para cada fase, como no caso do de dois fluidos, porém resolve-se apenas uma equação de conservação de momento para a mistura como um todo. Somando-se as duas equações na Equação (2.15), obtém-se a seguinte equação para a mistura:

$$\begin{aligned} &A\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g v_g + \alpha_l \rho_l v_l) + \frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_g \rho_g v_g^2 + A\alpha_l \rho_l v_l^2) + \\ &A\frac{\partial p}{\partial x} + A\rho_m g.sen(\theta) = \Gamma_W \end{aligned} \tag{2.19}$$

onde $\rho_m=\alpha_g\rho_g+\alpha_l\rho_l$, é a densidade da mistura. Para a obtenção das velocidades das fases, é necessária uma relação adicional chamada de relação de deslizamento. Um aspecto importante é o cancelamento do termo de tensão interfacial existente nas equações do modelo de dois fluidos. Este cancelamento, porém, não reduz a complexidade do problema, transferindo-o para a relação de deslizamento. Além disso, o modelo de mistura fornece bons resultados apenas quando a diferença entre as velocidades das fases não é elevada. O modelo de dois fluidos é o mais flexível, porém,

mais não linear e, quando aplicado com igualdade de pressões nas fases, pode perder hiperbolicidade, dependendo da velocidade relativa.

2.2.5 – O modelo de quase-equilíbrio

O modelo transiente de quase-equilíbrio de Taitel e Barnea (1997) é apresentado a seguir. Um modelo semelhante foi primeiramente proposto em Taitel *et al.* (1989). O modelo baseia-se na hipótese de que os transientes de momento ocorrem em uma escala de tempo muito inferior àquelas sofridas pelo balanço de massa. O modelo é formado pelas equações (2.14), transiente, e pelas equações (2.15) sem os termos de derivada no tempo. Este modelo não é resolvido por qualquer método de solução de problemas hiperbólicos. Por essa razão, sua forma discretizada é apresentada no Apêndice A.

2.2.6 – Relações de fechamento

Os termos fontes dos modelos de escoamento multifásico apresentados dependem do padrão de escoamento observado no duto. Os modelos são altamente não-lineares e descontínuos, provocando grande instabilidade numérica. Desta forma, é muito importante que as correlações para a previsão do padrão de escoamento sejam confiáveis e com validade para grandes variações de propriedades físicas, condições de escoamento e geometria dos dutos.

A classificação de escoamentos bifásicos não é uma tarefa das mais simples, pois existem diferentes aspectos que podem ser abordados com tal propósito. Os dois critérios mais utilizados na sua classificação são os tipos de fases encontradas (gás, líquido ou sólido) e as estruturas e topologias das interfaces.

A importância da previsão do padrão do escoamento se deve ao fato de que a predição das características do escoamento, como perda de carga e *holdup*, usando modelos unidimensionais necessitará de correlações empíricas que serão diferentes de acordo com o padrão presente.

Desde os trabalhos pioneiros de Kosterin (1943) e Taitel e Dukler (1976), diversos autores descreveram parâmetros para a previsão do padrão de escoamentos bifásicos, normalmente baseados nas velocidades superficiais de líquido e gás. Este assunto ainda não foi esgotado, visto que a aplicabilidade destes parâmetros para a previsão de padrão de escoamento é restrita a poucos sistemas e, podem ocorrer falhas, mesmo para aqueles sistemas para os quais foram desenvolvidos.

Govier e Omer (1962) propuseram o conjunto de padrões de escoamento bifásico para tubos horizontais apresentado na Figura 2.2. Govier e Aziz (1972) propuseram o conjunto de padrões para dutos verticais apresentado na Figura 2.3. Diferentes padrões de escoamento são observados quando há transferência de calor ou quando mais de duas fases estão presentes.

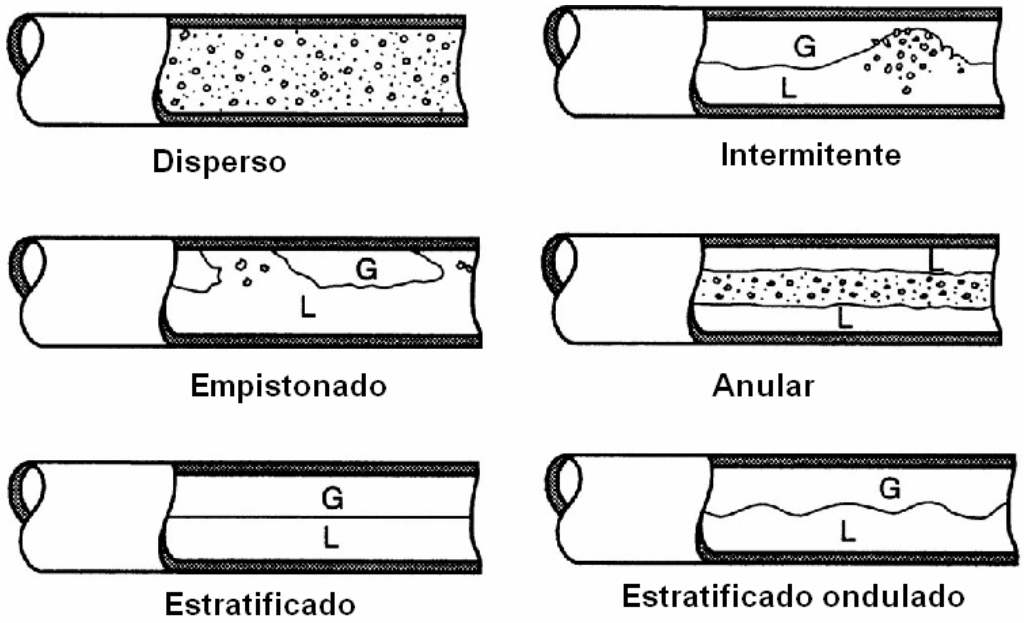


Figura 2.2 – Padrões de Escoamento bifásicos em dutos horizontais.

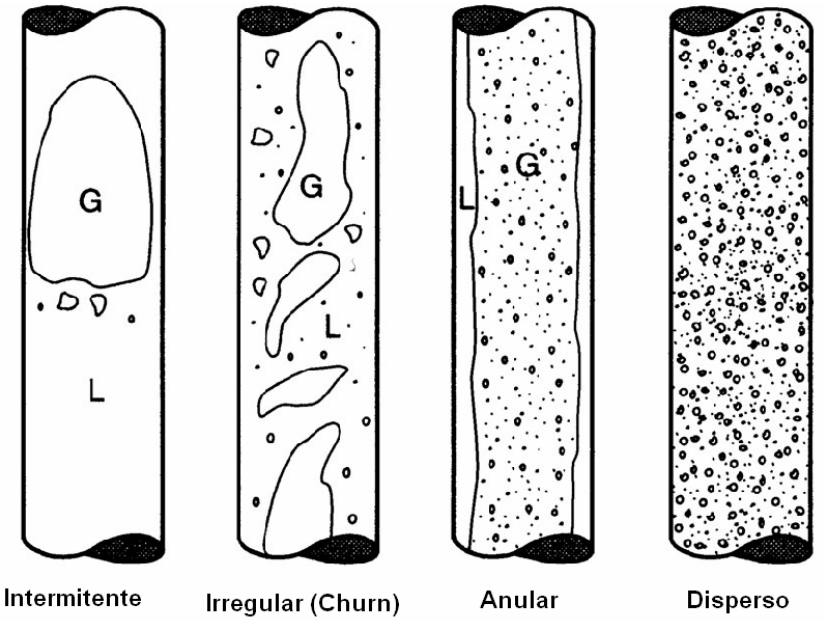


Figura 2.3 – Padrões de escoamentos bifásicos em dutos verticais.

A Figura 2.4 apresenta um gráfico típico para determinação do padrão de escoamento. Para determinação das condições de intermitência severa, existe o critério de Boe (1981). A intermitência severa ocorre em condições nas quais o escoamento intermitente apresenta grandes oscilações de vazão e pressão. Este diagrama depende das condições de escoamento e da inclinação do duto.

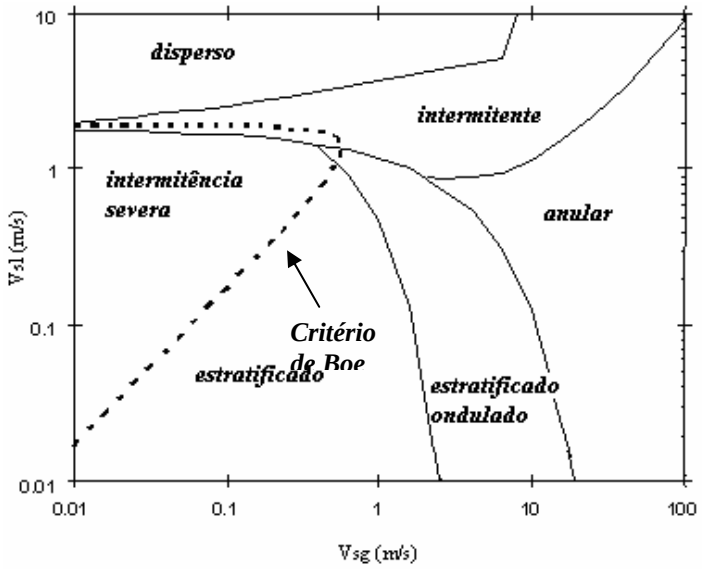


Figura 2.4 – Determinação do padrão de escoamento e critério de Boe (e *Vsg* são as velocidades superficiais de líquido e gás, respectivamente).

A física do escoamento multifásico

Embora pesquisas dos fenômenos associados a este tipo de escoamento datem dos últimos 50 anos, nas duas últimas décadas os trabalhos de pesquisa concentraram-se na modelagem física em condições específicas de escoamento. Isto acarretou na extensiva utilização de correlações empíricas para fatores de atrito para parede e tensões de cisalhamento na interface.

Os padrões estratificado e intermitente (*slug*) são os mais comuns e importantes na indústria de petróleo. O escoamento intermitente é iniciado quando as ondas da camada de escoamento estratificado crescem até alcançar o topo do duto. Neste momento, o gás propele uma camada de líquido rapidamente para a parte de baixo do duto. O tamanho da camada de líquido estabiliza-se na medida em que as taxas de líquido que são expelidas pelo trecho estratificado se iguala à taxa de líquido empurrada pelo gás no sentido de cima para baixo, formando pistões de líquido. O pistão formado pode conter bolhas de gás ou não. A predição do comprimento do pistão de líquido é importante por duas razões (Cook e Behnia, 2000b): (i) os modelos mecanicistas necessitam do tamanho médio dos pistões de líquido para cálculo da queda de pressão e *holdup* e (ii) a distribuição estatística do comprimento dos pistões é útil para projeto de equipamentos de processamento.

Na região de entrada, os pistões de líquido têm o comprimento de apenas algumas vezes o diâmetro. Sendo assim, as pequenas bolhas formadas nos pistões movem-se mais rapidamente à frente dos mesmos, tendendo a coalescer. Alguns autores sugerem que a velocidade das bolhas está relacionada com a velocidade máxima do líquido à sua volta. Na região de entrada a velocidade máxima da parte traseira dos pistões tende a ser bem maior que na região plenamente desenvolvida onde os pistões são maiores. Os pistões menores podem coalescer e a união de pistões consecutivos forma um pistão de tamanho ainda maior. Conforme os pistões crescem, a velocidade máxima diminui e a coalescência dos pistões cessa e, conseqüentemente, o comprimento dos pistões se estabiliza.

Os modelos de escoamento multifásico

O primeiro modelo foi proposto por Dukler e Hubbard (1975) e mais tarde Nicholson (1978), Stanislav *et al.* (1986) e Taitel e Barnea (1990 a e b). Alguns dos modelos para dutos verticais foram desenvolvidos por Fernandez *et al.* (1983), Orell e Rembrand (1986), Sylvester (1987) e Barnea (1990).

A predição da distribuição de tamanhos de pistões de líquido em escoamentos intermitentes foi abordada por Moisses e Griffith (1962), Barnea e Taitel (1993), Pinto e Campos (1996), Pinto *et al.* (1998), Taitel *et al.* (2000), Gomez *et al.* (2000), e Cook e Behnia, (1997 e 2000a e b), Van Hout *et al.* (2003). Woods e Hanratty (1999) estudaram a previsão do efeito do número de Froude (*Fr*) sobre a freqüência dos *slugs*. A predição de *holdup* de líquido em *slugs* foi estudada por Dukler e Hubbard (1975), Nicholson (1978), Gregory *et al.* (1978), Fernandez *et al.* (1983), Barnea e Brauner (1985), Sylvester (1987), Taitel e Barnea (1990 a e b), Felizola (1992), Felizola e Shoham (1995) e Gómez *et al.* (2000). Gonçalves *et al.* (1996) e Marruaz *et al.* (2001) obtiveram dados experimentais para dutos de larga escala no Sítio de Testes da PETROBRAS em Aracajú (SE). A importância deste tipo de dado em dutos de larga escala está na presença de efeitos de escala e propriedades dos fluidos que podem invalidar o uso das correlações publicadas para sistemas de grande porte como os de produção de petróleos pesados.

Quando o escoamento é descendente, o padrão intermitente é freqüentemente modificado pela dissipação dos pistões de líquido. Este efeito foi estudado por Taitel et. al. (2000). Taitel e Barnea (1998) apresentaram um modelo lagrangiano para o acompanhamento (*tracking*) de unidades de escoamento intermitente. Kordyban e Ranov (1970), Wallis e Dobson (1973), Kordyban (1977), Barnea *et al.* (1980), Mishima e Ishii (1980), Lin e Hanratty (1986), Taitel (1986), Fan *et al.* (1993), Grolman *et al.* (1996) estudaram a previsão da formação de escoamento intermitente baseando-se no estudo de instabilidades de Kelvin-Helmholtz ou apresentado correlações com base em dados experimentais.

Pode-se perceber o elevado grau de empirismo na modelagem de escoamento multifásico em dutos, em virtude dos modelos serem na sua maioria unidimensionais. A previsão do padrão de escoamento e as propriedades do escoamento intermitente são extremamente dependentes dos fluidos empregados, forma de operação e da escala do sistema, acarretando em um sem número de correlações cada uma com certa validade.

Embora esses trabalhos sejam para predição de escoamentos plenamente desenvolvidos, os modelos transientes fazem uso indiscriminado das correlações obtidas para a modelagem do termo de atrito entre as fases, no caso do modelo de dois fluidos, e para a relação de deslizamento no caso do modelo de mistura. Uma unidade típica de escoamento pistonado ou intermitente pode ser visto na Figura 2.5.

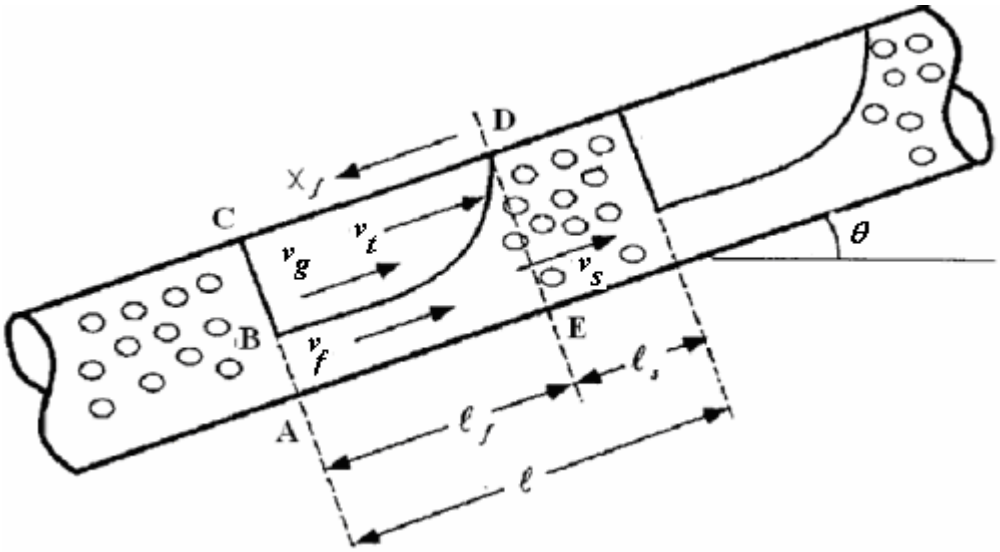


Figura 2.5 – Unidade do escoamento intermitente.

A Região 1 consiste em um pistão de liquido (*Slug*) com comprimento l_s que pode apresentar bolhas. A Região 2 consiste em um filme de líquido de comprimento l_f. A velocidade translacional da frente de uma bolha alongada atrás de um pistão é v_t=v_g-v_l e pode ser expressa em função da velocidade da mistura no pistão v_S na forma proposta por Nicklin (1962), Equação (2.20).

$$v_t = C_0 v_s + v_d \tag{2.20}$$

onde $v_s=\alpha_l v_l+\alpha_g v$, v_d é a velocidade de flutuação, C_0 é uma distribuição de velocidade empírica, e seu inverso também é conhecido como coeficiente de Armand. Nicklin (1962) propôs C_0=1,2. Para escoamento laminar, Fabre (1994) propôs C_0=2. Porém as relações mais usadas são as de Finlay-Zuber (1965) e Bendiksen (1984) dadas pelas seguintes equações, respectivamente:

$$\begin{aligned} v_d &= 0{,}35\sqrt{gD}sen(\theta) \\ C_0 &= 1{,}2 \end{aligned} \tag{2.21}$$

$$\begin{aligned} v_d &= 0{,}54\sqrt{gD}\cos(\theta) + 0{,}35\sqrt{gD}sen(\theta) \\ C_0 &= 1{,}05 + 0{,}15sen(\theta) \end{aligned} \tag{2.22}$$

onde D é o diâmetro do duto. Estas equações são válidas com $v_s=\alpha_g v_g+\alpha_l v_l$. Estas equações fornecem a relação algébrica para o modelo de mistura. Os coeficientes da equação de Finlay-Zuber recomendados por Faille (2006) são dados por:

$$\begin{aligned} v_d &= 0{,}35\sqrt{gD}sen(\theta) \\ C_0 &= 0{,}2sen(\theta) \end{aligned} \tag{2.23}$$

No caso do modelo de dois fluidos, De Henau e Raithby (1995b) apresentaram um modelo para cálculo dos termos fonte das equações de conservação de momento considerando tanto o atrito entre as fases quanto o termo de massa virtual (aceleração relativa das fases). Os autores propuseram as seguintes relações de fechamento para escoamento intermitente, considerando o arraste e a força de massa virtual e desprezando-se as forças de Basset:

$$\Gamma_{li} = \frac{1}{2}C_D\rho_l \mid v_r \mid v_r \frac{\alpha_g}{l}A + C_{vm}A\rho_l \frac{dv_r^+}{dt} \tag{2.24}$$

$$\Gamma_{kw} = \tau_{kw} S_k = \tau_{ks} \frac{l_s}{l} + \tau_{kf} S_{kf} \frac{l_f}{l} \tag{2.25}$$

onde v_r é a velocidade relativa média entre as fases, e v_r^+ é uma outra velocidade relativa calculada usando-se a velocidade da frente da bolha do escoamento intermitente e do filme de líquido abaixo da mesma, (v_t - v_f), e usada para computar o termo de massa virtual. τ_k é a tensão de cisalhamento devido ao atrito com a parede da fase *k*, e S_k o perímetro associado, l_s e l_f são os mesmos já apresentados para uma unidade *slug*. C_D é o coeficiente de arraste e C_{vm} o coeficiente de massa virtual.

Existem inúmeras relações para a obtenção do coeficiente de arraste derivadas de dados experimentais de frações de líquido e a queda de pressão para o escoamento plenamente desenvolvido e estacionário. No entanto, De Henau e Raithby (1995b) apresentaram uma nova relação para escoamento intermitente obtida diretamente a partir da integração da equação estacionária de escoamento intermitente plenamente desenvolvida e com coeficientes que levam em consideração a variação da interface ao longo da unidade de *slug*. Deve-se, no entanto, tomar o devido cuidado com essa expressão, pois ela foi obtida para o modelo dado pela eqs. (2.14) e (2.15) com as pressões nas fases iguais, ou seja, $p_g=p_l=p$ e também iguais á pressão interfacial, ou seja, $p^i_k=p$. Já a relação para o coeficiente de massa virtual foi obtida pelos autores a partir do balanço de energia com inúmeras aproximações, tendo sido testada para o caso específico do escoamento intermitente.

Para o modelo de dois fluidos, o seguinte procedimento é utilizado (De Henau e Raithby, 1995b):

1- Dadas as velocidades e as frações volumétricas das fases, calcula-se a velocidade $v_s=\alpha_g v_g+\alpha_l v_l$. e $v_t=C_0 v_s+v_d$.
2- Em seguida o comprimento do pistão de líquido l_s, obtido por Taitel e Barnea (1990a), e a fração volumétrica de líquido na região do pistão α_s, obtida por Andreussi e Bendiksen (1989) são calculados:

$$
\begin{aligned}
& l_s = 30D \\
& \alpha_s = 1 - \frac{v_s - v_{mf}}{v_s + v_{mo}} \\
& v_{mf} = 2{,}6\left[1 - 2\left(\frac{2{,}5}{D}\right)^2\right]\sqrt{gD} \\
& v_{mo} = 2400[1 - 1/3 sen(\theta)]Bo^{-3/4}\sqrt{gD} \\
& Bo = \rho_l g D^2 / \sigma
\end{aligned}
\tag{2.26}
$$

É importante comentar que embora seja muito usada a relação de que o comprimento dos *slugs* é de cerca de 30*D*, é sabido que esse comprimento pode chagar até a 100*D* (Fagundes Neto *et al.*, 1999).

3- Então, a fração volumétrica de líquido na região do filme é obtida resolvendo-se numericamente as seguintes equações: (i) balanço de momento desprezando-se o gradiente de pressão; (ii) equação para a fração volumétrica de líquido na região do filme supondo que a interface é plana e (iii) balanços de massas de líquido e gás na unidade de *slug*:

$$
\begin{aligned}
& \frac{\tau_{lf} S_{lf}}{A\alpha_f} - \frac{\tau_{gf} S_{gf}}{A(1-\alpha_f)} - \frac{\tau_i S_i}{A}\left[\frac{1}{\alpha_f} + \frac{1}{(1-\alpha_f)}\right] - (\rho_l - \rho_g) g.sen(\theta) = 0 \\
& \alpha_l = \alpha_f \frac{l_f}{l} + \alpha_s \frac{l_s}{l} \\
& v_{lf} = \frac{\alpha_l v_l l - \alpha_s v_s l_s}{\alpha_f l_f} \\
& v_{gf} = \frac{\alpha_g v_g l - (1-\alpha_s) v_s l_s}{(1-\alpha_f) l_f}
\end{aligned}
\tag{2.27}
$$

4- A velocidade relativa é obtida por:

$$
v_r^+ = \frac{(\alpha_s - \alpha_l)}{\alpha_l \alpha_g}(v_t - v_s) \tag{2.28}
$$

5- o coeficiente de fricção C_D é obtido por:

$$
\begin{aligned}
&C_D = \frac{2c_l c_g \alpha_l \alpha_g}{\rho_l \alpha_g v_r^2}\left[-\frac{\tau_l S_l l}{A c_l \alpha_l} + \frac{\tau_g S_g l}{A c_g \alpha_g} + g.l.sen(\theta)\left(\frac{\rho_l}{c_l} - \frac{\rho_g}{c_g}\right) + 2\Delta p_k^i \alpha_l \right] \\
&c_l = \frac{I_1}{I_2}; c_g = \frac{1 - c_l \alpha_l}{\alpha_g} \\
&I_1 = -\{\alpha_f l_f [\alpha_f \rho_l + (1-\alpha_f)\rho_g] + \alpha_s l_s [\alpha_s \rho_l + (1-\alpha_s)\rho_g]\} g.sen(\theta) + \\
&\frac{\tau_{lf} S_{lf} l_f \alpha_f}{A} + \frac{\tau_{gf} S_{gf} l_f \alpha_f}{A} + \frac{\tau_{ls} S_{ls} l_s \alpha_s}{A} + \frac{\tau_{gs} S_{gs} l_s \alpha_s}{A} \\
&I_2 = -\{l_f [\alpha_f \rho_l + (1-\alpha_f)\rho_g] + l_s [\alpha_s \rho_l + (1-\alpha_s)\rho_g]\} g.sen(\theta) + \\
&\frac{\tau_{lf} S_{lf} l_f}{A} + \frac{\tau_{gf} S_{gf} l_f}{A} + \frac{\tau_{ls} S_{ls} l_s}{A} + \frac{\tau_{gs} S_{gs} l_s}{A}
\end{aligned}
\qquad (2.29)
$$

A primeira relação foi obtida a partir da equação formada pela diferença entre os balanços de momento para o gás e o líquido, em condições estacionárias, como citado. No entanto, o último termo desta equação não estava presente no trabalho de De Henau e Raithby (1995b). O modelo dos autores não continha os termos de correção de pressão interfacial (i.e. $\Delta p^{i}_{k}=0$). Com a consideração deste termo, a expressão correta para o coeficiente de arraste é a obtida acima.

6- o coeficiente de massa virtual é dado por:

$$C_{VM} = (1-\alpha_f)\frac{l_f}{l} \qquad (2.30)$$

7- Finalmente, os termos fonte das equações de conservação de momento podem ser obtidos por:

$$
\begin{aligned}
&\Gamma_{il} = 0{,}5 C_D \rho_l |v_r| v_r \frac{\alpha_g}{l} + C_{VM} \rho_l \frac{dv_r^+}{dt} \\
&\frac{dv_r^+}{dt} = \frac{\alpha_s \alpha_l \alpha_g}{\alpha_f (\alpha_s - \alpha_l)} \frac{dv_r}{dt} - \frac{\alpha_s (2\alpha_g - 1)(\alpha_s - \alpha_l) + \alpha_l \alpha_g v_r}{\alpha_f (\alpha_s - \alpha_l)^2} \frac{d\alpha_g}{dt}
\end{aligned}
\qquad (2.31)
$$

É possível se obter um modelo ainda mais simplificado se, adicionalmente, assumir-se que a tensão na região do filme e do pistão têm o mesmo valor ($\tau_{kf}=\tau_{ks}$). Neste caso, não é mais necessário o calculo de l_f, R_f, v_{lf} e v_{gf} e, portanto, a solução numérica da (2.27).

Para escoamento estratificado, pode-se simplesmente fazer:

$$\begin{aligned} \Gamma_{li} &= \frac{1}{2} f_i \rho_g \mid v_r \mid v_r S_i \\ f_i &= 0{,}008 + 2.10^{-5}\,\mathrm{Re} \end{aligned} \tag{2.32}$$

onde *Re* é um número de Reynolds.

As correlações empíricas utilizadas no modelo e apresentadas acima podem ser trocadas por outras existentes na literatura. Além disso, não foi especificado como os fatores de atrito devem ser calculados. Neste caso, também é possível utilizar vários modelos.

Existem outras relações para outros padrões de escoamento. No entanto, este trabalho foi focado nos escoamentos intermitentes e estratificado. Outros padrões não serão encontrados nos exemplos deste trabalho, mas a literatura é vasta sobre as relações de fechamento para estes padrões.

Para o completo fechamento das equações a serem resolvidas, uma equação de estado (EdE) é necessária e alguns exemplos serão discutidos oportunamente, já que não há nenhuma particularidade destas equações associado ao padrão de escoamento.

2.3. A intermitência severa

A intermitência severa é um fenômeno que ocorre quando o escoamento estratificado em uma linha quase horizontal desemboca em um *riser* e forma *slugs* próximos ao mesmo. Isto leva a um escoamento periódico de gás e de líquido, causando

danos aos equipamentos, acidentes e paralisações (Barbuto, 1990; Almeida e Gonçalves, 1999).

A intermitência severa é promovida pela inclinação da linha que alimenta o *riser* que promove o acúmulo de líquido na base do *riser*. Portanto, a baixa velocidade e, conseqüentemente, o escoamento estratificado na linha que alimenta o *riser* é condição necessária para a ocorrência deste fenômeno. Quando o sistema é estável, ocorre oscilação da fração volumétrica no *riser*. Em determinadas condições, o *riser* está cheio de líquido e o gás começa a penetrar no *riser*. Assim, a fração de vazio aumenta e a pressão hidrostática diminui. Com a redução da pressão hidrostática, o gás se expande no *riser*, aumentando o acúmulo de líquido na base do mesmo. Isto também aumenta a pressão na linha de alimentação. O líquido acumulado é então empurrado para o *riser* até atingir o separador no seu topo.

Neste momento, o *riser* está cheio de líquido e o aumento da pressão no duto empurra o líquido a uma velocidade cada vez maior. Em um determinado momento, o gás entra no *riser* penetrando no líquido que está no mesmo e, quando o gás atinge o topo da camada líquida no *riser* (*blowout*), o líquido escoa no sentido de cima para baixo (refluxo) próximo à parede do *riser*, reduzindo novamente a pressão e reiniciando o ciclo. A Figura 2.6 apresenta as etapas deste ciclo. A estabilidade do ciclo de intermitência severa foi estudada por Taitel (1986).

Os dois métodos mais conhecidos para eliminação da intermitência severa são a injeção de gás na base do *riser* e o método de *choking* (Jansen, 1994), aplicado na saída do *riser*. O primeiro método é bastante eficiente, porém, caro. O segundo amortece os efeitos nocivos, no entanto, promove um aumento na pressão média na saída do *riser* e conseqüentemente uma redução na vazão mássica média. Recentemente, Almeida e Gonçalves (1999) propuseram um novo método que consiste em utilizar um venturi próximo ao *riser* na linha que o alimenta. Esta saída tem se mostrado atrativa e sua modelagem ainda não foi proposta.

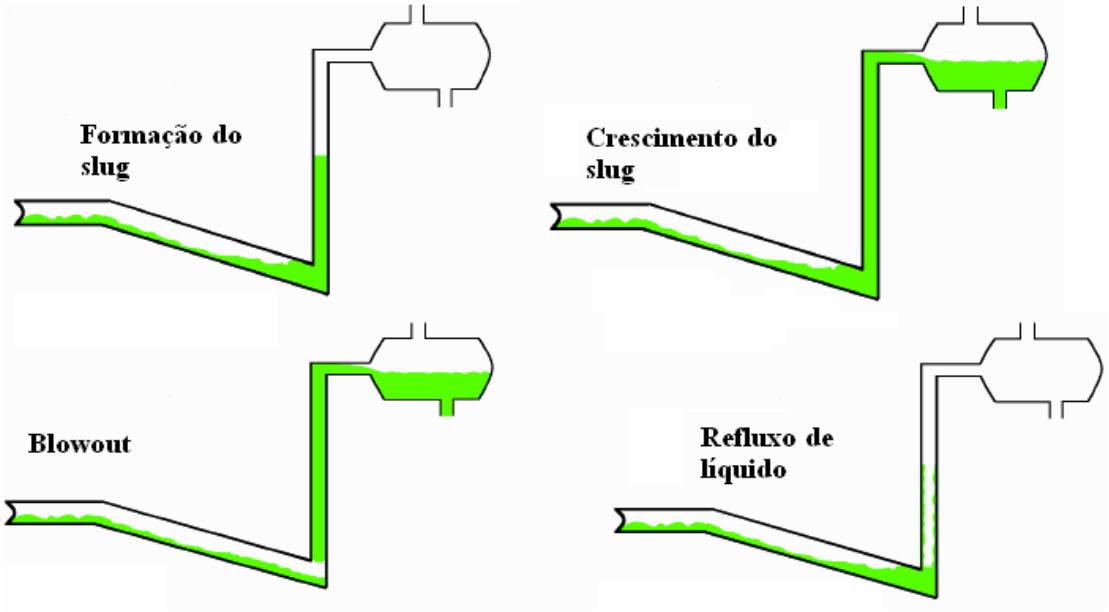


Figura 2.6 – Ciclo de escoamento intermitente severo..

Na realidade, o problema da intermitência severa é um caso particular do fenômeno chamado intermitência induzida pelo terreno (*terrain-induced slugging*) para o sistema duto-*riser*.

Na presença deste fenômeno, a operação do sistema duto-*riser* é realizada com grandes flutuações de vazão de gás, líquido e pressão e, conseqüentemente, na produtividade, causando também dificuldades no controle operacional, segurança e no próprio projeto do sistema. Sendo assim, a análise dos métodos propostos para a eliminação deste fenômeno deverá ser realizada com base em dados de pressão e vazões de gás e líquido no sistema duto-*riser*, observando-se a capacidade de reduzir as flutuações dessas variáveis sem afetar demasiadamente a viabilidade técnica e econômica da operação (Tengesdal, 2001).

No caso de sistemas que operem em águas profundas, é esperado que o fenômeno seja ainda mais problemático, pois podem ocorrer em pressões razoavelmente elevadas quando comparados a sistemas em águas rasas. Assim sendo, os métodos de elevação artificial, que levam o petróleo e o gás até a plataforma, deverão considerar as condições de segurança da operação e o pouco espaço disponível na plataforma, bem

como sua viabilidade econômica quando aplicadas a sistemas que operem em águas profundas, devido ao grande custo da produção.

Na realidade, ainda se discute a aplicabilidade dos métodos de elevação atuais em águas profundas, pois o custo pode chegar a 50 milhões de dólares para um sistema típico entre 1150 e 1650 ft (Tengesdal, 2001). No entanto, em outros sistemas os métodos existentes podem ser úteis.

Uma revisão dos métodos de eliminação da intermitência severa pode ser encontrada em Jansen e Shoham (1994). Os principais métodos de eliminação da intermitência severa podem ser divididos em:

- injeção de gás no *riser* – economicamente não é atraente devido ao custo da compressão de gás para a injeção e da linha adicional para levar o gás até a base do *riser*, além de necessitar de grandes vazões de gás;
- *choking* – deve ser realizado no topo do *riser*, através de válvulas que promovem choques no escoamento produzindo escoamento de bolhas ou *slugs* de pequeno porte, evitando grandes reduções na produtividade. No entanto, dependendo das condições de operação, a redução demasiada da produtividade pode ser inevitável. O uso desta técnica foi estudado e modelado por Jansen *et al.* (1996);
- aumento da pressão de retorno – reduz severamente a produtividade.
- divisão da linha em duas ou mais correntes – este método (Kaasa, 1990) utiliza mais de um *riser*, fazendo com que um deles opere praticamente com o líquido e outro com o gás. No entanto, este método pode reduzir bruscamente a produtividade, além de aumentar os custos relativos, o que pode o tornar economicamente proibitivo mesmo em sistemas com dois *risers*;
- uso de misturadores na base do *riser* – este método foi utilizado no campo de St. Joseph na Malásia, operada pela Shell (McGuinness e Cooke, 1993) e consiste em utilizar-se um separador no duto, enviando líquido a um *riser* e gás a outro. Os problemas apresentados pelo método anterior são esperados neste método;
- conexão direta do duto e *riser* – este método propõem a conexão do duto com o *riser* em um ponto anterior, proporcionando uma linha de *by-pass*. Este método foi

apresentado por Barbuto (1995) e atualmente é objeto de um estudo pelo grupo *Tusla University Fluid Flow Projects* (TUFFP);

- uso de Venturi – este método patenteado por Almeida e Gonçalves (1999) e baseia-se na mudança de regime provocada pela restrição que o Venturi impõe, promovendo uma mistura entre gás e líquido na base do *riser*.

Vale ressaltar, porém, que a intermitência promovida pelo terreno pode ocorrer com sistemas em que trechos horizontais e inclinados estejam ligados. No caso do sistema duto-*riser* o ângulo é muito elevado, aumentando as flutuações. Com ângulos menores, os ciclos de intermitência ocorrem, porém com menor intensidade e freqüência.

CAPÍTULO 3

SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS HIPERBÓLICAS: MÉTODOS DE SOLUÇÃO BASEADOS NO PROBLEMA DE RIEMANN

3.1. Introdução

A simulação de escoamentos compressíveis é importante em diversas aplicações industriais. Este tipo de escoamento é governado por leis de conservação de massa, momento, energia, e as equações constitutivas associadas, como as equações de estado, que são relações macroscópicas que representam os fenômenos microscópicos. Estas relações influenciam fortemente a estrutura e dinâmica do campo ondulatório do escoamento.

As equações de conservação para problemas dominados pela advecção podem ser representadas por um sistema hiperbólico cuja solução pode apresentar elevados gradientes ou mesmo descontinuidades. A maioria dos códigos comerciais emprega métodos com elevada difusão numérica que podem apresentar soluções irreais devido à incapacidade de resolver o campo ondulatório. Por outro lado, existem famílias de métodos que levam em consideração a estrutura ondulatória do escoamento, através da solução local das equações hiperbólicas, a qual é composta de ondas elementares (Menikoff e Plhor, 1989).

A escolha do algoritmo para solução de um sistema com equações de difusão-advecção depende de alguns fatores como as velocidades envolvidas e a compressibilidade das fases, dentre outros. Primeiramente, deve-se observar o grau de compressibilidade das fases presentes. Caso pelo menos uma das fases seja incompressível ou fracamente compressível, a estrutura da matriz obtida por um método de discretização espacial qualquer usando as variáveis primitivas teria a seguinte forma geral:

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{Mu}}_1 & \underline{\underline{Mv}}_1 & \underline{\underline{Mw}}_1 & \underline{\underline{Mp}}_1 \\ \underline{\underline{Mu}}_2 & \underline{\underline{Mv}}_2 & \underline{\underline{Mw}}_2 & \underline{\underline{Mp}}_2 \\ \underline{\underline{Mu}}_3 & \underline{\underline{Mv}}_3 & \underline{\underline{Mw}}_3 & \underline{\underline{Mp}}_3 \\ \underline{\underline{Cu}}_1 & \underline{\underline{Cv}}_1 & \underline{\underline{Cw}}_1 & \underline{\underline{0}} \end{bmatrix} \tag{3.1}$$

onde as matrizes iniciadas com *M* referem-se às equações do movimento e as iniciadas com *C* à equação da continuidade. Os índices *u, v, w* e *p* indicam a variável que é multiplicada pela matriz, e 1, 2 e 3 indicam as equações do movimento nas três direções do espaço. Pode-se observar que a equação da continuidade não depende da pressão e, de acordo com os pontos em que as variáveis são prescritas, colunas de zeros poderão aparecer na matriz do sistema.

Uma das formas de se resolver tal problema seria o uso de uma aproximação funcional das variáveis de integração adequada no nível dos elementos discretos (volumes ou elementos finitos), caso a formulação adotada permita tal escolha. Uma formulação que foi muito utilizada é chamada de Formulação Mista de Elementos, Finitos que satisfaz à chamada condição de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi (LBB) (Babuska, 1971; Brezzi, 1974). No entanto, a formulação mista vem perdendo força em Elementos Finitos, e no método de Volumes Finitos esta formulação mista não foi usada.

Optando-se pela não adoção de diferentes aproximações funcionais para velocidade e pressão que satisfaçam às condições LBB, será necessário a imposição de uma compressibilidade artificial ao sistema, impondo que a matriz de zeros da equação (3.1) seja substituída por não zeros. Nesta linha, um sem número de opções está disponível na literatura, cada uma com suas particularidades.

Outra linha para tratar de problema incompressíveis é a adoção de uma separação (*split*) das equações do movimento e continuidade, inicialmente proposta por Chorin (1967) e modificada por inúmeros autores (Patankar, 1980).

No caso em que a compressibilidade das fases é elevada, os problemas gerados pela incompressibilidade desaparecem e a matriz do sistema pode ser invertida. Porém, descontinuidades de contato, ondas de choque e rarefação típicos de sistemas compressíveis podem ocorrer devido ao caráter hiperbólico que as equações adquirem.

Nas últimas décadas inúmeras linhas de pesquisa específicas para o tratamento de problemas puramente hiperbólicos têm sido empregadas em problemas de difusão-advecção compressíveis. Embora apenas os sistemas compressíveis apresentem um caráter hiperbólico marcante, os termos de difusão, tanto nos sistemas incompressíveis quanto nos compressíveis, podem ser tratados como termos fonte, mantendo a estrutura das equações a serem resolvidas como as de um sistema hiperbólico com termos fonte que incluem, dentre outros, os termos de difusão.

No entanto, o *split* citado anteriormente permanece atrativo, embora as equações possam ser resolvidas simultaneamente, devido à separação das partes advectiva e difusiva das equações. Este procedimento permite o uso de métodos específicos para solução de problemas hiperbólicos, para solução da parte advectiva, seguido de um método simples para solução da parte difusiva das equações. Assim sendo, técnicas de separação dos operadores incorporam formulações tanto para tratamento da incompressibilidade quanto para o de choques, formando a base dos algoritmos de solução de problemas de escoamento a qualquer velocidade.

Uma forma de tratar os problemas compressíveis a altas velocidades é chamada de “captura de choque” (Zienkiewicz e Taylor, 2000) na qual uma viscosidade artificial é utilizada e são utilizadas malhas bastante refinadas na região de choque através de malhas adaptativas. No Método dos Elementos Finitos, esta linha de pesquisa é bastante desenvolvida, sendo empregadas formulações de Petrov-Galerkin, Petrov-Galerkin Espaço-Tempo, Taylor-Galerkin e, mais recentemente, formulações baseadas no Método das Características no tempo (Zienkiewicz, 1995).

Outra forma de tratar os problemas puramente hiperbólicos foi desenvolvida para discretizações espaciais por Volumes Finitos, Elementos Finitos e Diferenças

Finitas. Essa família de métodos é chamada de *Riemann Solvers*, baseando-se na solução de um problema de Riemann associado a um dos métodos citados. Essa estratégia foi empregada principalmente por pesquisadores da área de acompanhamento de ondas e é abordada mais detalhadamente neste capítulo.

O método dos Volumes Finitos tem provado ser eficiente na solução de problemas de valor inicial hiperbólicos. As formulações mais populares são baseadas na solução aproximada do problema de Riemann na interface das células, que permite uma estimativa bastante acurada dos fluxos na interface.

Um esquema de solução do problema de Riemann aproximado deve ser escolhido, uma vez que os fluxos devem ser calculados em regiões nas quais as variáveis não são conhecidas (faces dos volumes). É necessário, portanto, estimar as variáveis nestas regiões a partir de pontos onde os valores das variáveis são conhecidos (centro dos volumes). Uma vez definido como o cálculo dos fluxos será realizado nas faces, um limitador de fluxo advectivo é usualmente utilizado existindo diversos métodos na literatura (Toro, 1999). A simples utilização de métodos de baixa ordem exige malhas extremamente refinadas, enquanto que a adoção de métodos de ordem elevada produz oscilações (*overshooting* ou dispersão) que não condizem com a realidade.

O clássico método *upwind* baseia-se no fato de que a informação que deve ser usada no cálculo do fluxo na face das células deve seguir o sentido de propagação das informações físicas, ao invés de usar todas as células que cercam a face. No entanto, a velocidade é usada como determinante do sentido de propagação das informações. Uma evolução que seguiu propôs que cada termo do fluxo na interface usa valores de células distintas de acordo com o sentido de propagação de cada informação, ou seja, de acordo com os autovalores. Assim, cada célula terá um termo de fluxo “+” e outro “-” correspondentes às informações que se propagam para a direita ou para a esquerda. Assim, o fluxo na interface “j+1/2” terá uma parte proveniente dos termos “+” da célula à esquerda da face e outra parte proveniente dos termos “-” da célula à direita da face. Um esquema disto pode ser visto na Figura 3.1.

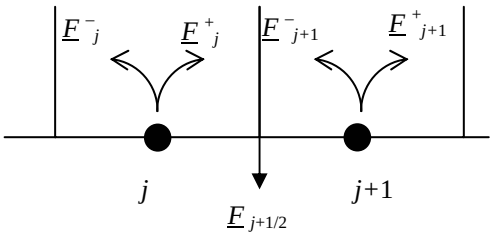


Figura 3.1 – Curvas características.

Os esquemas chamados de *Flux Difference Splitting* (FDS) são modificações dos esquemas clássicos do tipo *upwind*. Esses esquemas são bastante acurados para escoamentos a quaisquer velocidades e são baseados na solução aproximada de um problema de Riemann local. No entanto, o esforço computacional necessário é acentuado devido aos inúmeros cálculos da matriz jacobiana do fluxo e seus autovetores e autovalores. O pioneiro desses métodos é o de Godunov (1959), que é baseado na solução exata do problema de Riemann nas interfaces. No entanto, a obtenção dessa solução exata exige um tempo computacional ainda mais elevado que a solução do problema de Riemann aproximado. Sendo assim, foram propostos *solvers* de Riemann aproximados que linearizam o problema de Riemann, sendo o mais popular o de Roe (Roe, 1983). A generalização desse método não é fácil para sistemas complexos, pois algumas etapas ainda exigem a obtenção de expressões analíticas. Além disso, os fluxos numéricos calculados por estes *solvers* de Riemann aproximados, apesar de mais acurados que os dos métodos tradicionais, ainda não garantem a positividade da pressão e da densidade. Isto exige alterações nesses métodos. Outras desvantagens, como o fenômeno de *carbuncle*, aparecem em problemas multidimensionais que não serão tratados neste trabalho (Liou, 1996).

Os esquemas chamados de *Flux Vector Splitting* (FVS) são simplificações dos esquemas FDS e são baseados em cálculos escalares dos termos de dissipação, diferentemente dos FDS. Portanto, esses esquemas exigem menor esforço computacional. No entanto, apresentam também maior difusão numérica. A seguinte equação mostra a diferença entre as idéias utilizadas nos métodos FDS e FVS, respectivamente:

$$\begin{aligned} &\underline{F}(\underline{U}_{j+1}) - \underline{F}(\underline{U}_j) = \underline{\underline{A}}^{+}\Delta\underline{U}_{j+1/2} + \underline{\underline{A}}^{-}\Delta\underline{U}_{j+1/2} \Rightarrow \underline{F}_{j+1/2} = \underline{F}(\underline{U}_{j+1}) - \underline{\underline{A}}^{+}\Delta\underline{U}_{j+1/2} \rightarrow FDS \\ &\underline{F}(\underline{U}_j) = \underline{F}(\underline{U}_j)^{+} + \underline{F}(\underline{U}_j)^{-} \Rightarrow \underline{F}_{j+1/2} = \underline{F}(\underline{U}_j)^{+} + \underline{F}(\underline{U}_{j+1})^{-} \rightarrow FVS \end{aligned} \qquad (3.2)$$

Recentemente, um grande esforço tem sido realizado para obtenção de métodos híbridos com acurácia semelhante ao FDS e com eficiência computacional dos FVS. Esses esquemas são chamados de *Advection Upstream Splitting Methods* (AUSM). Existem inúmeras formulações com maior ou menor difusão numérica, e com diferentes formas de *splitting*. Dentre os esquemas deste tipo destacam-se AUSM (Liou e Steffen, 1993), AUSM+ (Liou, 1996), AUSMDV (Wada e Liou, 1997, Liou, 2000) e AUSM+-up (Liou, 2006).

Outra classe de esquemas não estudado neste trabalho é a dos Métodos de Relaxação (Evje e Fjelde, 2002), que são capazes de resolver fortes não-linearidades, mas cuja formulação é dependente de cada caso (De Vuyst, 2004).

De Vuyst (2004) apresentou um novo método e o aplicou a vários casos de escoamento monofásico e multifásico. A idéia desse método é calcular o fluxo como uma ponderação entre os esquemas de segunda ordem de Lax-Wendroff e o de primeira ordem de Lax-Friedrichs, fazendo uso das características desejáveis de cada esquema, em cada região do espaço. A ponderação entre os esquemas é determinada segundo novos conceitos criados pelo autor e será apresentada oportunamente.

Formulações de alta ordem que não apresentam oscilações têm sido desenvolvidas, sendo os métodos mais promissores os chamados TVD (*total variation diminishing*) ou, mais corretamente, TVNI (*total variation non-increasing*), UNO (*Uniformly Non-oscillatory*) (Harten, 1987), ENO (*Essentially Non-oscillatory*) (Harten, 1983). Esses métodos foram desenvolvidos ao longo de décadas de pesquisa sob forte base matemática e uma boa referência sobre os métodos TVD é o livro texto de Toro (1999).

Devido à dificuldade em se obter algumas expressões do método de Roe, foram desenvolvidas alternativas, dentre elas VFRoe (Buffard *et al.*, 2000), os já citados métodos híbridos, *Advection Upstream Splitting Method* (AUSM) e o proposto por De Vuyst (2004), embora não sejam TVD. A acurácia desses métodos não é superior aos citados TVD e ENO, mas são facilmente generalizados para qualquer modelo adotado.

Devido a essas dificuldades com o *solver* de Roe, os métodos VFRoe, os do tipo AUSM e Híbrido Lax-Friedrichs-Lax–Wendroff foram os únicos aplicados aos gases reais e, apenas os dois últimos junto com o método AUSMDV, aos sistemas multifásicos. Os métodos do tipo AUSM foram elevados à segunda ordem pela estratégia de reconstrução de dados MUSCL-Hancock (Van Leer, 1985), e incluídos nas comparações.

No que diz respeito à discretização temporal, a adoção de formulações explícitas e locais para a determinação dos fluxos acarreta uma grande restrição do passo de tempo de acordo com a condição CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*). Formulações implícitas exigem a solução iterativa do sistema não linear gerado, mas não estão sujeitas à restrição no passo temporal. Neste trabalho apenas a discretização explícita de Euler foi usada para tornar possíveis as comparações com os resultados da literatura, embora o simulador TITÃS também permita o uso de um método explícito de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Com relação à malha a ser adotada, existem diversas opções a serem definidas, como se a malha é estruturada ou não. Para sistemas unidimensionais, o mais importante é decidir-se por malhas coincidentes ou desencontradas. Na primeira, a pressão e a velocidade são obtidas nos mesmos pontos do espaço, o que não ocorre na segunda. A escolha dependerá fortemente do tipo de condição de contorno a ser imposta, e do nível de difusão numérica aceitável. No caso do TITÃS, apenas malhas coincidentes são adotadas.

Finalmente, deve-se ter em mente que, para se resolver equações de transporte, alguns itens devem ser analisados na escolha do algoritmo de solução: (i) caso o

escoamento seja incompressível, deve-se optar por diferentes funções de interpolação para velocidade e pressão, ou por uma solução seqüencial das equações da continuidade e pressão ou impor alguma compressibilidade artificial; (ii) deve-se optar por um método para estabilização dos termos advectivos (tanto para escoamentos incompressíveis quanto para compressíveis); (iii) caso as velocidades atingidas sejam muito altas, pode ser necessária a adoção de um método para tratamento de choques (captura de choque, *discontinuous* Galerkin, esquemas TVD, ENO, etc); (iv) outros fatores como estrutura de dados apropriada à malha adotada, tipo de malha de acordo com a complexidade da geometria etc. Este texto introdutório procurou separar esses itens, pois, freqüentemente, as finalidades de cada um são confundidas.

Este capítulo está dividido da seguinte forma: (i) uma introdução às equações diferenciais hiperbólicas e suas características; (ii) discretização por volumes finitos e Riemann *Solvers* aplicada a gás ideal; (iii) extensão dos métodos apresentados para atingir segunda-ordem no espaço; (iv) aplicação dos métodos citados para gases reais.

3.2. Noções sobre equações diferenciais hiperbólicas

3.2.1 – Sistemas Hiperbólicos Lineares

Sejam as equações diferenciais parciais da forma:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^{m} a_{ij}(t, x, \underline{u}) \frac{\partial u_j}{\partial x} + b_i(t, x, \underline{u}) \tag{3.3}$$

com *m* equações e *m* incógnitas. O sistema pode ser expresso por:

$$\begin{aligned} &\underline{U}_t + \underline{\underline{A}}\,\underline{U}_x + \underline{B} = \underline{0} \\ &\underline{U} = [u_1, u_2, ..., u_m]^t \\ &\underline{B} = [b_1, b_2, ..., b_m]^t \\ &\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} a_{11} & ... & a_{1m} \\ : & \backslash & : \\ a_{m1} & ... & a_{mm} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3.4}$$

Se $\underline{\underline{A}}$ e $\underline{B}$ são constantes, o sistema é dito linear de coeficientes constantes. Se $\underline{B}$ depende linearmente de U o sistema continua sendo linear. Se $\underline{\underline{A}}$ é função apenas de $\underline{U}$, o sistema é dito quase-linear. Para leis de conservação na forma $\underline{U}_t + \underline{F}(\underline{U}_x) = \underline{0}$, $\underline{\underline{A}} = \partial \underline{F}(\underline{U}_x) / \partial \underline{U}$ é dita matriz jacobiana do fluxo e, usando-se a regra da cadeia, o sistema pode ser escrito na forma $\underline{U}_t + \underline{\underline{A}}\,\underline{U}_x = \underline{0}$. Os autovalores da matriz jacobiana representam a velocidade de propagação das informações. Existem dois tipos de autovetores, os direitos e os esquerdos, dados respectivamente por:

$$\begin{aligned} &\underline{\underline{A}}\,\underline{R}_i = \lambda_i \underline{R}_i \rightarrow \textit{Direitos} \\ &\underline{L}_i \underline{\underline{A}} = \lambda_i \underline{L}_i \rightarrow \textit{Esquerdos} \end{aligned} \tag{3.5}$$

onde λ_i´s são os *m* autovalores da matriz jacobiana. Se a matriz jacobiana possui *m* autovalores e *m* autovetores, o sistema é dito hiperbólico, e estritamente hiperbólico, se todos os autovalores são distintos.

Seja a equação de advecção linear de coeficiente *a* constante:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ &u(x,0) = u_0(x) \end{aligned} \tag{3.6}$$

a é dito velocidade de propagação da onda. As curvas características são aquelas na forma $x=x(t)$ no plano t-x nas quais a equação diferencial parcial torna-se ordinária. Seja $u=u(x(t),t)$. A derivada total é dada por:

$$\frac{\mathrm{du}}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial x} \tag{3.7}$$

Porém, as curvas características são aquelas nas quais $\partial x/\partial t=a$. Substituindo-se na equação anterior, obtém-se:

$$\frac{\mathrm{du}}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{3.8}$$

Não há variação de *u* com o tempo ao longo das curvas características $x=x(t)$ tais que $dx/dt=a$. Além disso, *a* é dita velocidade característica, e é a inclinação da curva característica no plano t-x.

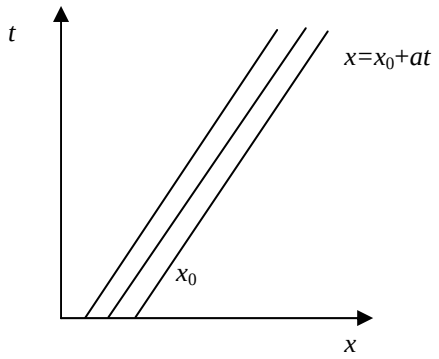


Figura 3.2 – Curvas características.

Sendo assim, para um perfil inicial $u_0(x)$, esse perfil se manterá, apenas deslocando-se com velocidade a, ou seja, se $a<0$, o perfil move-se para a esquerda, e se $a>0$, para a direita.

O problema de Riemann é dado pela seguinte condição inicial:

$$\underline{U}(x,0) = \begin{cases} \underline{U}^L, & x < 0 \\ \underline{U}^R, & x > 0 \end{cases} \tag{3.9}$$

A solução é $u(x,t)=u_0(x-at)$. Portanto, a solução é U_L para $x<at$ e U_R para $x>at$. Dessa forma, a curva característica $x(t)=at$ separa as regiões do plano t-x nas quais a solução realmente varia. Pode-se generalizar esta análise para um sistema de equações hiperbólicas lineares de coeficientes constantes. Seja $\underline{\underline{K}}$ a matriz na qual as colunas são formadas pelos autovetores da matriz jacobiana, e $\underline{\underline{\Lambda}}$ a matriz diagonal cuja diagonal é formada pelos autovalores λ_i da jacobiana. Se $\underline{\underline{A}}$ é diagonalisável então $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{K}}\,\underline{\underline{\Lambda}}\,\underline{\underline{K}}^{-1} \Rightarrow \underline{\underline{\Lambda}} = \underline{\underline{K}}^{-1}\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{K}}$. Se esta matriz de autovetores pode ser invertida, então existe um conjunto de variáveis $\underline{W} = \underline{\underline{K}}^{-1}\underline{U} \Rightarrow \underline{U} = \underline{\underline{K}}\,\underline{W}$ tal que o sistema dado pela equação (3.4) com $\underline{\underline{A}}$ constante e $\underline{B}$ = 0, pode ser completamente desacoplado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} &\begin{cases} \underline{U}_t + \underline{\underline{A}}\,\underline{U}_x = \underline{0} \\ \underline{U}_t + \underline{\underline{K}}\,\underline{W}_t ; \underline{U}_x = \underline{\underline{K}}\,\underline{W}_x \end{cases} \\ &\underline{\underline{K}}\,\underline{W}_t = \underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{K}}\,\underline{W}_x = \underline{0} \Rightarrow \\ &\underline{W}_t = \underline{\underline{\Lambda}}\,\underline{W}_x = \underline{0} \end{aligned} \tag{3.10}$$

Esta forma é conhecida como forma canônica ou característica. Cada uma das equações tem a mesma forma da equação escalar tratada anteriormente, apenas substituindo-se a constante a pelo autovalor λ_i correspondente à equação i. As curvas características serão $x=x(t)$ tais que $dx/dt=\lambda_i$.

O problema de valor inicial dado pelo sistema anterior, com condição inicial $\underline{W}_0 = \underline{\underline{K}}^{-1}\underline{U}_0$ tem solução dada por $\underline{W} = \underline{W}_0(x - \lambda_i t)$, ou em relação às variáveis originais $\underline{U} = \sum_i^m W_i^0(x - \lambda_i t)\underline{K}_i$. A solução em um dado ponto *x* dependerá, portanto, dos valores iniciais em *m* pontos x_0 correspondentes à interseção da característica com velocidade λ_i e o eixo *x*, no plano *t*-*x*. Pode-se concluir ainda, que a solução é a superposição de *m* ondas independentes, cada qual com velocidade λ_i e forma $W_i^0\,\underline{K}_i$.

No caso do problema de Riemann, apenas um ponto x_0 correspondente à descontinuidade observada inicialmente terá influência na solução. De fato, como inicialmente tem-se $\underline{U}$ dividido em $\underline{U}_R$ e $\underline{U}_L$, pode-se dividir a solução da mesma forma, e, portanto, a mesma será a superposição de *m* ondas tanto para $\underline{U}_R$ quanto para $\underline{U}_L$. Considerando que $\lambda_1<\lambda_2<\lambda_3<...<\lambda_m$. Esta solução pode ser escrita na forma:

$$\begin{cases} x < \lambda_1 t, \underline{U} = \underline{U}_L = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \underline{K}_i \\ x > \lambda_m t, \underline{U} = \underline{U}_R = \sum_{i=1}^{m} \beta_i \underline{K}_i \\ \lambda_1 t < x < \lambda_m t, \underline{U} = \sum_{i=I+1}^{m} \alpha_i \underline{K}_i + \sum_{i=1}^{I} \beta_i \underline{K}_i \end{cases} \tag{3.11}$$

onde $I=I(x,t)$ é o máximo *i* tal que $x-\lambda_i t>0$. Resumindo, há sempre *m* ondas equivalentes a α e a β mas para um dado (*t*,*x*) apenas algumas influenciarão a solução.

No intuito de entender melhor o comportamento da solução apresentada, o caso de um sistema 2x2 é aqui detalhado. Neste caso existem duas ondas com velocidades λ_1 e λ_2 para as quais a solução à esquerda do ponto $x_1=\lambda_1 t$ dependem apenas do estado inicial à esquerda da descontinuidade, e à direita do ponto $x_2=\lambda_2 t$ dependem apenas do estado inicial à direita da descontinuidade. Nestas regiões pode-se escrever as soluções à esquerda de $x_1=\lambda_1 t$ e à direita de $x_2=\lambda_2 t$ como $U=\alpha_1\underline{K}_1+\alpha_2\underline{K}_2$ e $U=\beta_1\underline{K}_1+\beta_2\underline{K}_2$, respectivamente. No entanto, existe uma região na qual a solução também é dada pela superposição de duas ondas, porém, uma equivalente à região à esquerda da descontinuidade na condição inicial, e outra equivalente à direita da mesma região. Esta

região é chamada de Região Estrela (*star region*). Tomando-se um ponto P(x,t) na região estrela, a solução dependerá da condição inicial entre os pontos $x_1^0=x-\lambda_1 t$ e $x_2^0= x-\lambda_2 t$, intervalo conhecido como domínio de dependência. A solução nessa região será dada por:

$$\begin{aligned} \underline{U} &= \underline{U}_L = \alpha_1 \underline{K}_1 + \alpha_2 \underline{K}_2 \rightarrow \lambda_1 t > x \\ \underline{U} &= \underline{U}_R = \alpha_1 \underline{K}_1 + \beta_2 \underline{K}_2 \rightarrow x > \lambda_2 t \\ \underline{U} &= \alpha_2 \underline{K}_2 + \beta_1 \underline{K}_1 \rightarrow \lambda_1 t \leq x \leq \lambda_2 t \end{aligned} \tag{3.12}$$

O salto na solução também pode ser expandido pelos autovetores da matriz jacobiana, que no caso geral de um sistema com m equações, toma a forma:

$$\Delta \underline{U} = \underline{U}_R - \underline{U}_L = (\beta_1 - \alpha_1)\underline{K}_1 + ... + (\beta_m - \alpha_m)\underline{K}_m \tag{3.13}$$

correspondendo a m ondas de velocidade de propagação β_i-α_i. O conjunto de pontos nos quais a solução depende do seu valor em um ponto x é chamado de domínio de influência do ponto x.

Ao aplicarmos a análise anterior às equações de Euler para escoamento isotérmico ($\underline{U}=[\rho,m]^t$ e $\underline{F}=[\rho,m^2/\rho+p]^t$, $m=\rho u$), obtém-se a seguinte jacobiana:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\dfrac{m^2}{\rho^2} + \left(\dfrac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s & \dfrac{2m}{\rho} + \left(\dfrac{\partial p}{\partial m}\right)_\rho \end{bmatrix} \tag{3.14}$$

Se o processo for isentrópico, $p = p(\rho)$ somente, e a matriz jacobiana fica:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\dfrac{m^2}{\rho^2} + \left(\dfrac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s & \dfrac{2m}{\rho} \end{bmatrix} \tag{3.15}$$

Pode-se obter o polinômio característico da matriz jacobiana, dado por:

$$| \underline{\underline{A}} - \lambda \underline{\underline{I}} | = 0$$
$$\lambda^2 - \frac{2m\lambda}{\rho} - \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s + \frac{m^2}{\rho^2} = 0 \tag{3.16}$$

Obtém-se a condição necessária para que a mesma tenha autovalores reais e distintos, conhecida como condição de convexidade quando a compressão é isentrópica.

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s > 0 \tag{3.17}$$

3.2.2 – Sistemas Hiperbólicos Não Lineares

Seja a equação hiperbólica não linear dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + [f(u)]_x = 0 \rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} + \lambda(u) u_x = 0, \lambda(u) = \frac{\partial f}{\partial u} = f'(u) \tag{3.18}$$

Na realidade o fluxo pode depender da derivada de *u*, e neste caso a equação é verdadeiramente não linear. O sistema apresentado é quase-linear, que é um caso particular dos sistemas não lineares. O comportamento do fluxo *f* é de suma importância para o comportamento de $u(x,t)$. Particularmente, a monotonicidade de $\lambda(u)$ é crucial, pois sua derivada é igual à segunda derivada do fluxo, ou seja, define a convexidade do mesmo. No caso das leis de conservação, a convexidade dependerá da EdE (equação de estado). Pode-se construir a solução do sistema não linear seguindo-se as curvas características como no caso linear. Neste caso, as curvas características são dadas por $dx/dt=\lambda(u)$, cuja solução é:

$$x(t) = x_0(x(t),t) + \lambda(u_0(x_0(x(t),t))).t \tag{3.19}$$

sendo, portanto, implícita. No caso da advecção linear, $\lambda(u)=a$, a onda não é distorcida. No caso não linear, o fluxo pode ser convexo, ou seja, $\lambda'(u)=f''(u)>0$. Assim, a

velocidade característica $\lambda(u)$ é crescente com u, ou seja, os maiores valores iniciais de u, u_0, se propagarão mais rapidamente, distorcendo a onda. Assim, para um fluxo convexo, em uma região onde u_0 cresce com x_0, a onda irá se distender, região chamada expansiva, e na região onde u_0 decresce com x_0, a onda irá se comprimir, região chamada de compressiva. Nas regiões de compressão da onda, eventualmente as características irão se cruzar, quebrando a onda. Isso ocorrerá com a característica para a qual $|\lambda'(u_0)\, du_0/dx_0|$ é maior para um caso compressivo $\lambda'(u_0)\, du_0/dx_0<0$. Um termo de difusão adicionado ao sistema "competirá" com a advecção tendendo a distendê-la quando a advecção tender a comprimi-la e vice-versa. Os sistemas físicos sempre apresentam alguma difusão, no entanto, esse momento no qual as características se cruzam pode ser encarado como o caso limite no qual a compressibilidade é tal que ocorre a formação das ondas de choque, ou seja, quando a difusão for desprezível em relação a advecção (Toro, 1999).

3.2.3 – Ondas de Choque e rarefação

O comprimento da transição nas ondas de choque está na mesma magnitude do caminho livre médio das moléculas (10^{-7} m para o ar). Sendo assim, aproximar essas ondas por descontinuidades matemáticas é uma boa alternativa (Toro, 1999).

Seja $u(x,t)$ contínua em todo x exceto na curva $s(t)$. A lei de conservação na forma integral é:

$$\begin{aligned} f(u(x_L,t)) - f(u(x_R,t)) &= \frac{d}{dt}\int_{x_L}^{S(t)} u(x,t)dx + \frac{d}{dt}\int_{S(t)}^{x_R} u(x,t)dx \\ f(u(x_L,t)) - f(u(x_R,t)) &= [u(s_L,t) - u(s_R,t)]S + \int_{x_L}^{S(t)} \frac{d}{dt}u(x,t)dx + \int_{S(t)}^{x_R} \frac{d}{dt}u(x,t)dx \end{aligned} \tag{3.20}$$

onde $u(s_L,t) = \lim_{x\to s(t)} u_L(x,t); u(s_R,t) = \lim_{x\to s(t)} u_R(x,t)$, e $S = \frac{ds(t)}{dt}$ é a velocidade de propagação da descontinuidade. Quando $x_L \to x_R$, $f(u(x_L,t))$-$f(u(x_R,t))$=$[u(s_L,t)$-$u(s_R,t)]S$.

Esta relação é conhecida como a condição de Rankine-Hugoniot. Para o caso escalar, $S=\Delta f/\Delta u$.

Seja o problema de valor inicial dado pela equação da advecção não linear e com condição inicial $u=u_L$ para $x<x_0$, e $u=u_R$ para $x>x_0$. Se o fluxo é convexo, maiores valores de u acarretam em maiores valores do fluxo e, portanto, com $u_L>u_R$, o campo ondulatório à esquerda de x_0 terá maior velocidade do que o campo à direta do mesmo ponto. Desta forma, as características apresentarão o comportamento dado na Figura 3.3.

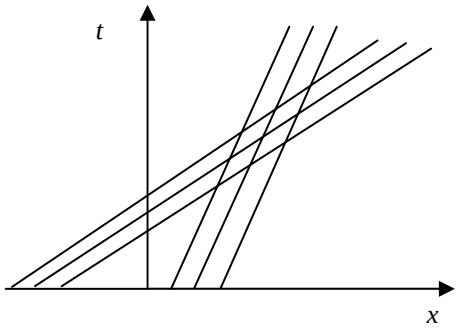


Figura 3.3 – Cruzamento das características.

A onda de choque é o lugar geométrico dos pontos do plano t-x nos quais as características se cruzam, como mostrado na Figura 3.4.

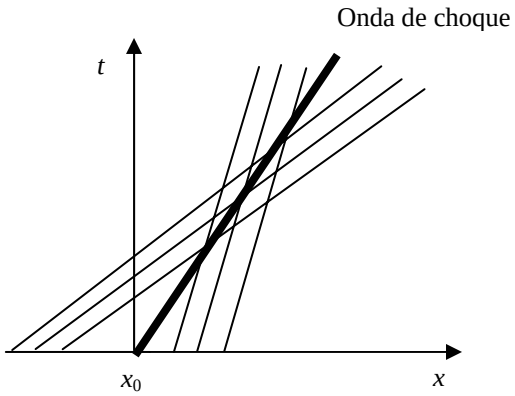


Figura 3.4 – Onda de choque.

Nesse caso, a solução é dada por u_L se $x<St$ e u_R se $x>St$. A velocidade da descontinuidade, caso o fluxo seja ½ u^2, será $S=½(u_L+u_R)$. Essa solução satisfaz a chamada condição entrópica, que afirma que as curvas características interceptam a onda de choque, isto é, $\lambda(u_L) > S > \lambda(u_R)$. Se fizermos $u_L<u_R$ na condição inicial, para um fluxo convexo, a solução anterior (u_L se $x<St$ e u_R se $x>St$) é matematicamente aceitável e serve para este caso. No entanto, isso corresponderá a um caso expansivo e violará a condição entrópica. Isso ocorre porque $\lambda(u_L)<\lambda(u_R)$ e ocorre uma divergência do choque, ou seja, a descontinuidade inicial será imediatamente suavizada. Essa condição sem base física é chamada de "choque rarefeito".

No entanto, dada a condição inicial $u_L<u_R$, considere a solução dada por dois estados u_L e u_R separados de um $\Delta x=x_R-x_L$ no qual u varia linearmente entre u_L e u_R. Neste caso, as características têm a aparência mostrada na Figura 3.5.

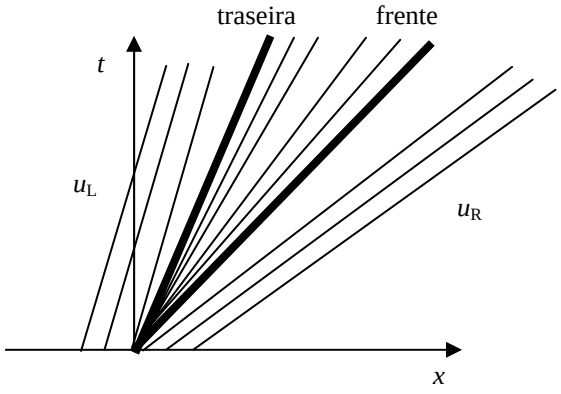


Figura 3.5 – Curvas características para uma onda de rarefação.

A solução do problema é, portanto, uma região de variação suave, separando dois estados constantes, chamada de onda de rarefação. Para o caso mostrado, o fluxo é convexo fazendo com que a descontinuidade da condição inicial seja imediatamente suavizada.

3.2.4 – Condições de Rankine-Hugoniot e Invariantes de Riemann

As condições de Rankine-Hugoniot (CHR) já foram citadas anteriormente, e sua forma para sistemas de equações é dada por:

$$\begin{aligned} &\Delta \underline{F} = S_i \Delta \underline{U} \\ &\Delta \underline{F} = \underline{F}(\underline{U}_R) - \underline{F}(\underline{U}_L); \Delta \underline{U} = \underline{U}_R - \underline{U}_L \end{aligned} \tag{3.21}$$

onde S_i é a velocidade da descontinuidade. Para o caso linear de coeficientes constantes, as CRH ficam:

$$\Delta \underline{F} = \underline{\underline{A}} \Delta \underline{U} = \lambda_i (\Delta \underline{U})_i \tag{3.22}$$

De fato, estas condições podem ser utilizadas para a obtenção da solução do problema de Riemann.

Para um sistema hiperbólico quase-linear, pode-se definir um conjunto de "m-1" equações diferenciais ordinárias dado por:

$$\frac{du_1}{R_1^i} = \frac{du_2}{R_2^i} = \ldots = \frac{du_m}{R_m^i} \tag{3.23}$$

Esse sistema é válido através da estrutura ondulatória e relaciona a razão entre a mudança du_j e o componente j do autovetor $\underline{R}^i$. A utilização dos invariantes de Riemann também constitui uma forma de obter-se a solução do problema de Riemann.

Como exemplo, tome-se a equação de Euler. Seja o sistema dado por:

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \frac{\partial \underline{f}(\underline{u})}{\partial x} = \underline{g}(\underline{u}) \tag{3.24}$$

onde:

$$\begin{aligned}
&\underline{u} = [\rho, \rho v, E]^t \\
&\underline{f}(\underline{u}) = [\rho v, \rho v^2 + p, v(E + p)]^t \\
&\underline{g}(\underline{u}) = \underline{0}
\end{aligned} \tag{3.25}$$

onde ρ é a densidade, v é a velocidade e E é a energia total por unidade de volume. Com as seguintes relações adicionais:

$$E = \rho(\frac{1}{2}v^2 + e) \tag{3.26}$$

onde e é a energia interna específica. E para gás ideal:

$$e = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}; c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} \tag{3.27}$$

A matriz jacobiana é dada por:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2}(\gamma - 3)v^2 & (3 - \gamma)v & (\gamma - 1) \\ \frac{1}{2}(\gamma - 2)v^3 - \frac{c^2 v}{\gamma - 1} & \frac{3 - 2\gamma}{2}v^2 + \frac{c^2}{\gamma - 1} & \gamma v \end{bmatrix} \tag{3.28}$$

E seus autovalores e autovetores:

$$\begin{aligned}
&\underline{R}^1 = \begin{bmatrix} 1 \\ v - c \\ h - vc \end{bmatrix}, \underline{R}^2 = \begin{bmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2}v^2 \end{bmatrix}, \underline{R}^3 = \begin{bmatrix} 1 \\ v + c \\ h + vc \end{bmatrix} \\
&\lambda^1 = v - c, \lambda^2 = v, \lambda^3 = v + c
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Onde $h=(E+p)/\rho$ é a entalpia específica total. A solução é formada por três campos ondulatórios de velocidades λ^1, λ^2 e λ^3. A segunda onda é um campo ondulatório degenerado ($\nabla\lambda^i\cdot\underline{R}^2=0$, $i=1,2,3$), conhecido como "descontinuidade de contato" (*contact discontinuity*). Os outros campos são de rarefação e choque, ou seja, são campos ondulatórios genuinamente não lineares ($\nabla\lambda^i\cdot\underline{R}^i\neq 0$, $i=1,3$). Supondo que a onda à esquerda é de rarefação e à direita a de choque (o que não pode ser definido a *priori*), a estrutura da solução será a apresentada na Figura 3.6.

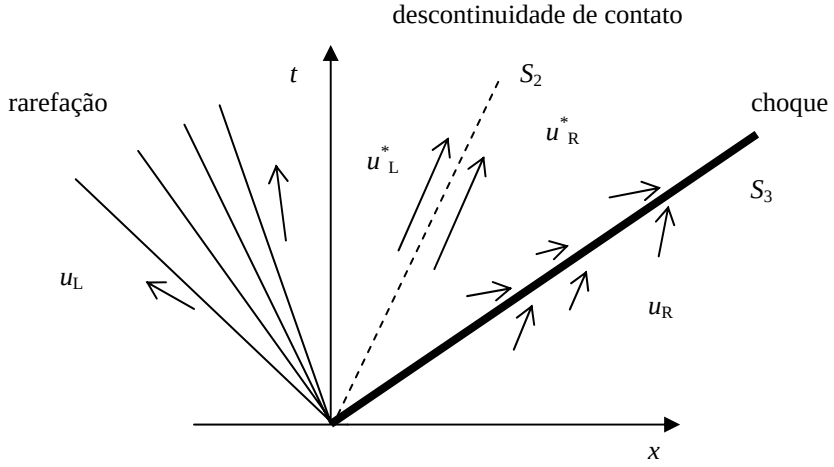


Figura 3.6 – Estrutura ondulatória da solução de um problema de Riemann para as equações de Euler.

Para a onda de rarefação, $\lambda^1(\underline{u}_L)\leq \lambda^1(\underline{u}^*_L)$, para a onda de choque $\lambda^3(\underline{u}^*_R)>S^3>\lambda^3(\underline{u}_R)$, e para a descontinuidade de contato $\lambda^2(\underline{u}^*_L)=\lambda^2(\underline{u}^*_R)=S^2$.

Para a descontinuidade de contato nas equações de Euler, os invariantes de Riemann para o campo ondulatório fornecem as seguintes relações:

$$\frac{d(\rho)}{1}=\frac{d(\rho v)}{v}=\frac{d(E)}{v^2/2}\Rightarrow p=cte;v=cte \tag{3.30}$$

No entanto, a densidade e as variáveis dependentes dela têm descontinuidades cujos saltos não podem ser determinados trivialmente.

Para as ondas de rarefação associadas com os autovalores $\underline{R}^1$ e $\underline{R}^3$, os invariantes de Riemann são:

$$\begin{cases} \dfrac{d(\rho)}{1} = \dfrac{d(v)}{-c/\rho} = \dfrac{d(s)}{0} \rightarrow \text{através de } \lambda_1 \\ \dfrac{d(\rho)}{1} = \dfrac{d(v)}{c/\rho} = \dfrac{d(s)}{0} \rightarrow \text{através de } \lambda_3 \end{cases} \Rightarrow$$
$$\begin{cases} v + \displaystyle\int \frac{c}{\rho} d\rho = cte; s = cte \rightarrow \text{através de } \lambda_1 \\ v - \displaystyle\int \frac{c}{\rho} d\rho = cte; s = cte \rightarrow \text{através de } \lambda_3 \end{cases} \qquad (3.31)$$

Portanto, a condição de isentropia através das ondas 1 e 3 é obtida..

Para ondas de choque associadas com os autovalores $\underline{R}^1$ e $\underline{R}^3$, todas as variáveis (ρ, p e v) variam através da onda. Considerando a onda correspondente ao autovetor $\underline{R}^3$ e com face dirigida para direita, e viajando com velocidade constante S_3. Denotando-se o estado à direita da onda de u_R e o à esquerda de u_R^*, as condições de Rankine-Hugoniot são dadas por:

$$\begin{aligned} &\rho_*(u_R^* - S_3) = \rho_R(u_R - S_3) \\ &\rho_*(u_R^* - S_3)^2 + p_* = \rho_R(u_R - S_3)^2 + p_R \\ &(u_R^* - S_3)(E_* + p_*) = (u_R - S_3)(E_R + p_R) \end{aligned} \qquad (3.32)$$

As condições acima podem ser usadas para se obter todas as grandezas através da onda de choque. A mesma análise pode ser feita através do campo ondulatório correspondente a $\underline{R}^1$.

3.3 Discretização por Volume Finitos, Esquema de Godunov e *Solvers* de Riemann

3.3.1 – Introdução

O método dos Volumes Finitos tem sido bem sucedido na solução de sistemas hiperbólicos dados pelas equações de Euler na forma conservativa. O esquema mais popular é baseado na solução ***exata*** do problema de Riemann nas faces das células, conhecido como esquemas do tipo Godunov.

Algumas propriedades desses esquemas são bastante desejadas, por exemplo, a positividade da densidade e da pressão. No entanto, além de exigirem um alto custo computacional, a robustez fica prejudicada quando as integrais dos invariantes de Riemann não podem ser feitas analiticamente (Buffard *et al.*, 2000).

Naturalmente, seguiram-se propostas de esquemas que resolvam aproximadamente o problema de Riemann. O *solver* mais popular é o proposto por Roe (1983) que exige uma matriz jacobiana do fluxo diagonalizável e com autovalores reais. Esta propriedade deve ser satisfeita pela matriz jacobiana em um estado intermediário entre $\underline{U}_L$ e $\underline{U}_R$ cuja existência e unicidade não podem ser provadas. As propriedades que a matriz jacobiana deve satisfazer são:

(i) possuir *m* autovalores distintos e *m* autovetores linearmente independentes onde *m* é o número de variáveis do sistema;

(ii) ser consistente, ou seja, $\underline{\underline{\tilde{A}}}(\underline{u},\underline{u}) = \underline{\underline{A}}(\underline{u})$. O símbolo "~" indica valor calculado na condição intermediário, associado à interface;

(iii) ser conservativo através da descontinuidade $\underline{f}(\underline{u}_R) - \underline{f}(\underline{u}_L) = \underline{\underline{A}}(\underline{u}_L,\underline{u}_R)(\underline{u}_R - \underline{u}_L)$.

A terceira propriedade é a existência de uma linearização do fluxo entre os estados da célula à esquerda e à direita da face que seja consistente com a forma integral das leis de conservação. O esquema de Roe apresenta duas desvantagens quando comparado ao de Godunov. Em primeiro lugar, esse esquema apresenta uma violação da condição entrópica em certas regiões. Em segundo lugar, esse esquema não garante a

positividade da densidade e da pressão. Além disso, nem sempre é fácil e, em alguns casos até impossível, encontrar o estado intermediário que satisfaça a terceira condição.

Dentre esses casos, pode-se citar alguns modelos de turbulência, sistemas multifásicos e certas EdEs para gases reais. Esse é o motivo pelo qual foi citado, na introdução, que o método de Roe é de difícil generalização. Diversos autores têm proposto esquemas que não exijam a satisfação da terceira condição e serão discutidos oportunamente.

Uma vez definidos os valores intermediários, a solução do sistema pode ser obtida pela decomposição da jacobiana $\underline{\underline{\tilde{A}}}$ a partir de seus autovalores $\tilde{\lambda}_k$ e autovetores $\underline{\tilde{R}}_k$, pois o problema de Riemann foi linearizado. A solução geral do sistema é dada por:

$$\underline{F}_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[\underline{F}_j + \underline{F}_{j+1} - \frac{1}{\varepsilon}\sum_{k=1}^{m} | \tilde{\lambda}^k_{j+1/2} | \tilde{\alpha}^k_{j+1/2} \underline{\tilde{R}}^k_{j+1/2} \right] \tag{3.33}$$

onde m=dim($\underline{R}$), $\underline{F_j}$ e $\underline{F_{j+1}}$ são os fluxos calculados com os valores de $\underline{U}$ dos volumes j e j+1, e ε=Δt/Δx. Cada $\tilde{\alpha}^k_{j+1/2}$ é a intensidade da onda (*wave strength*) k na face j+1/2, que corresponde à componente k no sistema de coordenadas $\{ \underline{\tilde{R}}_k \}$ do vetor $\Delta\underline{U}$, e pode ser obtido por:

$$\Delta\underline{U} = \sum_k \tilde{\alpha}^k_{j+1/2} \underline{\tilde{R}}^k_{j+1/2} \tag{3.34}$$

Como discutido anteriormente, para um fluxo convexo e uma dada condição inicial descontínua tal que $u_L > u_R$, a descontinuidade irá dissipar-se, pois uma onda de rarefação ocorrerá. Esse tipo de onda é caracterizado pela monotonicidade estritamente crescente ou decrescente com gradientes finitos. O esquema de Roe produz, por vezes, uma solução na qual o gradiente previsto é um pouco menor que o correto até um dado ponto no qual uma descontinuidade aparece, seguida de uma nova região na qual o

gradiente menor que a solução correta é restabelecido. A Figura 3.7, apresenta um esquema desse tipo de desvio apresentado pelo método de Roe. Como visto anteriormente, essa solução não é aceitável pois viola a condição de entropia.

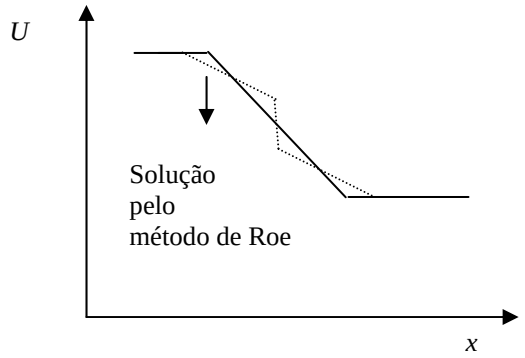


Figura 3.7 – Solução pelo método de Roe com violação entrópica.

Harten e Hyman (1983) propuseram um esquema de correção entrópica, conhecido como correção Harten-Hyman. Supondo-se que uma onda de rarefação se propague para a esquerda, equivalente ao autovalor *u-a*, este autovalor irá mudar de sinal quando *u=a*, ou seja, é uma onda de rarefação transônica. Para uma dada face, em algum momento, o estado à esquerda será U_L e o estado à direita será um estado estrela à esquerda da descontinuidade de contato. No entanto, o esquema de Roe adotará um valor intermediário para o autovalor, tentando obter a solução do problema de Riemann entre esses estados (L e estrela) com um valor intermediário do autovalor que produz a descontinuidade na onda de rarefação. A correção consiste em dividir esse salto, entre os estados L e estrela, em dois novos saltos, um entre o estado à esquerda e um estado SL, e outro entre os estados SL e estrela. Desta forma, dois estados intermediários são calculados, ao invés de usar um estado intermediário único. Um esquema da correção entrópica proposta por Harten e Hyman pode ser visto na Figura 3.8.

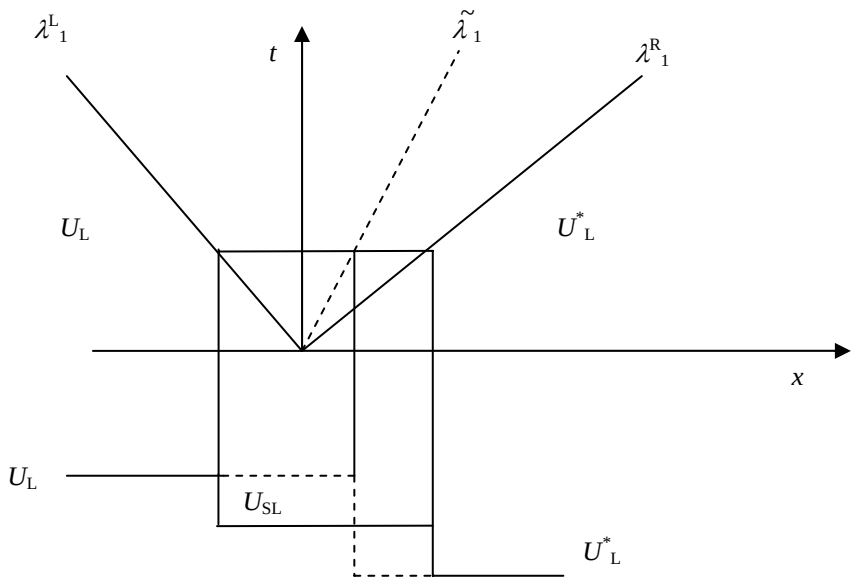


Figura 3.8 – Correção entrópica para uma onda de rarefação transônica. O salto U_{*L} - U_L, com velocidade $\tilde{\lambda}_1$ é dividido em dois saltos U_{*L} - U_{SL} e U_{SL} - U_L com velocidades λ^{R}_{1} e λ^{L}_{1}.

As expressões para o escoamento de gases ideais serão apresentadas oportunamente quando o esquema de Roe para solução deste tipo de escoamento for abordado.

Diversos procedimentos para solução exata do problema de Riemann foram propostos por: Godunov (1959), Collela e Glaz (1985), Glaister (1988), Grossman e Walters (1989), Liou *et al.* (1990), Vinokur e Montagné (1990), Abgrall (1991), Toumi (1992), Saurel *et al.* (1994), Cox e Cinnella (1994) e Mottura *et al.* (1997), Quartapelle *et al.* (2003). Posteriormente, alguns comentários serão feitos a respeito desses métodos quando alguns aspectos termodinâmicos da solução de um problema de Riemann serão abordados.

3.3.2 – Discretização por Volumes Finitos

O primeiro passo para a solução do sistema apresentado é a discretização por um método como o de Volumes Finitos, adotado no TITÃS, simulador criado neste trabalho. Os valores das variáveis são calculados no centro dos volumes e os fluxos nas faces. A malha de Volumes Finitos é definida por um conjunto de células, portanto, o domínio $\Im$ é dado por $\Im = \{C_j | j=1..N\}$. O esquema de uma malha pode ser vista na Figura 3.9.

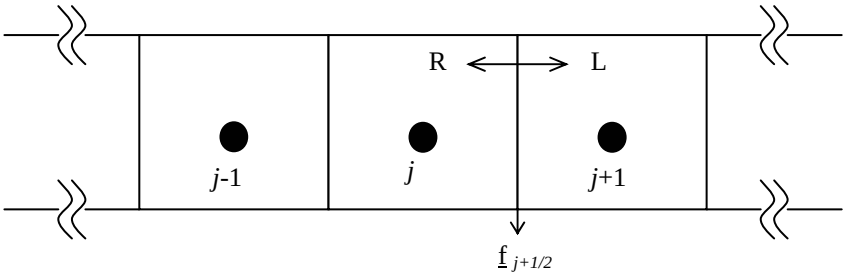


Figura 3.9 – Esquema de uma malha de Volumes Finitos.

onde R e L designam os valores de $\underline{u}_j$ à direita e de $\underline{u}_{j+1}$ à esquerda, respectivamente. A discretização das equações (sem termos fonte) pelo esquema θ no tempo, e Volumes Finitos, no espaço, fornece o seguinte sistema:

$$\begin{aligned} \underline{u}_j^{n+1} &= \underline{u}_j^n + \varepsilon\left[(1-\theta)\Delta\underline{F}_{j+1/2}^n + \theta\Delta\underline{F}_{j+1/2}^{n+1}\right] \\ \Delta\underline{F}_{j+1/2}^n &= \left[\underline{F}_{j+1/2}^n\left(\underline{u}_j^n, \underline{u}_{j+1}^n\right) - \underline{F}_{j-1/2}^n\left(\underline{u}_{j-1}^n, \underline{u}_j^n\right)\right] \end{aligned} \qquad (3.35)$$

onde $\theta = 0$ fornece o esquema Euler explícito, $\theta = 1/2$ fornece o esquema de Crack-Nicholson, $\theta = 2/3$ Petrov-Galerkin e $\theta = 1$ o de Euler implícito, $\varepsilon = \Delta t/\Delta x$ e $\underline{F}_{j+1/2}^n$ é o fluxo numérico calculado na interface $j+1/2$.

O método de Runge-Kutta de 4ª ordem é obtido pelos seguintes passos sucessivos:

$$
\begin{aligned}
&\underline{u}_j^1 = \underline{u}_j^n + \Delta t \Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^n), \underline{u}_j^2 = \underline{u}_j^n + \Delta t \Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^1) \\
&\underline{u}_j^3 = \underline{u}_j^n + \Delta t \Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^2), \underline{u}_j^4 = \underline{u}_j^n + \Delta t \Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^3) \\
&\Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j) = \underline{F}_{j+1/2}(\underline{u}_j) - \underline{F}_{j-1/2}(\underline{u}_j) \\
&\underline{u}_j^{n+1} = \underline{u}_j^n + \frac{1}{6}[\Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^n) + 2\Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^1) + 2\Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^2) + \Delta \underline{F}_j(\underline{u}_j^3)]
\end{aligned}
\tag{3.36}
$$

Este método está disponível no simulador Titãs, embora apenas os resultados para o Euler explícito sejam apresentados.

Um problema de Riemann é dado pela equação (3.6) com a seguinte condição inicial:

$$
\underline{u}(\bar{x},0) = \begin{cases} \underline{u}_L & \text{se } \bar{x} < 0 \\ \underline{u}_R & \text{se } \bar{x} > 0 \end{cases}
\tag{3.37}
$$

Pode-se, portanto, associar a solução do sistema em questão em um volume *j* a dois problemas de Riemann com $\underline{u}_L$ e $\underline{u}_R$ iguais aos valores à esquerda e à direita de cada uma das faces do volume *j*, faces *j*-1/2 e *j*+1/2. Para cálculo dos fluxos é necessário usar um *Riemann Solver* aproximado visto que não se sabe, a princípio, como calcular a jacobiana na face de uma célula.

3.3.3 – Esquema de Godunov e *Solver* de Roe

Seja o sistema hiperbólico dado por:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \frac{\partial \underline{f}(\underline{u})}{\partial x} = \underline{g}(\underline{u}) \\
&u(x,0) = u_0(x)
\end{aligned}
\tag{3.38}
$$

onde $\underline{f}(\underline{u})$ é o fluxo físico e $\underline{g}(\underline{u})$ o termo fonte. Esse sistema pode ser discretizado de acordo com a eq. (3.35).

A idéia proposta por Godunov (1959) é resolver o problema de Riemann com $\underline{u}_L = \underline{u}_j^n$ e $\underline{u}_R = \underline{u}_{j+1}^n$ na interface $x_{j+1/2}$. Este problema de Riemann é resolvido exatamente para obter-se $\underline{\tilde{u}}(\bar{x}/\Delta t; \underline{u}_{j+1}^n, \underline{u}_j^n)$, $\forall j$ onde $\bar{x} = x_{j+1/2} - x$ $\bar{x} = x - x_{j-1/2}$. Os valores $\underline{u}_j^{n+1}$ são então calculados por:

$$\underline{u}_j^{n+1} = \underline{u}_j^n - \varepsilon\left\{\underline{F}_{j+1/2}^n\left[\underline{\tilde{u}}\left(0; \underline{u}_j^n, \underline{u}_{j+1}^n\right)\right] - \underline{F}_{j-1/2}^n\left[\underline{\tilde{u}}\left(0; \underline{u}_{j-1}^n, \underline{u}_j^n\right)\right]\right\} \tag{3.39}$$

No entanto, como afirmado anteriormente, esse processo exige um grande esforço computacional quando comparado a outros métodos. Sendo assim, um *solver* aproximado deverá ser usado.

O *solver* aproximado de Roe aplicado ao sistema dado pela eq. (3.35) fornece a seguinte expressão geral para o fluxo:

$$\underline{F}_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[\underline{F}_j + \underline{F}_{j+1} - \frac{1}{\varepsilon}\sum_{k=1}^{m} \tilde{\beta}_{j+1/2}^k \underline{\tilde{R}}_{j+1/2}^k\right] \tag{3.40}$$

onde $\underline{\tilde{R}}^k$ são os autovetores de $\underline{\underline{\tilde{A}}}(\underline{u}_L, \underline{u}_R)$, m=dim($\underline{R}$), $\underline{F}_j$ e $\underline{F}_{j+1}$ são os fluxos calculados com os valores de $\underline{u}$ dos volumes j e j+1.

O esquema de Roe indica que a matriz jacobiana e seus autovetores e autovalores devem ser calculados para uma determinada face com valores médios entre os volumes aos quais a face pertence. Existem diversas formas de se obter esses valores médios. Roe propôs a definição de um vetor de parâmetros de Roe, $\underline{Q}$, tal que tanto a solução quanto o fluxo sejam funções determináveis, ou seja, $\underline{U}=\underline{U}(\underline{Q})$ e $\underline{F}=\underline{F}(\underline{Q})$, ou ainda, $\Delta\underline{U}=\Delta\underline{U}(\Delta\underline{Q})$ e $\Delta\underline{F}=\Delta\underline{F}(\Delta\underline{Q})$. Se $\Delta\underline{U} = \underline{\underline{\tilde{B}}}\Delta\underline{Q}$ e $\Delta\underline{F} = \underline{\underline{\tilde{C}}}\Delta\underline{Q}$ onde $\underline{\underline{\tilde{B}}} = \underline{\underline{\tilde{B}}}(\underline{\tilde{Q}})$ e $\underline{\underline{\tilde{C}}} = \underline{\underline{\tilde{C}}}(\underline{\tilde{Q}})$ então $\Delta\underline{F} = \underline{\underline{\tilde{C}}}\,\underline{\underline{\tilde{B}}}^{-1}\Delta\underline{U} \Rightarrow \underline{\underline{\tilde{A}}} = \underline{\underline{\tilde{C}}}\,\underline{\underline{\tilde{B}}}^{-1}$.

O limitador de fluxo adotado fornecerá a expressão de $\tilde{\beta}$. Os esquemas mais conhecidos são apresentados na Tabela 3.1. Cada $\tilde{\alpha}_{j+1/2}^k$ é a intensidade da onda (*wave*

strength) k na face j+1/2, que corresponde à componente k no sistema de coordenadas $\{\underline{\tilde{R}}_k\}$ do vetor $\Delta\underline{U}$, onde $\underline{\tilde{R}}_k$ é o autovetor k da matriz jacobiana correspondente ao autovalor $\tilde{\lambda}_k$, e pode ser obtido por:

$$\Delta_{j+1/2}\underline{u} \equiv \underline{u}_{j+1} - \underline{u}_j = \sum_k \tilde{\alpha}^k_{j+1/2}\underline{\tilde{R}}^k_{j+1/2} \tag{3.41}$$

Tabela 3.1 – Expressões de $\tilde{\beta}$ de acordo com o Esquema TVD.

Autor	β	Ordem
Harten ULT1	$\tilde{\beta}^k_{j+1/2} = Q_v(\tilde{\lambda}^k_{j+1/2} + \tilde{\gamma}^k_{j+1/2})\tilde{\alpha}^k_{j+1/2} - (\tilde{g}^k_j + \tilde{g}^k_{j+1})$	2ª
Lax-Wendroff	$\tilde{\beta}^k_{j+1/2} = (\tilde{\lambda}^k_{j+1/2})^2\tilde{\alpha}^k_{j+1/2}$	1ª
Roe original	$\tilde{\beta}^k_{j+1/2} = \lvert\tilde{\lambda}^k_{j+1/2}\rvert\tilde{\alpha}^k_{j+1/2}$	1ª

Na Tabela 3.1, Q_v é uma função chamada de coeficiente de viscosidade que define a quantidade de difusão numérica adicionada. Harten (1983) define esta função como uma pequena perturbação em torno da função valor absoluto definida como $Q_v(x)=|x|$, para $|x|\geq 2\zeta$, e $Q_v(x)=(x^2/4\zeta)+\zeta$, caso contrário, onde ζ é um número positivo e pequeno. No limitador de Harten os termos restantes são:

$$\begin{aligned}
\tilde{g}^k_j &= S^k_{j+1/2}\max[0, \min(|\tilde{g}^k_{j+1/2}|, \tilde{g}^k_{j-1/2}S^k_{j-1/2})] \\
S^k_{j+1/2} &= \text{sign}(\tilde{g}^k_{j+1/2}) \\
\tilde{g}^k_{j+1/2} &= 0{,}5[Q_v(\tilde{\lambda}^k_{j+1/2}) - (\tilde{\lambda}^k_{j+1/2})^2]\tilde{\alpha}^k_{j+1/2} \\
\tilde{\gamma}^k_{j+1/2} &= \begin{cases} (\tilde{g}^k_{j+1} - \tilde{g}^k_j)/\tilde{\alpha}^k_{j+1/2}, & \tilde{\alpha}^k_{j+1/2} \neq 0 \\ 0 \end{cases}
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Como discutido anteriormente, o esquema de Roe apresenta dificuldades na solução do campo ondulatório quando ondas de rarefação estão presentes. A correção entrópica de Harten-Hyman (Harten e Hymann, 1983) para as equações de Euler consiste na obtenção de um novo valor para os autovalores extremos que podem corresponder a ondas de rarefação transônicas. Primeiramente, deve-se verificar se $\lambda_L<0<\lambda_R$ para as ondas extremas (correspondentes ao menor e ao maior autovalores, k =

1 e *m*) com o objetivo de verificar se alguma dessas ondas é de rarefação transônica. Caso uma determinada onda *k* seja de rarefação transônica, as seguintes expressões para o fluxo devem ser adotadas:

$$\begin{aligned} \underline{F}_{j+1/2} &= \underline{F}_L + \bar{\lambda}_k \tilde{\alpha}_k \underline{\tilde{R}}_k \\ \bar{\lambda}_k &= \bar{\lambda}_k^{L,R} \left(\frac{\bar{\lambda}_k^{R,L} - \tilde{\lambda}_k}{\bar{\lambda}_k^{R} - \bar{\lambda}_k^{L}} \right) \end{aligned} \tag{3.43}$$

Para o cálculo dos autovalores à esquerda e à direita, necessita-se da estimativa do estado estrela, pois, como mostrado anteriormente, um dos estados à direita ou à esquerda (dependendo de qual onda é de rarefação transônica) não corresponderá ao valor inicial nestes estados, e sim a um estado estrela (Figura 3.8). As estimativas dos estados estrela à esquerda e à direita para as equações de Euler correspondentes ao escoamento compressível não isotérmico podem ser obtidas por:

$$\begin{aligned} \underline{U}_{*L} &= \underline{U}_L + \tilde{\alpha}_1 \underline{\tilde{R}}_1 \\ \underline{U}_{*R} &= \underline{U}_R - \tilde{\alpha}_3 \underline{\tilde{R}}_3 \end{aligned} \tag{3.44}$$

Com esses valores, os autovalores $\bar{\lambda}_k^R(\underline{U}_R, \underline{U}_{*R})$ e $\bar{\lambda}_k^L(\underline{U}_L, \underline{U}_{*L})$ podem ser calculados, e finalmente, o autovalor médio da correção Harten-Hyman pode ser utilizado no cálculo do fluxo.

O método de VFRoe utiliza um estado intermediário diferente ao de Roe, com a desvantagem de possivelmente ocorrer perda do caráter conservativo do método. No entanto, Buffard *et al.* (2000) provaram sua acurácia na solução do escoamento de gases ideais e reais, além de sistemas multifásicos. O estado intermediário adotado foi a simples média aritmética dos valores à esquerda e direita da interface. Os demais passos são os mesmos do método de Roe.

3.3.4 – Esquema MUSCL para aumento de ordem

A técnica de Reconstrução de Dados (*data reconstruction*) pode estender um método de primeira ordem, como o limitador de Roe, a ordem superiores. Como foi visto, o limitador de Roe permite o cálculo do fluxo $F_{j+1/2}$ em função dos valores de $\underline{U}_j$ e $\underline{U}_{j+1}$ que na realidade representam os valores à esquerda e à direita da face j+1/2. A Reconstrução de Dados consiste em utilizar outros volumes além dos j e j+1 para calcular os valores de $\underline{U}$ à esquerda e à direita da face j+1/2. Dentre os diversos esquemas, o mais conhecido e que foi implementado no TITÃS é o MUSCL-Hancock (*Monotone Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws*) proposto por Van Leer (1977, 1979 e 1985).

O número de publicações utilizando e propondo modificações para este método é muito extenso e por isso apenas aquelas de interesse particular serão citadas. O algoritmo resultante será apresentado, devendo o livro de Toro (1999) e as referências originais (Van Leer, 1977, 1979 e 1985) serem consultadas a fim de se obter maiores detalhes a respeito da gênese do método. A idéia básica da reconstrução de dados pode ser observada na figura a seguir.

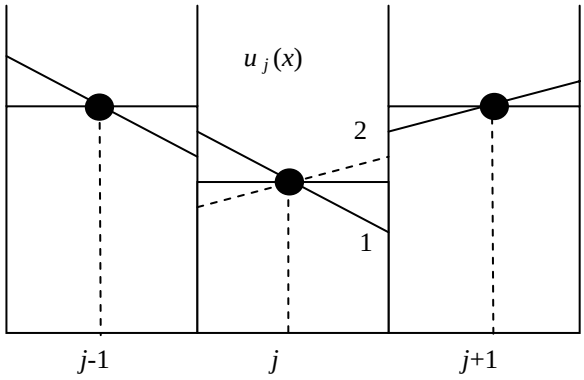


Figura 3.10 – Esquema de reconstrução do MUSCL.

A princípio, os valores à direita da face j-1/2 e à esquerda da face j+1/2 seriam obtidos pela linha horizontal correspondente ao valor u_j. No entanto, pode-se supor que o valor de u_j varia linearmente, passando pelo valor central e com inclinação a ser obtida em função dos volumes adjacentes, e a ordem será determinada pelo número de células

adjacentes consideradas. Isso é realizado para as células à esquerda e à direita, correspondendo às linhas 1 e 2, respectivamente. O mesmo procedimento é utilizado com u_{j+1}. A seguir o método MUSCL-Hacock será apresentado sucintamente.

A primeira etapa do método é chamada de reconstrução dos dados e consiste em modificar-se os valores de $\underline{U}$ segundo as equações:

$$\begin{aligned} \underline{U}_j^L &= \underline{u}_j^n - \underline{\Delta}_j / 2 \\ \underline{U}_j^R &= \underline{u}_j^n + \underline{\Delta}_j / 2 \end{aligned} \tag{3.45}$$

O segundo passo é chamado de evolução, consistindo da integração temporal destes valores no intervalo $\Delta t/2$ dado pelas equações:

$$\begin{aligned} \overline{\underline{U}}_j^L &= \underline{U}_j^L + \frac{\varepsilon}{2}\left[F(\underline{U}_j^L) - F(\underline{U}_j^R)\right] \\ \overline{\underline{U}}_j^R &= \underline{U}_j^R + \frac{\varepsilon}{2}\left[F(\underline{U}_j^L) - F(\underline{U}_j^R)\right] \end{aligned} \tag{3.46}$$

Em seguida, o fluxo em cada face é calculado através da solução do problema de Riemann por um método qualquer como o de Roe, utilizando para cada face j+1/2, os valores $\overline{\underline{U}}_j^R$ e $\overline{\underline{U}}_{j+1}^L$ como valores à esquerda e direita da face, respectivamente. Finalmente, o valores de $\underline{u}_j^{n+1}$ são calculados pela equação (3.35) com $\theta = 0$.

A versão TVD do esquema pode ser obtida através da expressão utilizada para o cálculo de $\underline{\Delta}_j$. A expressão geral é dada por:

$$\begin{aligned} &\underline{\Delta}_j = \begin{cases} \max[0, \min(\Gamma\underline{\Delta}_{j-1/2}, \underline{\Delta}_{j+1/2}), \min(\underline{\Delta}_{j-1/2}, \Gamma\underline{\Delta}_{j+1/2})] \rightarrow \underline{\Delta}_{j+1/2} > 0 \\ \min[0, \max(\Gamma\underline{\Delta}_{j-1/2}, \underline{\Delta}_{j+1/2}), \max(\underline{\Delta}_{j-1/2}, \Gamma\underline{\Delta}_{j+1/2})] \rightarrow \underline{\Delta}_{j+1/2} < 0 \end{cases} \\ &\underline{\Delta}_{j-1/2} = \underline{u}_j - \underline{u}_{j-1}, \quad \underline{\Delta}_{j+1/2} = \underline{u}_{j+1} - \underline{u}_j \end{aligned} \tag{3.47}$$

Onde Γ=1 e Γ=2 implicam nos limitadores MINMOD (MINBEE) e SUPERBEE, respectivamente. Deve-se ressaltar que o esquema de MUSCL-Hancock é de segunda ordem no espaço embora a técnica MUSCL possa ser utilizada para atingir ordens superiores.

3.4 Aplicação ao escoamento monofásico de gases ideais

As Equações de Euler para o escoamento transiente de gás a uma dimensão para sistemas não isotérmicos é descrito pelas eqs. (3.24) e (3.25). Com a finalidade de incluir termos fontes de momento e energia deve-se alterar o vetor de termos fontes para:

$$\underline{g}(\underline{u}) = [0, \tau, \dot{Q}]^t \tag{3.48}$$

onde p é a pressão, v a velocidade, ρ é a densidade e E a energia total por unidade de volume. Para o caso isotérmico basta extrair-se a terceira equação. Supõem-se que não há entrada de massa pela parede do duto no trecho analisado. O termo de geração na equação da conservação de momento deve-se ao atrito e perdas viscosas, além de possíveis contrações no duto. Para um trecho sem contrações, esse termo é dado por:

$$\tau = \frac{f_{at} \rho v^2}{2D} \tag{3.49}$$

onde f_{at} é o fator de atrito de Moody que, no caso monofásico, é dado pela correlação de Churchill (1977), D é o diâmetro e $\dot{Q}$ é o termo de geração de energia total que inclui a difusão axial de calor, que para sistemas com altas velocidades pode ser desprezada.

A aplicação dos métodos baseados no problema de Riemann pode ser realizada a partir do cálculo exato ou numérico da matriz jacobiana. Este procedimento exige uma relação entre as variáveis que compõem o fluxo e as variáveis a serem resolvidas. Portanto, neste ponto, duas relações precisam ser adotadas para o fluido: uma equação de estado (EdE), sendo uma relação entre pressão, densidade e temperatura (possivelmente usando-se a velocidade do som no meio) e uma equação calórica, que relaciona a energia total com a pressão e a temperatura. Lembrando que $E = \rho v^2/2 + \rho e$, onde e é a energia interna e tendo-se a equação de estado, pode-se utilizar a seguinte relação:

$$de = \frac{C_v \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial p} \right)_T}{\left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial T} \right)_p} dp + \left[T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\bar{v}} - p \right] d\bar{v} \tag{3.50}$$

onde $\bar{v}$ é o volume específico. Outra grandeza física de interesse que pode ser substituída nas equações de estado é a velocidade do som no meio *c*, definida por:

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \bar{\rho}} \right)_{\bar{s}} = - \frac{\left(\frac{\partial h}{\partial \bar{\rho}} \right)_P}{\left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_{\bar{\rho}} - \frac{1}{\bar{\rho}}} = \frac{\gamma}{\bar{\rho}^2} \left(\frac{\partial T}{\partial \bar{v}} \right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\bar{v}} \tag{3.51}$$

A equação de conservação de momento é função da pressão que por sua vez não faz parte do vetor de variáveis $\underline{U}$. Sendo assim, para efetuar corretamente o cálculo da jacobiana, seus autovalores e autovetores, deve-se dar preferência às EdE's em que uma vez substituídas na equação acima, seja possível escrever a pressão como função das outras variáveis termodinâmicas. Alguns casos interessantes de tipos de fluido estão listados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Exemplos de tipos de fluidos ou escoamentos.

Caso	Equação Calórica	Equação de Estado
Gás ideal	$e = \dfrac{p}{(\gamma - 1)\rho}$	$p = \rho \Re T$
Escoamento Isentrópico	_____	$p = C\rho^{\gamma}$
Gás com covolume	$e = \dfrac{p(1 - b_{cv}\rho)}{(\gamma - 1)\rho}$	$p(1/\rho - b_{cv}) = \Re T$
Gás de Van der Waals	$e = c_v T - a_{vw}\rho + e_0$	$p = \dfrac{\rho \Re T}{1 - \rho b_{vw}} - a_{vw}\rho^2$
Gás de Redlich-Kwong	$h = h^0 + p\bar{v} - \Re T - \dfrac{3a_{RK}}{2b_{RK}\Re T^{1/2}} \ln\left(1 + \dfrac{b_{RK}}{\bar{v}}\right)$ $h^0 = \int_{T_{ref}}^{T} C_p(T)dT$	$p = \dfrac{\Re T}{\bar{v} - b_{RK}} - \dfrac{a_{RK}}{T^{1/2}\bar{v}(\bar{v} + b_{RK})}$

Na Tabela 3.2, $\gamma = c_p/c_v$ e C, a_{vw}, b_{vw}, a_{RK}, b_{RK} e $\Re$ são constantes que dependem do fluido em questão, e h^0 é a entalpia na temperatura de referência. Uma vez definida a relação entre a energia total e a pressão, pode-se calcular a jacobiana substituindo-se a pressão pela relação adotada. O caso de escoamento isentrópico é uma exceção pois a pressão é substituída por uma relação com a densidade. A matriz jacobiana para esse caso, é dada pela equação a seguir, onde foi adicionada a hipótese de escoamento isotérmico.

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ v^2 + C\gamma\rho^{\gamma-1} & 2v \end{bmatrix} \tag{3.52}$$

A matriz jacobiana para o caso isotérmico de gás ideal é dada por:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ v^2 - c^2 & 2v \end{bmatrix} \tag{3.53}$$

E seus autovalores e autovetores:

$$\underline{R}^1 = \begin{bmatrix} 1 \\ v-c \end{bmatrix}, \underline{R}^2 = \begin{bmatrix} 1 \\ v+c \end{bmatrix} \qquad \lambda^1 = v-c, \lambda^2 = v+c \tag{3.54}$$

Para o sistema não isotérmico e EdE de gás ideal a matriz jacobiana é dada por:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2}(\gamma-3)v^2 & (3-\gamma)v & (\gamma-1) \\ -\gamma\frac{vE}{\rho} + (\gamma-1)v^3 & \gamma\frac{E}{\rho} - \frac{3}{2}(\gamma-1)v^2 & \gamma v \end{bmatrix} \tag{3.55}$$

A mesma matriz em função da velocidade do som no meio é dada por:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2}(\gamma-3)v^2 & (3-\gamma)v & (\gamma-1) \\ \frac{1}{2}(\gamma-2)v^3 - \frac{c^2 v}{\gamma-1} & \frac{3-2\gamma}{2}v^2 + \frac{c^2}{\gamma-1} & \gamma v \end{bmatrix} \tag{3.56}$$

Usando-se a entalpia específica total $H=(E+p)/\rho=v^2/2+h$ onde $h=e+p/\rho$ é a entalpia específica, obtêm-se:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2}(\gamma-3)v^2 & (3-\gamma)v & (\gamma-1) \\ v[\frac{1}{2}(\gamma-1)v^2 - H] & H-(\gamma-1)v^2 & \gamma v \end{bmatrix} \tag{3.57}$$

E usando-se tanto a velocidade do som no meio quanto a entalpia específica total por unidade de volume:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ (\gamma-1)H - v^2 - c^2 & (3-\gamma)v & (\gamma-1) \\ \frac{1}{2}v[(\gamma-3)H - c^2] & H-(\gamma-1)v^2 & \gamma v \end{bmatrix} \tag{3.58}$$

E seus autovalores e autovetores:

$$\underline{R}^1 = \begin{bmatrix} 1 \\ v-c \\ H-vc \end{bmatrix}, \underline{R}^2 = \begin{bmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2}v^2 \end{bmatrix}, \underline{R}^3 = \begin{bmatrix} 1 \\ v+c \\ H+vc \end{bmatrix} \tag{3.59}$$
$$\lambda^1 = v-c, \lambda^2 = v, \lambda^3 = v+c$$

onde $c = \sqrt{\gamma p/\rho}$ é a velocidade do som no meio.

No TITÃS foi adotado o esquema de Roe com a disponibilidade de dois esquemas para o cálculo do fluxo. O primeiro deles é uma alteração do esquema original de Roe (1983) chamada de Roe-Pike (1984) e explicada a seguir. Este esquema é de primeira ordem. O segundo é o esquema de Harten (1983), que é de segunda ordem. Além disso, a técnica de reconstrução de dados MUSCL foi aplicada no limitador de Roe, elevando-o a segunda ordem.

Para o escoamento isotérmico o vetor de parâmetros de Roe, $\underline{Q}$, é dado por $[\rho^{1/2}, v\rho^{1/2}]^t$ e:

$$\underline{\tilde{Q}} = [\tilde{q}_1, \tilde{q}_2]^t = 1/2(\underline{Q}_R + \underline{Q}_L) = 1/2[\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}, v_L\sqrt{\rho_L} + v_R\sqrt{\rho_R}]$$
$$\underline{\underline{\tilde{B}}} = \begin{bmatrix} 2\tilde{q}_1 & 0 \\ \tilde{q}_2 & \tilde{q}_1 \end{bmatrix}, \ \underline{\underline{\tilde{C}}} = \begin{bmatrix} \tilde{q}_2 & \tilde{q}_1 \\ 2c^2\tilde{q}_1 & 2\tilde{q}_2^2 \end{bmatrix}, \ \underline{\underline{\tilde{A}}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ c^2 - \tilde{v}^2 & 2\tilde{v} \end{bmatrix} \tag{3.60}$$

onde a velocidade média é dada por:

$$\tilde{v} = \left(v^R \sqrt{\rho^R} + v^L \sqrt{\rho^L}\right) \Big/ \left(\sqrt{\rho^R} + \sqrt{\rho^L}\right) \tag{3.61}$$

O mesmo procedimento de cálculos das matrizes de Roe acima pode ser realizado para outros casos. Para EdE de gás ideal e escoamento não isotérmico, a entalpia média pode ser obtida por:

$$\tilde{H} = \left(H^R \sqrt{\rho^R} + H^L \sqrt{\rho^L}\right) \Big/ \left(\sqrt{\rho^R} + \sqrt{\rho^L}\right) \tag{3.62}$$

Uma vez definidos os valores no estado intermediário a solução do sistema pode ser obtido pela decomposição da jacobiana, eq. (3.60), a partir de seus autovalores e autovetores.

Existe uma alternativa na qual é adotado um valor intermediário que não satisfaz as condições de Roe, ou seja, o vetor de parâmetros de Roe não é obtido. Para o caso de gás ideal o procedimento apresentado para o método de Roe será o mesmo para o método de Roe-Pike, exceto pela adoção de um valor intermediário também para a densidade. Esta expressão é dada por:

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho^R \rho^L} \tag{3.63}$$

As demais variáveis no estado intermediário são calculadas como no método de Roe original.

3.5 Aplicação ao escoamento monofásico de gases reais

O escoamento de gases em condições não ideais é de suma importância em diversos problemas de engenharia incluindo desde o acompanhamento de transientes de pressão em gasodutos até a reentrada de espaçonaves na atmosfera terrestre.

Nas últimas décadas, os Riemann *Solvers* têm sido utilizados com sucesso na solução de problemas de escoamentos compressíveis, principalmente por sua capacidade de representar de forma fidedigna descontinuidades provenientes de ondas de choque quando os esquemas do tipo Godunov com formulações TVD são utilizados.

Como discutido anteriormente, a obtenção de um algoritmo robusto e preciso para solução de problemas de escoamento de gases reais não é trivial, visto que a solução do problema de Riemann exige a solução de equações extremamente não lineares em função da EdE utilizada.

Saurel *et al.* (1994) apresentaram um algoritmo para solução exata e um para solução aproximada do problema de Riemann usando as equações de estado de Van der Waals e Virial de quinta ordem. Toro (1999) apresentou a solução analítica para a equação de covolume, que constitui uma EdE simples pouco superior à equação de gases ideais. Buffard *et al.* (2000) resolveram problemas de escoamento compressível de gases reais (EdE de Van der Waals) utilizando o método VFRoe, e que vem sendo desenvolvido constantemente pelos pesquisadores franceses (Faille e Heintzé, 1999 e Buffard *et al.*, 2000).

No que diz respeito ao *solver* aproximado de Roe, o principal desafio está na obtenção do estado intermediário no qual a matriz jacobiana do fluxo será calculada, pois esse estado não é único quando uma EdE de gases reais é utilizada. Na literatura existem algumas linhas de pesquisa diferentes sobre a obtenção do estado intermediário. Uma delas (Glaister, 1988; Grossman e Walters, 1989; Liou *et al.*, 1990; Vinokur e Montagné, 1990; Abgrall, 1991; Cox e Cinnella, 1994) consiste em considerar as derivadas parciais da pressão como variáveis adicionais, gerando o grau de liberdade necessário para obtenção de um estado único. No entanto, como reportando por Toumi

(1992) e Guardone e Vigevano (2002), essas derivadas são variáveis artificiais e poderão não corresponder a valores termodinamicamente consistentes ao serem utilizadas para o cálculo de outras variáveis, como a velocidade do som, podendo levar a perda da hiperbolicidade do sistema.

A matriz jacobiana do fluxo das equações de Euler para a dinâmica de gases generalizada é dada por:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{m^2}{\rho^2} + \Pi_\rho & \frac{2m}{\rho} + \Pi_m & \Pi_E \\ \frac{m}{\rho}\left(-\frac{E+\Pi}{\rho} + \Pi_\rho\right) & \frac{E+\Pi}{\rho} + \frac{m}{\rho}\Pi_m & \frac{m}{\rho}(1+\Pi_E) \end{bmatrix} \tag{3.64}$$

onde $\Pi = p(E^t\text{-}m^2/2\rho,\rho)$. Com as seguintes definições:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(e,\rho)}{\partial e} &= \Pi_E \\ \frac{\partial p(e,\rho)}{\partial \rho} &= \Pi_\rho - \frac{m^2}{2\rho^2}\Pi_E \\ \Pi_m &= -\frac{m}{\rho}\Pi_E \end{aligned} \tag{3.65}$$

Impondo-se a condição $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{F}(\underline{u}_R) - \underline{F}(\underline{u}_L)$, obtém-se um sistema de apenas duas equações, pois uma das linhas obtidas gera a equação degenerada $\Delta m=\Delta m$, onde os Δ's indicam as diferenças entre os valores à esquerda e à direita da face. As equações restantes são:

$$\begin{aligned} &\Delta\rho\frac{\tilde{m}}{\tilde{\rho}^2} - 2\Delta m\frac{\tilde{m}^2}{\tilde{\rho}^2} + \Delta\left(\frac{m}{\rho}\right) + \Delta p - \nabla\Pi\cdot\Delta\underline{u} = 0 \\ &-\Delta\rho\frac{\tilde{m}}{\tilde{\rho}}\frac{\tilde{E}+\tilde{\Pi}}{\tilde{\rho}} + \Delta m\frac{\tilde{E}+\tilde{\Pi}}{\tilde{\rho}} + \Delta(E)\frac{\tilde{m}}{\tilde{\rho}} + \frac{\tilde{m}}{\tilde{\rho}}\nabla\tilde{\Pi}\cdot\Delta\underline{u} = \Delta\left[\frac{m}{\rho}(\tilde{E}+\Pi)\right] \end{aligned} \tag{3.66}$$

Uma equação suplementar deve ser proposta a fim de igualar o número de equações ao de variáveis. Guardone e Vigevano (2002) propuseram:

$$\Delta p = \nabla \prod . \Delta \underline{u} \tag{3.67}$$

A solução do sistema fornece:

$$\tilde{v} = \frac{\sqrt{\rho_L} v_L + \sqrt{\rho_R} v_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \tilde{h} = \frac{\sqrt{\rho_L} h_L + \sqrt{\rho_R} h_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \tag{3.68}$$

e a densidade é obtida pela solução da equação a seguir que pode ser escrita pela seguinte forma mais adequada:

$$\begin{aligned} &\Delta\rho \frac{\partial p(\tilde{e}, \tilde{\rho})}{\partial \rho} + \Delta E \frac{\partial p(\tilde{e}, \tilde{\rho})}{\partial E} = \Delta p \\ &\tilde{e} = H - p(\tilde{e}, \tilde{\rho}) / \tilde{\rho} - \tilde{v}^2 / 2 \end{aligned} \tag{3.69}$$

3.5.1 – Gás de Van der Waals

Para a equação de Van der Waals, tem-se que:

$$p(E, \rho) = \delta_{vw} \frac{E + a_{vw}\rho^2}{1 - b_{vw}\rho} - a_{vw}\rho^2 \tag{3.70}$$

onde $\delta_{vw}=R/C_v$, sendo R a constante universal dos gases. A solução do sistema para a densidade é dada por:

$$
\begin{aligned}
& r^3 + Ar^2 + Br + C = 0 \\
& A = \frac{\rho_C}{6\,p_C}\frac{\Delta p}{\Delta \rho} - 3(2 + \delta_{vw}) \\
& B = \frac{\rho_C}{2\,p_C}\left[-(2+\delta)\frac{\Delta p}{\Delta \rho} + \delta_{vw}\left(\frac{\Delta E}{\Delta \rho} - \tilde{h} + \frac{\tilde{v}}{2}\right)\right] + 9(1 - \delta_{vw}^2) \\
& C = \frac{3\rho_C}{2\,p_C}(1+\delta_{vw})\left[\frac{\Delta p}{\Delta \rho} + \delta_{vw}\frac{\Delta E}{\Delta \rho}\right] \\
& r = \frac{\tilde{\rho}}{\rho_C} = 3 b_{vw}\tilde{\rho}
\end{aligned}
\tag{3.71}
$$

onde ρ_c é a densidade crítica, p_c é a pressão crítica δ_{vw} e b_{vw} são parâmetros da EdE
Caso $\Delta\rho$=0:

$$
r = 3 - 3\delta_{\mathrm{vw}}\frac{\Delta E}{\Delta p} \tag{3.72}
$$

Caso $\Delta\rho$=0 e Δp=0:

$$
\tilde{\rho} = \frac{\rho_R + \rho_L}{2} \tag{3.73}
$$

3.5.2 – Gás de Redlich-Kwong

Para a equação de Redlich-Kwong, a obtenção da jacobiana e dos respectivos autovalores e autovetores torna-se complexa. Sendo assim, apenas os métodos VFRoe, Híbridos Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff, AUSM+ e as extensões do VFRoe e do AUSM+ com a estratégia MUSCL foram utilizados para solução de problemas de choque envolvendo gases de Redlich-Kwong.

A EdE de Redlich-Kwong não permite uma forma explícita na temperatura, de forma que existe alguma dificuldade no cálculo das propriedades termodinâmicas que

precisam de derivadas da temperatura. Pode-se observar na Tabela 3.2 que a entalpia é função da temperatura que, neste caso, não pode ser eliminada a partir da EdE.

Sendo assim, após a integração de um passo de tempo novos valores de energia, velocidade e densidade são obtidos. Restam os cálculos da entalpia e da temperatura com estes novos valores. Este cálculo deverá ser realizado numericamente, a partir da solução da própria relação entre entalpia e energia, pressão e densidade ($h = e + p/\rho$), com h e p funções de T, juntamente com a EdE apresentadas na Tabela 3.2. Essa dificuldade também aparecerá em outras EdE's cúbicas, sendo necessária a solução de equações não lineares em várias rotinas para cálculo de propriedades termodinâmicas. É de suma importância usar ao menos um método de Newton-Raphson com derivadas analíticas para reduzir o tempo computacional. No capítulo de resultados, Capítulo 5, uma comparação será apresentada para um problema de choque utilizando-se as EdE's de Van der Waals e Redlich-Kwong.

3.5.3 – Aspectos termodinâmicos da solução do campo ondulatório

A solução do problema de Riemann para fluidos não ideais não é simples como no caso dos fluidos ideais, mesmo supondo-se o processo reversível (isentrópico). Os invariantes de Riemann devem ser integrados ao longo das curvas isentrópicas. Além disso, as condições de salto devem ser satisfeitas através das ondas de choque simultaneamente, tornando o processo de obtenção da solução exata do problema de Riemann de alto custo computacional.

Um método de Godunov foi apresentado por Saurel *et al.* (1994) e representa uma forma de solucionar analiticamente o problema de Riemann para um fluido geral. No entanto, a solução analítica é dispendiosa e um método de solução aproximado para o problema de Riemann também foi testado (no caso o RCM, *random choice method*). A solução analítica envolve a solução do ponto de interseção das curvas que representam as condições de salto e a curva isentrópica. Um exemplo de curva que representa a condição de salto é a igualdade de pressões através da descontinuidade de contato.

Além de Saurel *et al.* (1994), Collela e Glaz (1985) e Quartapelle *et al.* (2003) também propuseram algoritmos para solução exata do problema de Riemann para gases reais. Outra abordagem também foi proposta por Glaister (1988), Grossman e Walters (1989), Liou *et al.* (1990), Vinokur e Montagné (1990), Abgrall (1991), Toumi (1992), Cox e Cinnella (1994) e Mottura *et al.* (1997). Nesta metodologia, as derivadas termodinâmicas são incluídas como variáveis adicionais a serem obtidas no estado intermediário referentes às faces do volumes. No entanto, Toumi (1992) e Guardone e Vigevano (2002) chamaram a atenção para o fato de que as derivadas não manterão seus significados iniciais, o que poderia levar a inconsistências visto que são usadas para calcular outros variáveis como a velocidade do som.

Algumas ondas de comportamento não clássico próximas à região de saturação líquido-vapor podem ocorrer quando a derivada fundamental da dinâmica dos gases, equação (3.74), fica negativa (Guardone e Vigevano, 2002).

$$G(s,\bar{v}) = -\frac{\bar{v}}{2}\frac{\partial^2 p(s,\bar{v})}{\partial \bar{v}^{-2}} \Big/ \frac{\partial p(s,\bar{v})}{\partial \bar{v}} \tag{3.74}$$

Como $\partial p(s,\ \bar{v})/\partial \bar{v} < 0$ para a condição de estabilidade termodinâmica, o sinal negativo de G está associado às regiões do escoamento na qual as isentrópicas no plano ($\bar{v}$,p) não são convexas ($\partial^2 p(s,\bar{v})/\partial \bar{v}^{-2} < 0$). Nestas regiões, EdE´s como a politrópica não são válidas, pois são sempre convexas. Matematicamente, o sinal negativo de G acarreta na perda do caráter genuinamente não linear das ondas e pode levar à formação de ondas mistas ou negativas como descrito por Menikoff e Plohr (1989), e esse regime de escoamento é chamado de regime de gás denso (*dense gas regime*). Esse tipo de onda também pode ser observado independente do sinal de G quando ocorre mudança de fase.

Em escoamentos hipersônicos, típicos em reentrada na atmosfera de aeronaves, a maior parte da energia cinética é convertida em energia interna através das ondas de choque aumentando enormemente a temperatura, promovendo reações químicas que

alteram a composição da mistura e levando a condições de não equilíbrio térmico e químico. Geralmente, se adotam as hipóteses de equilíbrio de fases e equilíbrio químico em virtude da dificuldade em modelar e resolver problemas de irreversibilidade (Mottura *et al.*, 1997).

CAPÍTULO 4

SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS HIPERBÓLICAS: MÉTODOS DE SOLUÇÃO NÃO BASEADOS NO PROBLEMA DE RIEMANN

4.1 Métodos do tipo AUSM

4.1.1 – Introdução

Os métodos do tipo *flux difference splitting* (FDS) são modificações dos clássicos *upwind*, como o de Roe apresentado anteriormente. Estes métodos são acurados para todas as velocidades de escoamento mas exigem grande esforço computacional. Isto se deve ao cálculo constante da jacobiana em relação às variáveis conservativas e seus autovalores e autovetores para cada célula a cada passo de tempo. Riemann *solvers* exatos podem ser utilizados como o proposto por Godunov, porém, exige um processo iterativo a cada face e cada passo de tempo, sendo ineficiente em máquinas paralelas e para o uso de EdE para materiais reais. Os esquemas, como o de Roe visto anteriormente, são Riemann *solvers* aproximados e não garantem a positividade da pressão e densidade. Outra conseqüência da necessidade do cálculo da matriz jacobiana e do estado intermediário é a dificuldade ou impossibilidade de generalizações para sistemas cujo modelo matemático inclui muitos componentes químicos, multifásicos, turbulência, e outros fenômenos complexos. Esta classe de métodos foi adotada por Sainssaulieu (1995), Toumi e Kumbaro (1996), Tiselj e Petelin (1997), Fjelde e Karlsen (2002), Cortes *et al.* (1998), Romate (1998), Faille e Heintzé (1999), Saurel e Abgrall (1999).

Os métodos do tipo *flux vector splitting schemes* (FVS) são modificações dos métodos FDS e são baseados em cálculos escalares e não em matriciais. A ordem de grandeza de operações desses métodos é próxima à raiz quadrada deste mesmo número para os FDS. Sendo assim, os métodos FVS exigem um esforço computacional bastante

inferior aos FDS. No entanto, eles também apresentam difusão numérica elevada quando comparados aos FDS. O mais conhecido esquema FVS é o de Van Leer (1982)

Recentemente, um grande esforço tem sido feito com intuito de desenvolver métodos com a acurácia dos FDS e eficiência dos FVS. Estes métodos híbridos são chamados de *Advection Upstream Splitting Methods* (AUSM). O método AUSM original foi proposto por Liou e Steffen (1993) e usa a idéia de uma separação (*splitting*) do fluxo em duas partes: uma convectiva, discretizada pelo método *upwind* na direção do escoamento, e uma parte associada à pressão, discretizada pelo método *upwind* de acordo com as características acústicas. A direção do escoamento é determinada pelo sinal do número de Mach, considerando informações das células à esquerda e à direita de uma dada face. Esta abordagem permite a solução exata das descontinuidades de contato com uma reduzida difusão numérica mesmo para dicretizações de primeira ordem. No entanto, para choques oblíquos (não alinhados com a malha), o método AUSM original admite soluções não monotônicas para a pressão e densidade levando a dificuldades de convergência.

Posteriormente, Wada e Liou (1997) propuseram um método chamado de AUSMDV que mitiga o problema relacionado à monotonicidade, porém, introduz o efeito de *carbuncle*. Recentemente, Liou (1996) propôs uma modificação dos métodos anteriores chamada de AUSM+ que é capaz de resolver exatamente as descontinuidades de contato sem o problema relacionado à monotonicidade. Além disso, o método preserva a positividade de pressão, densidade e fração volumétrica.

Os problemas mais importantes na avaliação dos métodos numéricos são aqueles onde se observa uma região com ondas de choque onde os sinais dos autovalores mudam enquanto que um escoamento viscoso ocorre em outra região. Os métodos numéricos deverão reduzir a difusão numérica na região de choque e apresentar fluxos que tendam a zero quando $M \rightarrow 0$ de forma suave. *Splittings* como o de Van Leer (1982) apresentam fluxos que não são zero quando $M=0$, acarretando em grande difusão numérica, levando os efeitos viscosos a serem espalhados pelo domínio. Duas estratégias diferentes foram adotadas para resolver esse problema: (i) utilizar

polinômios de alta ordem; (ii) utilizar métodos FVS modificados. A primeira estratégia produz excelentes resultados para problemas 1D, mas apresenta resultados fisicamente inaceitáveis em problemas 2D. A segunda estratégia apresenta bons resultados para as regiões viscosas prevendo corretamente a espessura da camada limite, porém, apresenta falhas (saltos) próximas à borda da camada limite (Liou e Steffan, 1993). Assim, ambas as propostas mostraram-se ineficientes. O solver de Roe não apresenta esses problemas, porém, como mencionado, exige um número de operações da ordem O(n^2) onde n é o número de equações. Este histórico foi o responsável por levar Liou e Steffen (1993) a proporem um método que seja (i) acurado; (ii) simples requerendo O(n) operações e (iii) estável para uma vasta gama de problemas.

A aplicação de métodos baseados na densidade (*density-based solvers*), ou seja, que utilizam a densidade como variável aos escoamentos multifásicos não é simples quando o modelo de dois fluidos é adotado, pois este pode perder a hiperbolicidade, além de dificuldades associadas à presença de termos não-conservativos, termos fontes localizados, relações complexas na interface, aparecimento e desaparecimento de fases e mudança de fase. Estes métodos perdem acurácia para baixos valores do número de Mach. No caso dos métodos AUSM, ocorre um desacoplamento entre pressão e velocidade, sendo necessária alguma estratégia para acoplá-los (Liou e Edwards, 1999; Paillère, 2003 e Liou, 2006). O método AUSM+ foi utilizado em muitos trabalhos usando os modelos de mistura (Fjelde e Karlsen, 2002; Cortes *et al.*, 1998; Liou e Edwards, 1999 e Paillère *et al.*, 1999) e de dois fluidos (Niu, 2001; Evje e Flatten, 2003 e Paillère *et al.*, 2003). O método híbrido de Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff só foi aplicado para o modelo de dois fluidos não hiperbólico (ver condições no Cap. 2, seção 2.2.2.2) por De Vuyst (2004).

Outros métodos também foram utilizados para a solução de sistemas hiperbólicos em sistema multifásicos. Recentemente, Lorentzen e Fjelde (2005) aplicaram um limitador de inclinação (*slope limiter*) em uma formulação de elementos finitos preditor-corretor para o modelo de mistura. Wackers e Koren (2005) aplicaram um Riemann *solver* HLL para um novo modelo constituído de cinco equações. García-Cascales e Salvador (2006) aplicaram um método de alta resolução e um limitador de

inclinação ao modelo de dois fluidos. Guinot (2001a e b) aplicou o método de Godunov para um modelo simplificado para sistemas bifásicos. Castro e Toro (2006) compararam um Riemann *solver* com extensão à segunda ordem via MUSCL e o método ADER quando aplicados ao modelo de cinco equações de Saurel e Abgrall (1999). Bedjaoui e Sainsaulieu (1997) examinaram os efeitos dos parâmetros de relaxação e difusão no Método das Relaxações (desenvolvido por Liu, 1987), avaliando a estabilidade quando aplicados a um modelo de dois fluidos não hiperbólico mostrando que a estabilidade é dependente das condições iniciais.

4.1.2 - Apresentação dos métodos

Para o sistema hiperbólico representando o escoamento compressível e monofásico 1D, dado pelas eqs. (3.23) e (3.24). O fluxo pode ser dividido em duas partes nomeadas termo convectivo e termo de pressão (acústico).

$$\underline{F}(\underline{u}) = v\begin{pmatrix}\rho\\ \rho v\\ \rho h\end{pmatrix} + p\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix} \tag{4.1}$$

Desta forma, os termos convectivos podem ser considerados como escalares passivos "convectados" por uma velocidade adequada definida na face das células. Por outro lado, o termo de pressão é governado pela velocidade das ondas acústicas, podendo cada um ser discretizado de uma forma diferente. Assim, a parte convectiva do fluxo numérico é dada por:

$$\underline{F}_{j+1/2}^{AUSM(c)}(\underline{u}) = v_{j+1/2}\begin{pmatrix}\rho\\ \rho v\\ \rho h\end{pmatrix}_{L/R} = M_{j+1/2}\begin{pmatrix}\rho c\\ \rho c v\\ \rho c h\end{pmatrix}_{L/R} \tag{4.2}$$

onde *L/R* é igual a L se $M_{j+1/2} \geq 0$ e R, caso contrário. Esta proposta abre toda uma frente de trabalho baseada na velocidade de advecção $M_{j+1/2}$. A idéia do AUSM é representar essa velocidade como uma combinação das velocidades das ondas (que, em

termos do número de Mach, são iguais a M ± 1) que atravessam a interface j+1/2 provenientes das células à esquerda e à direita. Assim, define-se $M_{j+1/2}$ como:

$$M_{j+1/2} = M_L^+ + M_R^- \tag{4.3}$$

O "segredo" do sucesso das formulações propostas depende da definição dos números de Mach dos *splittings*. O método AUSM original (Liou e Steffen, 1993) adota os polinômios do método de Van Leer:

$$M^{\pm} = \begin{cases} \pm(M \pm 1)^2 / 4 & \text{se} \mid M \mid \leq 1 \\ (M \pm \mid M \mid)/2 & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.4}$$

O termo de pressão na face é dado por:

$$p_{j+1/2} = \wp_L^+ + \wp_R^- \tag{4.5}$$

Os polinômios de ponderação são novamente escolhidos como expansões da velocidade característica (M ± 1) de segunda ordem:

$$\wp^{\pm} = \begin{cases} p(M \pm 1)^2 (2 \mp M)/4 & \text{se} \mid \text{M} \mid \leq 1 \\ p/2(M \pm \mid M \mid)/M & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.6}$$

O fluxo nas faces pode ser escrito na seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \rho u \\ \rho vv \\ \rho vh \end{pmatrix}_{j+1/2} = \frac{M_{j+1/2}}{2}\left[\begin{pmatrix} \rho c \\ \rho cv \\ \rho ch \end{pmatrix}_L + \begin{pmatrix} \rho c \\ \rho cv \\ \rho ch \end{pmatrix}_R\right] - \frac{1}{2} \mid M_{j+1/2} \mid \Delta_{j+1/2} \begin{pmatrix} \rho c \\ \rho cv \\ \rho ch \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ p_{j+1/2} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

Onde $\Delta_{j+1/2}$ é o operador diferença entre os valores nos volumes j e j+1. O primeiro termo é uma média ponderada pelo número de Mach ao invés de uma simples média aritmética. O segundo termo é uma dissipação numérica do tipo *upwind* com um

coeficiente escalar que exige O(*n*) operações que, como dito, é diferente do esquema de Roe, no qual a matriz usada como coeficiente exige O(n^2) operações. Resumidamente, o método separa os termos de pressão e convecção, onde o primeiro tende para o valor *upstream* de acordo com uma velocidade na face definida apropriadamente, e o segundo é tratado estritamente usando ondas acústicas. Em seu primeiro trabalho, Liou e Steffen (1993) mostraram os resultados para vários problemas de choque 2D, para os quais o AUSM apresentou resultados equivalentes ou superiores aos apresentados pelo FDS de Roe. Quando o choque não é alinhado com a malha, o método de Roe apresenta o chamado "*carbuncle phenomena*". No entanto, atrás das ondas de choque alguma oscilação (*overshoot*) foi observada.

Posteriormente, Wada e Liou (1997) apresentaram uma modificação no método AUSM que mantinha as propriedades do AUSM original mas reduzia as oscilações observadas. Basicamente, as velocidades presentes no termo convectivo na eq. (4.2) podem ser representadas tanto em função da velocidade propriamente dita quanto do número de Mach. No entanto, outras possibilidades existem como definir um fluxo mássico interfacial $(\rho v)_{j+1/2}$. Esta é a idéia no novo método proposto por Wada e Liou (1997), chamado de AUSMDV, que apresenta uma série de melhorias em relação ao AUSM original. O maior problema do AUSM original são as oscilações atrás das ondas de choque. Wada e Liou (1997) observaram que isso se deve ao fato de que os fluxos definidos com a velocidade ou com *M* na interface não levam em consideração a densidade atrás do choque. Eles propuseram um método onde o fluxo mássico interfacial é dado por:

$$(\rho v)_{j+1/2} = u_L^+ \rho_L + u_R^- \rho_R \tag{4.8}$$

e as velocidades interfaciais são dadas por:

$$\begin{aligned} u_L^+ &= \alpha_L \left\{ (u+c)^2 / 4c \right\}_L + (1-\alpha_L)(u_L + |u_L|)/2 \\ u_R^- &= \alpha_R \left\{ -(u-c)^2 / 4c \right\}_R + (1-\alpha_R)(u_R - |u_R|)/2 \end{aligned} \tag{4.9}$$

onde os termos α são responsáveis pela ponderação entre os termos do lado direito associados às ondas e *upwind*. Essas funções são escolhidas de acordo com as propriedades desejadas, isto é, representar corretamente a descontinuidade de contato estacionária e reduzir as oscilações. Esta combinação foi chamada de AUSMD. No entanto, a redução das oscilações numéricas não foi muito efetiva. Sendo assim, um novo método foi proposto, AUSMV, que calcula o fluxo interfacial de quantidade de movimento por:

$$(\rho v^2)_{j+1/2} = u_L^+ (\rho v)_L + u_R^+ (\rho v)_R \tag{4.10}$$

Finalmente, uma proposta final chamada de AUSMDV foi adotada, formada por um hibridismo entre os métodos AUSMD e AUSMV. Os detalhes do método AUSMDV serão apresentados adiante. Os autores também incluíram uma modificação para resolver o problema de *carbuncle*, mas isso só é importante para problemas multidimensionais e foge ao escopo deste trabalho.

No entanto, o AUSMDV não possui a propriedade de capturar uma onda de choque estacionária. Na eq. (4.4), pode-se notar que $M^{\pm}$ leva a uma distribuição não simétrica dos sinais propagados pelas velocidades características $M \pm 1$ para $M \neq 0$, e $M_{j+1/2}$ tende a uma média quando o mesmo número tende a zero. Sendo assim, Liou (1996) propôs uma série de propriedades desejáveis para um formula de *splitting*:

(i) $M^+(M) + M^-(M) = M$, consistência

(ii) $M^+(M) \geq 0$ e $M^-(M) \leq 0$

(iii) $M^{\pm}$ são funções crescentes monotonicamente com M

(iv) $M^+(M) = -M^-(-M)$, simetria

(v) $M^+(M) = M$, se $M \geq 1$ e $M^-(M) = M$, se $M \leq -1$

(vi) $M^{\pm}$ são funções diferenciáveis para todo M

Os polinômios para a pressão devem ter as seguintes propriedades:

(i) $\wp^{+}(M) + \wp^{-}(M) = 1$, consistência

(ii) $\wp^{\pm} \geq 0$ para garantir pressão não negativa

(iii) $\partial\wp^{+}/\partial M \geq 0$ e $\partial\wp^{-}/\partial M \leq 0$

(vii) $\wp^{+}(M) = \wp^{-}(-M)$, simetria

(iv) $\wp^{+}(M) = 1$, se $M > 1$ e $\wp^{-}(M) = 1$, se $M < -1$

(v) $\wp^{\pm}$ são funções diferenciáveis para todo M

A seguir, a formulação completa para o método AUSM+ será apresentada na qual é possível observar a satisfação das propriedades apresentadas. O fluxo do AUSM+ pode ser calculado pela seguinte expressão, na qual as partes referentes à pressão e ao fluxo mássico são separadas:

$$\begin{aligned} &\underline{F}_{j+1/2}^{AUSM}(\underline{u}) = \dot{m}_{j+1/2}\underline{\Psi}_{j+1/2} + \underline{P}_{j+1/2} \\ &\underline{\Psi}_{j+1/2} = [1; v_{j+1/2}; H_{j+1/2}]^t;\ \underline{P}_{j+1/2} = [0; p_{j+1/2}; 0]^t \end{aligned} \tag{4.11}$$

onde a seguinte fórmula *upwind* baseada no sinal de $\dot{m}_{j+1/2}$ é usado para o cálculo de $\underline{\Psi}_{j+1/2}$:

$$\dot{m}_{j+1/2}\underline{\Psi}_{j+1/2} = 0{,}5\dot{m}_{j+1/2}\left[\underline{\Psi}(\underline{u}_L) + \underline{\Psi}(\underline{u}_R)\right] + 0{,}5\left|\dot{m}_{j+1/2}\right|\left[\underline{\Psi}(\underline{u}_L) - \underline{\Psi}(\underline{u}_R)\right] \tag{4.12}$$

O valor de $\dot{m}_{j+1/2}$ é obtido através dos seguintes passos:

(i) Cálculo do número de Mach nos lados esquerdo e direito da face usando a velocidade do som na interface. Liou (1996) fez uma discussão sobre critérios para determinação da velocidade do som interfacial. No entanto, a seguinte forma é a mais geral e aplicável a todas as EdEs:

$$c_{j+1/2} = \sqrt{c_L c_R}, \quad M_{L,R} = v_{L,R} / c_{j+1/2} \tag{4.13}$$

(ii) Então, a pressão na interface é obtida pela média entre os valores à esquerda e à direita:

$$p_{j+1/2} = \wp^{+}(M_L)\, p_L + \wp^{-}(M_R)\, p_R \tag{4.14}$$

(iii) O número de Mach na interface é calculado por polinômios através do número de Mach obtido no primeiro passo:

$$M_{j+1/2} = \mu^{+}(M_L) + \mu^{-}(M_R) \tag{4.15}$$

Finalmente, o fluxo mássico é dado por:

$$\dot{m}_{j+1/2} = 0{,}5 c_{j+1/2}[\rho_L(M_{j+1/2} + |M_{j+1/2}|) + \rho_R(M_{j+1/2} - |M_{j+1/2}|)] \tag{4.16}$$

Os polinômios originais do método AUSM+ são dados por:

$$M_1^{\pm}(M) = (M \pm |M|)/2 \tag{4.17}$$

$$M_2^{\pm}(M) = \begin{cases} M_1^{\pm}(M), & \text{se } |M| \geq 1 \\ \pm (M \pm 1)^2/4, & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.18}$$

$$\mu^{\pm}(M) = \begin{cases} M_1^{\pm}(M), & \text{se } |M| \geq 1 \\ M_2^{\pm}(M)\left[1 \mp 16 B M_2^{\mp}(M)\right], & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.19}$$

$$\wp^{\pm}(M) = \begin{cases} M_1^{\pm}(M)/M, & \text{se } |M| \geq 1 \\ \pm M_2^{\pm}(M)\left[2 \mp M - 16 A M M_2^{\mp}(M)\right], & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.20}$$

onde A = 3/16 e B = 1/8. A velocidade do som definida na eq. (4.13) é a chave para a acurácia do método AUSM, que não pode ser obtida por usando um *upwind* simples ($c_{j+1/2,k} = c_{j,k}$, for $\dot{m}_{j+1/2,k} \geq 0$, $c_{j+1/2,k} = c_{j+1,k}$, caso contrário).

Liou (1996) apresentou uma expressão correta para c na interface para a captura exata de um choque estacionário. Isto envolve uma expressão dependente da EdE. Neste trabalho isso foi evitado utilizando a eq. (4.13), como sugerido pelo autor, que não

garante a captura exata de ondas de choque estacionárias. Além disso, vale comentar que o primeiro termo do lado direito da eq. (4.12) não é uma simples média aritmética mas uma média ponderada pelo número de Mach e o coeficiente $\dot{m}_k^{j+1/2}$ é um mero escalar ao invés de uma matriz, reduzindo enormemente o tempo de CPU e mantendo o fluxo livre de cálculos de matrizes jacobianas.

O AUSMDV pode ser escrito de uma forma mais semelhante ao AUSM+ se substituirmos a eq. (4.16) por (Liou, 2000):

$$\dot{m}_{j+1/2} = c_{j+1/2}[\rho_L M^{+}_{j+1/2} + \rho_R M^{-}_{j+1/2})] \tag{4.21}$$

E adicionalmente:

$$M^{\pm}_{j+1/2} = w^{\pm}_{j+1/2}\mu^{\pm}(M^{L,R}) + (1 - w^{\pm}_{j+1/2})M_1^{\pm}(M^{L,R}) \tag{4.22}$$

onde:

$$w^{\pm}_{j+1/2} = \frac{2Y_{L,R}}{Y_L + Y_R} \tag{4.23}$$

Wada e Liou (1997) adotaram $Y = p/\rho$. Posteriormente, Liou (2000) sugeriu $Y = 1/\rho$ a fim de reduzir a instabilidade dos choques (*carbuncle phenomenon*).

A extensão dos métodos apresentados para sistemas multifásicos é apresentada a seguir.

4.1.3 – Métodos tipo AUSM para escoamento bifásico

O modelo de dois fluidos foi usado a seguir como exemplo do uso do AUSM para escoamento bifásico, sendo análoga a sua extensão para o modelo de mistura. Evje e Fjelde (2003) aplicaram o método AUSM para o modelo de mistura, e apenas o cálculo da velocidade do som interfacial apresentou uma diferença marcante em relação ao modelo de dois fluidos. Por esta razão, apenas esse cálculo será apresentado para o modelo de mistura.

O sistema de equações do modelo de dois fluidos, com área de seção constante e sem transporte de massa entre as fases, pode ser expresso na forma da equação (3.24) com as seguintes definições dos vetores:

$$\begin{aligned}
&\underline{u} = [\alpha_g \rho_g, \alpha_g \rho_g v_g, \alpha_l \rho_l, \alpha_l \rho_l v_l]^t, \\
&\underline{f}(\underline{u}) = [\alpha_g \rho_g v_g, \alpha_g (\rho_g {v_g}^2 + p_g), \alpha_l \rho_l v_l, \alpha_l (\rho_l {v_l}^2 + p_l)]^t \\
&\underline{g}(\underline{u}) = [0, p_g^i \partial \alpha_g / \partial x + F_g^D + \alpha_g \rho_g g_x, 0, p_l^i \partial \alpha_l / \partial x + \alpha_l \rho_l g_x + F_l^D]
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Definindo $\Delta p_k^i = p_k - p_k^i$ a seguinte transformação pode ser feita:

$$\frac{\partial (\alpha_k p_k)}{\partial x} - p_k^i \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\alpha_k \Delta p_k^i\right] + \alpha_k \frac{\partial p_k^i}{\partial x} \tag{4.25}$$

levando a seguinte forma do modelo de dois fluidos:

$$\begin{aligned}
&\underline{u} = [\alpha_g \rho_g, \alpha_g \rho_g v_g, \alpha_l \rho_l, \alpha_l \rho_l v_l]^t, \\
&\underline{f}(\underline{u}) = [\alpha_g \rho_g v_g, \alpha_g (\rho_g {v_g}^2 + \Delta p_g^i), \alpha_l \rho_l v_l, \alpha_l (\rho_l {v_l}^2 + \Delta p_l^i)]^t \\
&\underline{g}(\underline{u}) = [0, -\alpha_g \partial p_g^i / \partial x + F_g^D + \alpha_g \rho_g g_x, 0, -\alpha_l \partial p_l^i / \partial x + \alpha_l \rho_l g_x + F_l^D]
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Neste trabalho, as pressões no interior da fase e na interface são por hipótese iguais para ambas as fases, ou seja, $p = p_g = p_l$ e $p^i = p_g^i = p_l^i$.

As eqs. (4.11) a (4.16) são substituídas, respectivamente, por:

$$\begin{aligned}
&\underline{F}^{AUSM}_{k,j+1/2}(\underline{u}) = [\alpha_k \rho_k v_k ; \alpha_k (\rho_k v_k^2 + p_k)]^t = \dot{m}_{k,j+1/2}\underline{\Psi}_{k,j+1/2} + \underline{P}_{k,j+1/2} \\
&\underline{\Psi}_{k,j+1/2} = [1; v_{k,j+1/2}]^t ;\ \underline{P}_{k,j+1/2} = [0; \alpha_{k,j+1/2} p_{k,j+1/2}]^t \\
&\underline{F}^{AUSM}_{j+1/2}(\underline{u}) = [\underline{F}^{AUSM}_{g,j+1/2}; \underline{F}^{AUSM}_{l,j+1/2}]^t
\end{aligned} \tag{4.27}$$

onde o subscrito *k* indica a *k*-ésima fase (gás, *g*, ou líquido,*l*) e

$$\dot{m}_{k,j+1/2}\underline{\Psi}_{k,j+1/2} = \frac{\dot{m}_{k,j+1/2}}{2}\left[\underline{\Psi}_k(\underline{u}_k^L) + \underline{\Psi}_k(\underline{u}_k^R)\right] + \frac{\left|\dot{m}_{k,j+1/2}\right|}{2}\left[\underline{\Psi}_k(\underline{u}_k^L) - \underline{\Psi}_k(\underline{u}_k^R)\right] \tag{4.28}$$

$$c_{k,j+1/2} = \sqrt{c_k^L c_k^R}, \quad M_k^{L,R} = v_k^{L,R} / c_{k,j+1/2} \tag{4.29}$$

$$\alpha_{k,j+1/2} p_{k,j+1/2} = \wp^+(M_k^L)(\alpha p)_k^L + \wp^-(M_k^R)(\alpha p)_k^R \tag{4.30}$$

$$M_{k,j+1/2} = \mu^+(M_k^L) + \mu^-(M_k^R) \tag{4.31}$$

$$\dot{m}_{k,j+1/2} = 0{,}5 c_{k,j+1/2}\left[(\alpha\rho)_k^L (M_{k,j+1/2} + |M_{k,j+1/2}|) + (\alpha\rho)_k^R (M_{k,j+1/2} - |M_{k,j+1/2}|)\right] \tag{4.32}$$

Os polinômios são os mesmos apresentados anteriormente para sistemas monofásicos. O método AUSM+ sofre de desacoplamento par-ímpar para baixos valores do número de Mach, perdendo acurácia. Isso é particularmente importante em escoamento de líquidos onde a velocidade do som é cerca de três ordens de grandeza superior às velocidades encontradas. Portanto, apenas para escoamento de líquidos deve-se usar um procedimento especial para lidar com essas situações. Para resolver esse problema, um algoritmo limitador do número de Mach foi proposto por Paillère *et al.* (2003), e é dado por:

1- Adiciona-se um termo de difusão ao fluxo mássico da fase líquida, que passa a ser calculado por:

$$\tilde{\dot{m}}_{l,j+1/2} = \dot{m}_{l,j+1/2} + \dot{m}_p \tag{4.33}$$

onde $\dot{m}_{l,j+1/2}$ é calculado pela eq. (4.32) e $\dot{m}_p$ como será visto abaixo.

2- Redefine-se a velocidade do som numérica na interface, eq. (4.29), para:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{l,j+1/2} &= f_{j+1/2}\left(\frac{1}{2}\left[\frac{v_l^L}{c_l^L} + \frac{v_l^R}{c_l^R}\right]\right)\sqrt{c_l^L c_l^R}, \\ \tilde{M}_l^{L,R} &= v_l^{L,R} / \tilde{c}_{l,j+1/2} \\ f_{j+1/2}(M) &= \frac{\sqrt{(1-M_0^2)^2 M^2 + 4M_0^2}}{1+M_0^2} \end{aligned} \tag{4.34}$$

onde M_0 é um número de Mach limitante, digamos 10^{-4}.

3- Calcula-se $\tilde{M}^* = \mu^+(\tilde{M}_l^L) - M_1^+(\tilde{M}_l^L) - \mu^-(\tilde{M}_l^R) + M_1^+(\tilde{M}_l^R)$.

4- Calcula-se o termo de difusão com:

$$\dot{m}_p = \frac{1}{2}\tilde{c}_{l,j+1/2}\left(\frac{1}{M_0^2} - 1\right)\tilde{M}^* \frac{\alpha_l^L p_L - \alpha_l^R p_R}{(c_{l,j+1/2})^2} \tag{4.35}$$

Este termo adicionará a dissipação necessária para números de Mach reduzidos.

O esquema AUSMDV é novamente obtido pela substituição da eq. (4.32) por:

$$\dot{m}_{l,j+1/2} = c_{l,j+1/2}\left[(\alpha_k \rho_k)^L M_{k,j+1/2}^+ + (\alpha_k \rho_k)^R M_{k,j+1/2}^-)\right] \tag{4.36}$$

E adicionalmente:

$$M^{\pm}_{k,j+1/2} = w^{\pm}_{j+1/2}\mu^{\pm}(M^{L,R}_{k}) + (1 - w^{\pm}_{j+1/2})M^{\pm}_{1}(M^{L,R}_{k}) \tag{4.37}$$

onde:

$$w^{\pm}_{1/2} = \frac{2Y^{L,R}}{Y^{L} + Y^{R}} \tag{4.38}$$

Além das opções já citadas para sistemas monofásicos, Evje e Flatten (2003) adotaram $Y=\rho/\alpha$ para sistemas multifásicos. A comparação dessas funções é um dos aspectos analisados no presente trabalho.

A aplicação do método ao modelo de mistura é bastante similar. A única diferença marcante é que a velocidade do som na face não é mais calculada para ambas as fases. Como apenas uma equação de conservação de *momento* para a mistura está presente, apenas uma velocidade do som para a mistura deverá ser usada. As seguintes expressões adotadas por Evje e Fjelde (2003) foram adotadas:

$$c_m = \begin{cases} c_g \rightarrow \alpha_g > 0{,}999 \\ \bar{c} \rightarrow 0{,}001 < \alpha_g < 0{,}999 \\ c_l \rightarrow \alpha_g < 0{,}001 \end{cases} \tag{4.39}$$

E finalmente:

$$c_{j+1/2} = \max(c_{mL}, c_{mR}) \tag{4.40}$$

Os autores utilizaram uma equação para obtenção da velocidade do som média para a EdE adotada no artigo. O problema com essa opção é sua particularidade. Sendo assim, optou-se por utilizar a velocidade do som da mistura como:

$$c_m = \alpha_l c_l + \alpha_g c_g \tag{4.41}$$

4.2 Método híbrido de Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff

4.2.1 – Introdução

Seja o sistema hiperbólico representado pela eq. (3.24). Dentre as soluções possíveis, interessa aquela que é fisicamente consistente, ou seja, que possui um par entropia e seu fluxo, e na qual a desigualdade entrópica é satisfeita:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \geq 0 \tag{4.42}$$

onde S e ψ são respectivamente a entropia e seu fluxo.

Como visto anteriormente no Capítulo 3, pode-se resolver os invariantes de Riemann apenas para sistemas onde conhecemos a expressão para a entropia e seu fluxo visto que as integrais devem ser realizadas sobre a curva isentrópica. De fato, esquemas aproximados, como o de Roe, procuram obter um estado intermediário consistente com a desigualdade entrópica. No entanto, em qualquer uma das formas de solução do problema de Riemann já apresentadas, a entropia e seu fluxo são de alguma forma necessários. No entanto, em sistemas complexos uma expressão para a entropia e seu fluxo não são conhecidos. Este é o caso, por exemplo, do modelo de dois fluidos. Alguns métodos procuram obter soluções fisicamente relevantes sem o conhecimento das expressões para a entropia e seu fluxo.

4.2.2 – Descrição do método

De Vuyst (2004) propôs um método numérico híbrido para solução de sistemas hiperbólicos utilizando-se da combinação de fluxos numéricos de primeira e segunda ordem. O autor propôs a substituição da entropia por uma função convexa, aplicando à desigualdade entrópica a esta função. O método se propõe a satisfazer as seguintes características:

(i) não calcular o campo ondulatório e não utilizar nenhum tipo de *upwind*,

(ii) não calcular a jacobiana do fluxo,

(iii) ser facilmente generalizado (essa propriedade está ligada ao fato de não se usar a forma exata da entropia e seu fluxo, os quais seriam dependentes do modelo utilizado),

(iv) apresentar acurácia superior àquela apresentada pelos métodos de primeira ordem e

(v) o método ser estável na sua forma discretizada.

Essas condições são aparentemente difíceis de serem satisfeitas e poucos métodos satisfazem as condições (i) a (iii). Um exemplo é o método de Lax-Friedrichs modificado, cujo fluxo é dado por:

$$\underline{F}^{MLF}_{j+1/2}(\underline{u}_j, \underline{u}_{j+1}) = 0{,}5\left(\underline{f}_L + \underline{f}_R\right) - \frac{1}{4\varepsilon}\left(\underline{u}_{j+1} - \underline{u}_j\right) \tag{4.43}$$

Este fluxo depende apenas dos valores nas células e apresenta a propriedade TVD para equações escalares. No entanto, apresenta grande difusão numérica. O fluxo de Lax-Wendroff original é dado por:

$$\underline{F}^{LWo}_{j+1/2}(\underline{u}_j, \underline{u}_{j+1}) = 0{,}5\left(\underline{f}(\underline{u}_j) + \underline{f}(\underline{u}_{j+1})\right) - \frac{\varepsilon}{2}\underline{\underline{A}}(\underline{u}_j, \underline{u}_{j+1})\left[\underline{f}(\underline{u}_{j+1}) - \underline{f}(\underline{u}_j)\right] \tag{4.44}$$

Este fluxo, além de necessitar do cálculo da jacobiana, apresenta grandes oscilações numéricas. O fluxo de Lax-Wendroff pode ser representado com uma aproximação, na qual um parâmetro χ pode ser controlado de forma que este fluxo se aproxime o quanto se queira do fluxo original, e é dado por:

$$\underline{F}^{LW}_{j+1/2}(\underline{u}_j, \underline{u}_{j+1}, \chi) = 0{,}5\left(\underline{f}_L + \underline{f}_R\right) - \frac{\varepsilon}{2\chi}\left[\underline{f}\left(\overline{\varphi}(\underline{u}_j, \underline{u}_{j+1}) + \chi(\underline{f}_R - \underline{f}_L)\right) - \underline{f}\left(\overline{\varphi}(\underline{u}_j, \underline{u}_{j+1})\right)\right] \tag{4.45}$$

Onde $\underline{f}_L = \underline{f}(\underline{u}_j)$, $\underline{f}_R = \underline{f}(\underline{u}_{j+1})$ e $\overline{\varphi}$ é uma função que define uma média consistente, $\overline{\varphi}(\underline{u},\underline{u}) = \underline{u}$. Neste trabalho foram utilizados χ = -10^{-2} e $\overline{\varphi}(\underline{u},\underline{v}) = 0{,}5(\underline{u}+\underline{v})$. Desta forma, o cálculo da jacobiana é evitado.

As vantagens dos métodos de Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff sugerem a construção de um método híbrido contendo esses dois fluxos. A questão se reduz a definir, para um dado vetor de estado, quanto de cada fluxo será utilizado. A ponderação é calculada através do conceito, proposto pelo autor, de dissipação local por funções convexas, que difere das funções tradicionais de dissipação de entropia porque não exige uma expressão para o fluxo dessa grandeza, porém, permite alguma relaxação da desigualdade entrópica (i.e. violação entrópica). Assim, o fluxo ponderado no instante t^n é dado por:

$$\underline{F}^n_{j+1/2}(\underline{u}^n_j,\underline{u}^n_{j+1}) = \theta^n_{j+1/2}\underline{F}^{MLF}_{j+1/2}(\underline{u}^n_j,\underline{u}^n_{j+1}) + (1-\theta^n_{j+1/2})\underline{F}^{LW}_{j+1/2}(\underline{u}^n_j,\underline{u}^n_{j+1},\chi) \tag{4.46}$$

onde o fator de ponderação, $\theta^n_{j+1/2} = \max(\theta^n_j,\theta^n_{j+1})$ e sua determinação são a essência do método proposto por De Vuyst (2004). A determinação de θ_j é baseada numa função convexa de dissipação que deve: (i) ser negativa; (ii) produzir um valor de θ_j o mais próximo de zero possível, ou seja, produzir um fluxo com o maior caráter de segunda ordem possível.

O autor propôs obter θ_j controlando a dissipação localmente. A partir da desigualdade entrópica, eq. (4.42), pode-se escrever a seguinte equação para a dissipação local:

$$\eta_j = S^{n+1}_j - S^n_j + \varepsilon(\Psi^n_{j+1/2} - \Psi^n_{j-1/2}) \tag{4.47}$$

η_j representa a dissipação no volume j entre os instantes n e n+1 e deve ser menor ou igual a zero. De Vuyst (2004) provou que se a condição de CFL é mantida e se

$S(\underline{U})=\|\underline{U}\|^2/2$, então $\eta_j \le 0$. O autor também chamou a atenção para o fato de que esse resultado é válido para qualquer função convexa, embora neste caso a condição de CFL não possa ser obtida. O autor obteve a seguinte expressão para a função dissipação η:

$$\eta_j(\theta^n_{j+1/2}) = S(\underline{u}^{n+1}_j) - S(\underline{u}^n_j) + \varepsilon\left\{\underline{G}^n_{j-1/2}(\underline{u}^n_{j-1},\underline{u}^n_j)\left[\underline{f}^n_j - \underline{F}^n_{j-1/2}\right] + \underline{G}^n_{j+1/2}(\underline{u}^n_j,\underline{u}^n_{j+1})\left[\underline{F}^n_{j+1/2} - \underline{f}^n_j\right]\right\} \qquad (4.48)$$
$$S(\underline{u}^n_j) = \|\underline{u}^n_j\|^2/2, \quad \underline{G}^n_{j+1/2}(\underline{u}^n_j,\underline{u}^n_{j+1}) = \nabla_u S\left((\underline{u}^n_j + \underline{u}^n_{j+1})/2\right) = (\underline{u}^n_{j+1} + \underline{u}^n_j)/2$$

que por sua vez, depende do fluxo numérico dado pela eq. (4.46) e do campo atualizado $\underline{u}^{n+1}_j$. O método foi implementado segundo o algoritmo sugerido por De Vuyst (2004) para obter $\eta_j \le 0$, o qual obtém θ^n_j como o menor valor que fornece η^{n+1}_j negativo. Seja $\Delta\theta^n_j > 0$ um incremento pequeno, então obtém-se uma seqüência $\left\{\theta^{n,q}_j\right\}$ como se segue. Seja $q = 0$ e $\theta^{n,0}_j = 0$ e

enquanto $\eta^{n+1}_j\left(\theta^{n,q}_j\right) > \xi$ e $\theta^{n,q}_j \le 1$ faça

$\theta^{n,q+1}_j = \theta^{n,q}_j + \Delta\theta^n_j$

$q = q + 1$

Faça $\theta^n_j = \theta^{n,q}_j$ e calcule $\theta^n_{j+1/2} = \max(\theta^n_j, \theta^n_{j+1})$

calcule o fluxo numérico, eq. (4.46)

calcule os novos valores para as variáveis

calcule $\eta^{n+1}_j(\theta^{n,q}_j)$, eq. (4.48)

onde ξ é um valor pequeno e positivo. Um método do tipo Newton-Raphson poderia reduzir o tempo de CPU.

A aplicação deste método híbrido ao modelo de dois fluidos foi implementada. Os resultados de De Vuyst (2004) são relativos apenas ao modelo de dois fluidos não hiperbólico. Neste trabalho, resultados para o modelo hiperbólico com correção de pressão interfacial também foram obtidos. A sua aplicação ao modelo de mistura é facilmente realizada, já que nenhuma das equações apresentadas é alterada. Entretanto, os resultados apresentados no Capítulo 5 são novos na medida em que este método não havia sido aplicado a este modelo de escoamento bifásico.

4.3 Variáveis primitivas no escoamento bifásico

Seja $\underline{w} = \left[\alpha_g, v_g, v_l, p\right]^t$ o vetor de variáveis não conservativas a ser determinado após o cálculo de $\underline{u}$ no instante n+1. É necessário que se obtenha uma transformação de $\underline{u}$ em $\underline{w}$ e vice-versa. A seguinte relação entre $\underline{u}$ e as velocidades das fases pode ser escrita:

$$v_g = u_2 / u_1, \quad v_l = u_4 / u_3 \tag{4.49}$$

Além disso,

$$\begin{aligned} &\alpha_g \rho_g(p) = u_1 \\ &\alpha_l \rho_l(p) = (1-\alpha_g)\rho_l(p) = u_3 \end{aligned} \tag{4.50}$$

Estas equações levam à seguinte relação não-linear a ser resolvida a cada passo de tempo para obtenção da pressão e, conseqüentemente, das densidades:

$$\left[1 - \frac{u_1}{\rho_g(p)}\right]\rho_l(p) - u_3 = 0 \tag{4.51}$$

A transformação de $\underline{w}$ em $\underline{u}$ é trivial. A descrição completa do sistema é obtida com a definição da EdE. Para uma transformação isentrópica, a seguinte relação é assumida:

$$p_k = A_k \rho_k^{\gamma_k} - \Pi_k \tag{4.52}$$

onde γ é a razão entre as capacidades específicas a pressão e volume constantes e A_k e Π_k são constante que dependem do fluido. Esta EdE reproduz a EdE de gás rígido, $p_k = (\rho_k / C)^{\gamma_k} - (\rho_k^0 / C)^{\gamma_k}$, se $A_k = (1/C)^{\gamma_k}$ e $\Pi_k = (\rho_k^0 / C)^{\gamma_k}$.

4.4 Discretização dos termos não conservativos

4.4.1 – Termos de transferência interfaciais

O modelo de dois fluidos não é hiperbólico se $p_k^i = p_k$. Para resolver esse problema alguns modelos de correção de pressão foram criados. Um resumo desses modelos pode ser encontrado em Cortes *et al.* (1998). O modelo a seguir é adotado em muitas referências (Bestion , 1990; Cortes *et al.*, 1998; Paillère *et al.*, 2003; Evje e Flatten, 2003) e também foi adotado no Titãs (com $p_l^i = p_g^i = p^i$ e $p_l = p_g = p$):

$$p_i - p = \sigma \frac{\alpha_g \rho_g \alpha_l \rho_l}{(\alpha_g \rho_l + \alpha_l \rho_g)} (v_g - v_l)^2 \tag{4.53}$$

onde σ é uma constante positiva. Para $\sigma \geq 1$ o modelo de dois fluidos é hiperbólico enquanto que para $\sigma < 1$, os autovalores da matriz jacobiana do fluxo se tornam complexos. Deve-se ter em mente que valores de $\sigma = 1$ (usado no código CATHARE) é um limite baseado na análise dos autovalores aproximados e valores de $\sigma \geq 1.2$ são recomendados para garantir um modelo hiperbólico. O efeito desse parâmetro sobre a descontinuidade de contato é importante, sendo analisado no capítulo de resultados. Paillère *et al.* (2003) apresentaram resultados para σ=2 e σ=5, mas a adoção desses valores é questionável.

O termo de arraste interfacial depende do padrão de escoamento que, por sua vez, depende das velocidades superficiais do líquido e do gás. Uma forma possível para esse termo é:

$$F_g^D = F_g^{Di} + F_g^{Dw} = -\frac{C_D}{8} \alpha_g \rho_l \dot{a} (v_g - v_l) \mid v_g - v_l \mid + F_g^{Dw} \tag{4.54}$$

onde C_D é um coeficiente de arrasto positivo que depende das propriedades das fases e da interface e do padrão de escoamento, $\dot{a}$ é a área específica e F_g^{Dw} é a força de atrito com a parede. Além disso, como para todos os fluxos de transferência interfaciais, tem-se que:

$$F_l^{Di} = -F_g^{Di} \tag{4.55}$$

Outros modelos mais complexos foram apresentados no Capítulo 2 e seguem o mesmo tipo de discretização apresentada.

4.4.2 – Surgimento e desaparecimento de fases

Assim como a formação de vácuo é um desafio para a simulação de escoamento monofásico, o aparecimento ou desaparecimento de fases são importantes desafios para os métodos numéricos aplicados a sistemas multifásicos. Primeiramente, a dissipação numérica deve ser calculada para as condições nas quais a fração volumétrica das fases tende a zero ou um. O fluxo do AUSM+, eq. (4.27), permanece não singular desde que o número de Mach permaneça limitado inferiormente. A limitação correspondente para a velocidade implica que a fase que está desaparecendo deve ter velocidade igual àquela da fase que permanece. Por exemplo, se a fração volumétrica de gás tende a zero, a seguinte expressão é usada, seguindo Paillère *et al.* (2003):

$$v_g = \lambda(\alpha_g)u_2/u_1 + [1-\lambda(\alpha_g)]u_4/u_3 \tag{4.56}$$

onde $\lambda(\alpha)$ é uma função estritamente positiva e igual a 1, se $\alpha>\alpha_{min}$, com α_{min} muito próximo de zero, e tendendo a zero suavemente se $\alpha<\alpha_{min}$.

4.4.3 – Termos fonte

Seguindo a proposta de Paillère *et al.* (2003), os termos fonte são discretizados com a seguinte fórmula central:

$$(p_i \frac{\partial \alpha_k}{\partial x})_j^n = p_{i,j}^n \frac{\alpha_{k,j+1}^n - \alpha_{k,j-1}^n}{2\Delta x} \tag{4.57}$$

Os termos de gravidade e de arrasto são calculados na célula *j*. A discretização do modelo de dois fluidos usada no Titãs segue a eq. (4.24) Alguns autores adotaram a forma da eq. (4.26) onde o fluxo possui termos de Δp ao invés de *p* e os termos não conservativos incluem gradientes de pressão ao invés de gradientes de fração volumétrica. Evje e Flatten (2003) usaram a forma da eq. (4.26) incluindo os termos não conservativos no fluxo AUSM ao invés de considerá-los termos fonte. García-Cascales e Salvador (2006) adotaram tanto diferenças centrais quanto regressivas (*backward*) para esses termos.

Para o método híbrido Lax Friedrichs-Lax-Wendroff o tratamento dos termos não conservativos é mais sofisticado, incluindo-os no fluxo híbrido. Isto é feito pela substituição do fluxo modificado de Lax-Wendroff dado pela eq. (4.45) por:

$$\begin{aligned}
&\underline{F}_{k,j+1/2}^{LW}(\underline{u}_{k,j}, \underline{u}_{k,j+1}, \chi) = 0{,}5\left(\underline{f}_k^L + \underline{f}_k^R\right) - \\
&-\frac{\varepsilon}{2\chi}\left[\underline{f}\left(\overline{\varphi}(\underline{u}_{k,j}, \underline{u}_{k,j+1}) + \chi(\underline{f}_k^R - \underline{f}_k^L)\right) - \underline{f}\left(\overline{\varphi}(\underline{u}_{k,j}, \underline{u}_{k,j+1})\right)\right] \\
&-\frac{\varepsilon}{2\chi}\left[\underline{f}\left(\overline{\varphi}(\underline{u}_{k,j}, \underline{u}_{k,j+1}) + \chi \underline{B}_{j+1/2}^n(\underline{u}_{k,j+1} -, \underline{u}_{k,j})\right) - \underline{f}\left(\overline{\varphi}(\underline{u}_{k,j}, \underline{u}_{k,j+1})\right)\right]
\end{aligned} \tag{4.58}$$

e a atualização das variáveis é modificada para:

$$\underline{U}_j^{n+1} = \underline{U}_j^n - \varepsilon(\underline{F}_{j+1/2}^n - \underline{F}_{j-1/2}^n) - \frac{\varepsilon}{2}\left[\underline{B}_{j-1/2}^n(\underline{U}_j^n - \underline{U}_{j-1}^n) + \underline{B}_{j+1/2}^n(\underline{U}_{j+1}^n - \underline{U}_j^n)\right] \tag{4.59}$$

onde $\underline{B}$ é o termo não conservativo [0, $p_g^i \partial\alpha_g / \partial x$, 0, $p_l^i \partial\alpha_l / \partial x$]^t e $\underline{B}_{j+1/2}=\underline{B}[(U_j+U_{j+1})/2]$. O produto no qual a jacobiana está presente na eq. (4.44) é aproximado obtendo-se a eq. (4.45). Pode-se fazer o mesmo para a matriz equivalente à jacobiana que apareceria nas eqs. (4.44) quando aplicadas ao modelo com o termo não conservativo. Esse processo gera o último termo da eq. (4.58). O processo tedioso de obtenção das equações intermediárias pode ser observado na referência original.

Outra possibilidade é o uso da técnica de *fractional-step* ou *operator-splitting*. Neste opção, faz-se o cálculo do vetor de variáveis sem a presença dos termos fonte, isto é, como um equação hiperbólica pura. Esta solução parcial será chamada de $\underline{u}_*^{n+1}$. Finalmente, a solução no instante n+1 é dada pela solução do sistema de EDO's a seguir:

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} = \underline{g}(\underline{u}) \qquad (4.60)$$
$$\underline{u}_0 = \underline{u}_*^{n+1}$$

Para isso pode-se usar um método como o Rungue-Kutta, Euler implícito, etc.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS

5.1. TITÃS - Um simulador de escoamentos compressíveis, monofásicos e bifásicos em dutos

5.1.1 – Introdução ao simulador TITÃS

O simulador TITÃS é dividido em vários módulos. Os módulos RÉIA e CRONOS estão relacionados com problemas monofásicos e bifásicos, respectivamente. Mais detalhes do simulador serão apresentados no Apêndice A.

5.1.1.1 Escoamento Monofásico Compressível - Módulo RÉIA

O módulo RÉIA tem submódulos chamados POSSEIDON que podem ter a designação -H, -R, -M, -AUSM, -AUSM_M, -Hy ou -FN, e, 1 ou 2. As designações -H, -R, -M, -AUSM, -AUSM_M, -Hy e -FN estão associadas ao método adotado. A designação -H indica um limitador de Harten (1983), -R indica o método de Roe-Pike (1983), -M indica um método com reconstrução de dados MUSCL-Hancock, e -FN indica que a jacobiana, seus autovalores e autovetores são calculados numericamente. As designações –AUSM, -AUSM_MUSCL e –Hy indicam, respectivamente, os métodos de AUSM+, AUSM+ com reconstrução de dados MUSCL-Hancock, e o método híbrido de Lax-Friedrich-Lax-Wendroff (HLFW). Os métodos foram apresentados nos Capítulos 3 e 4. As designações 1 e 2 indicam se o modelo é isotérmico ou não, respectivamente. Cabe chamar a atenção para o fato de que a designação Roe é utilizada em dois pontos diferentes do algoritmo. Essa designação é usada para o método pelo qual as variáveis são interpoladas nas faces, e para o limitador de fluxo proposto pelo mesmo autor. Sendo assim, pode-se utilizar o esquema de Roe (Roe-Pike) para cálculo do estado intermediário, em conjunto com um limitador de fluxo qualquer, por exemplo, o de Roe ou o de Harten. No caso do TITÃS, todos os

algoritmos baseados em *solvers* de Riemann adotam o esquema de Roe-Pike para cálculo do estado intermediário, sendo que o limitador de fluxo pode ser escolhido entre os limitadores de Roe ou Harten.

5.1.1.2 Escoamentos Bifásico – Módulos CRONOS e HERA

O módulo CRONOS possui dois submódulos, chamados HERA e ZEUS de acordo com o modelo adotado. Os modelos são o de dois fluidos em quase-equilíbrio adotado no módulo HERA e os modelos de dois fluidos e de mistura adotados no ZEUS. Os modelos foram apresentados no Capítulo 2.

O módulo HERA é utilizado para sistemas nos quais deseja-se especificar as pressões de entrada e saída do sistema, e nos quais as velocidades envolvidas não são elevadas.

Na solução de sistemas que apresentem dinâmicas rápidas, a hipótese de quase-equilíbrio adotada no algoritmo anterior não é razoável. Nesses sistemas, ondas de pressão e fração de vazio podem surgir de acordo com a compressibilidade das fases. Os módulos ZEUS são destinados a estes problemas mais complexos. Tanto o TITÃS quanto o TACITE, desenvolvido pelo *Institut Fraçais du Petrole* (Pauchon *et al.*, 1993 e 1994), são simuladores que adotam métodos especiais para problemas hiperbólicos. No entanto, o módulo CRONOS é baseado apenas em métodos sem *solvers* de Riemann (AUSM+, AUSMDV e HLFW) diferentemente do simulador TACITE que é baseado no método VFRoe. Adicionalmente, o TACITE é baseado em modelos de mistura enquanto que o módulo CRONOS do TITÃS é baseado tanto neste modelo, quanto no modelo de dois fluidos, assim como o OLGA e o PLAC que, por sua vez, usam métodos *upwind* que apresentam elevada difusão numérica. Os sub-módulos de ZEUS também podem ter as extensões -AUSM, -AUSM_M, -Hy, com os mesmos significados do módulo POSSEIDON, porém, possuem adicionalmente as extensões -AUSMDV e –AUSMDV_MUSCL correspondentes aos métodos AUSMDV sem e com reconstrução de dados MUSCL, respectivamente.

5.2 Condições de contorno e iniciais

As condições de contorno merecem uma discussão mais detalhada. Primeiramente, deve-se estabelecer quais os tipos de condição de contorno que serão utilizados em cada extremo do domínio em *x*. As condições podem ser:

- valores prescritos de variáveis,
- valores prescritos de derivadas das variáveis e
- valores prescritos de grandezas físicas que não são variáveis originais do problema, porém, são funções das variáveis originais.

Uma vez definidos os tipos de condição de contorno em cada extremo, deve-se observar a ordem do método para a adoção do número adequado de volumes fictícios. Este número dependerá de que parte das células coincidirá com o contorno. As células das extremidades da malha podem ter os centros ou as faces coincidentes com o contorno. No TITÃS, a face das células coincidem com o contorno e, portanto, uma célula fictícia será necessária para um método de primeira ordem, enquanto que duas células serão necessárias para um método de segunda ordem.

Em problemas de choque alguns tipos de condições de contorno são tipicamente utilizados. Estes tipos são descritos a seguir:

(i) condição reflexiva - consiste em fazer o vetor de variáveis igual o valor do volume interno adjacente, com exceção da velocidade que tem seu sinal invertido. Isso acarreta em um fluxo de massa zero, ou seja, representa uma parede impermeável;

(ii) condição transmissora ou transparente - todo o vetor de variáveis nas células fictícias é idêntico ao mesmo vetor da célula interna adjacente.

No caso do TITÃS, estamos particularmente interessados em condições comuns de bombeamento/compressão de fluidos em dutos. Na extremidade em que há uma bomba, a mesma deverá manter uma vazão mássica constante ou com função conhecida ao longo do tempo de acordo com a produção desejada. Particularmente, no caso do sistema duto-*riser* com intermitência severa, o comportamento característico da pressão

na entrada é o de apresentar grandes flutuações, não sendo possível, portanto, simulá-la sem que a pressão esteja "livre".

No outro extremo é comum adotar-se uma descarga à pressão constante. Existem alguns trabalhos (Tam et. al., 1998; Kim e Setoguchi, 1999; Darmofal *et al.*, 2000) que tratam do problema da condição de pressão na saída de dutos com o objetivo de tornar as condições na descarga mais realistas, visto que a pressão constante só é atingida a partir de uma certa distância da descarga. Essa preocupação com a condição de descarga de dutos se deve ao fato de que inúmeras perturbações observadas ao longo dos dutos são atribuídas à reflexão total ou parcial de ondas de pressão que atingem a descarga do duto. Condições de contorno apropriadas irão amortecer ou extinguir essa reflexão e são conhecidas como não reflexivas. Esse assunto foge ao escopo da tese, mas um maior aprofundamento nessas técnicas pode ser realizado futuramente e seus resultados incorporados ao TITÃS. Vale ressaltar que em escoamentos como os encontrados em explosões são mais sensíveis ao uso das condições não reflexivas. Finalmente, para o caso de intermitência severa, a condição de pressão constante permite que eventualmente o fluxo mássico seja invertido fazendo com que massa entre no sistema. Neste momento deve-se decidir por uma condição de fração volumétrica de refluxo a qual definirá se apenas gás ou líquido (ou ambos) retornarão ao sistema pela saída.

As condições de contorno de vazão mássica na entrada e pressão na saída não são suficientes para a solução do problema (Masella, 1997 e Masella *et al.*, 1998) já que as variáveis devem ser atualizadas mesmo nos volumes fictícios em ambos os extremos.

A escolha das condições de contorno extras é de suma importância para o sucesso das simulações, uma vez que condições mal postas geram resultados incoerentes. Geralmente, essas condições mal postas levam a grandes saltos nas variáveis próximo ao contorno, ou seja, a condição mal posta é rapidamente dissipada no interior do domínio em poucas células. Este comportamento também foi observado por Masella *et al.* (1998) no contexto dos escoamentos multifásicos.

Considere como exemplo o escoamento isotérmico com atrito no qual se conhecem o fluxo mássico na entrada e a pressão na descarga. O volume fictício na entrada necessitará de, ao menos, uma pressão conhecida para que seu estado seja completamente determinado. A princípio, a idéia mais simples é fazer a pressão do volume fictício igual à do volume interno. No entanto, esta condição é mal posta visto que o gradiente de pressão sofrerá grandes descontinuidades, pois será zero entre a célula fictícia e a primeira célula interna. A saída é manter-se o gradiente de pressão ao invés de manter-se a pressão. Sendo assim, é necessário que se proponha condições de contorno de acordo com as equações de conservação e a EdE.

A seguir serão apresentadas condições de contorno bem postas obtidas para gás ideal escoando em dutos com fluxo mássico de entrada e pressão de descarga conhecidos, nas condições isotérmica e não-isotérmica. Posteriormente, o mesmo será feito para escoamentos multifásicos isotérmicos.

5.2.1 – Escoamento monofásico

A malha de volumes finitos no interior do domínio é composta por volumes enumerados de 1 a N. Células fictícias na entrada, correspondente ao volume 0, e na saída, correspondente ao volume N+1, foram adicionadas. As condições de contorno foram desenvolvidas para serem aplicadas às equações de transporte dadas pela equação (2.2).

Escoamento isotérmico:

Condições de contorno na entrada:

Na entrada, o fluxo mássico é constante e designado por m_0. Sendo assim, pode-se resolver simultaneamente as equações de conservação do momento para o volume 1 e a equação de estado para obter-se ρ_0 e p_0. O sistema a ser resolvido é dado por:

$$\begin{cases} m_1^{n+1} - m_1^n = \varepsilon[(m_0^{n+1})^2 / \rho_0^{n+1} + p_0^{n+1} - (m_1^{n+1})^2 / \rho_1^{n+1} - p_1^{n+1}] - \dfrac{\Delta t (m_0^n)^2}{2D\rho_0^n} f_{at}\, \mathrm{sgn}(m_0^n) \\ p_0^{n+1} = C^2 \rho_0^{n+1} / \gamma_0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Nesta expressão, o fluxo mássico do volume 1 é constante, porém, o mesmo não ocorre na saída do duto. As expressões ficam mais simples quando os termos de atrito são calculados com o valor do fluxo mássico no tempo t^n e não no tempo t^{n+1} pois o fator de atrito, f_{at}, é altamente não linear em relação ao fluxo mássico. Isso pode acarretar em alguma perda de acurácia, porém, uma substituição sucessiva pode ser realizada alterando-se a cada iteração o valor do fluxo mássico com o qual o termo de atrito é calculado. Nos exemplos resolvidos, este número de iterações foi muito baixo, o que não acarretou em grande aumento no tempo de CPU. Substituindo-se a segunda equação do sistema na primeira obtêm-se a equação quadrática a ser resolvida para a densidade.

Condições de contorno na saída:

A temperatura na saída e a pressão são constantes, por isso, a densidade também o será. Desta forma, pode-se resolver a equação da conservação do momento, no volume *N*, para obter-se o fluxo mássico na saída do duto m_{N+1}. A forma final dessa equação é:

$$\frac{\varepsilon (m_{N+1}^{n+1})^2}{\rho_{N+1}^{n+1}} + m_{N+1}^{n+1} + \varepsilon[p_{N+1}^{n+1} - p_N^{n+1} - \frac{(m_N^{n+1})^2}{\rho_N^{n+1}}] - (m_{N+1}^n)^2 + \frac{(m_N^{n+1})^2 f_{at} \Delta t}{2D\rho_N^{n+1}} \mathrm{sgn}(m_N^{n+1}) \quad (5.2)$$

Na realidade, as equações propostas serão aplicadas para obter-se o estado completo no primeiro volume, que está sobre o contorno. No entanto, os métodos de segunda ordem necessitarão de uma condição adicional para os volumes fictícios. As condições que possibilitaram uma solução suave foram as seguintes:

$$\begin{aligned} m_0^{t+1} &= m_1^{t+1} \\ p_{N+1}^{t+1} &= 2\, p_N^{t+1} - p_{N-1}^{t+1} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Uma vez impostas as condições acima para as células fictícias, os valores das células fictícias estão completamente determinados, uma vez que os mesmos sistemas resolvidos anteriormente para a entrada e para a saída podem ser resolvidos para as segundas células fictícias.

Escoamento não isotérmico:

No caso não isotérmico, uma nova condição deve ser imposta. Esta condição está associada ao conhecimento de uma das temperaturas de entrada ou de saída. No TITÃS, a temperatura de entrada foi usada como condição. A imposição de uma temperatura dever ser feita através da especificação de uma das variáveis do sistema, como a entalpia. Para o caso do gás ideal, a entalpia não varia com a pressão e, portanto, a mesma é constante onde a temperatura é constante. Assim, no TITÃS, a entalpia de entrada é conhecida.

Condições de contorno na entrada:

Analogamente ao que foi feito para o caso isotérmico, deve-se utilizar a equação da conservação do momento juntamente com uma EdE. Neste caso, a EdE deve ser escrita como função da entalpia. O sistema final é dado por:

$$\begin{cases} m_1^{n+1} - m_1^n = \varepsilon\left[\dfrac{(m_0^{n+1})^2}{\rho_0^{n+1}} + p_0^{n+1} - \dfrac{(m_1^{n+1})^2}{\rho_1^{n+1}} - p_1^{n+1}\right] - \dfrac{\Delta t (m_0^n)^2}{2D\rho_0^n} f_{at}\,\mathrm{sgn}(m_0^n) \\ p_0^{n+1} = \left[H_0^{n+1}\rho_0^{n+1} - \dfrac{(m_0^{n+1})^2}{2\rho_0^{n+1}}\right](\gamma')^{-1} \end{cases} \tag{5.4}$$

onde $\gamma' = \gamma/(\gamma - 1)$. Especificando-se m_0 e H_0, obtém-se o novo valor de ρ_0 pela equação quadrática obtida pela substituição da segunda equação na primeira e, em seguida, o novo valor de p_0 através da EdE.

Condições de contorno na saída:

Na saída, nada se sabe a respeito da temperatura exigindo, portanto, uma nova equação para fechamento do sistema. Optou-se pela solução simultânea da equação do movimento e da energia. No caso não isotérmico nada se pode afirmar a respeito da densidade. Desta forma, o sistema a ser resolvido é dado por essas equações e pela EdE correspondente, diferentemente do caso anterior. O sistema é dado por:

$$\begin{cases} m_N^{n+1} - m_N^n = \varepsilon\left[\dfrac{(m_N^{n+1})^2}{\rho_N^{n+1}} + p_N^{n+1} - \dfrac{(m_{N-1}^{n+1})^2}{\rho_{N-1}^{n+1}} - p_{N-1}^{n+1}\right] - \dfrac{\Delta t (m_N^n)^2 f_{at}}{2D\rho_N^n}\operatorname{sgn}(m_N^n \\ E_N^{n+1} - E_N^n = \varepsilon\left[m_N^{n+1}(E_N^{n+1} + p_N^{n+1})/\rho_N^{n+1} - m_{N-1}^{n+1}(E_{N-1}^{n+1} + p_{N-1}^{n+1})/\rho_{N-1}^{n+1}\right] \\ \rho_N^{n+1} = \dfrac{1}{2}(m_N^{n+1})^2\left[E_N^{n+1} + p_N^{n+1}/(\gamma-1)\right]^{-1} \end{cases} \tag{5.5}$$

Sendo que o novo valor de ρ_N é obtido pele EdE. A solução final do sistema para a energia total e para o fluxo mássico é dada por:

$$\begin{cases} E_N^{n+1} = \dfrac{\left[\dfrac{m_{N-1}^{n+1}}{\rho_{N-1}^{n+1}}\left(E_{N-1}^{n+1} + p_{N-1}^{n+1}\right) - E_N^n\right].aux_1 + \dfrac{2\varepsilon p_{N-1}^{n+1\,2}}{\gamma-1}}{aux_1 + 2\varepsilon\left(E_N^n - \varepsilon\dfrac{m_{N-1}^{n+1}}{\rho_{N-1}^{n+1}}(E_{N-1}^{n+1} + p_{N-1}^{n+1})\right) + \dfrac{2\varepsilon p_{N-1}^{n+1}(\gamma-2)}{\gamma-1}} \\ m_N^{n+1} = -2\varepsilon E_N^{n+1} + aux_1 \\ aux_1 = m_N^n + \varepsilon\left(\dfrac{m_{N-1}^{n+1\,2}}{\rho_{N-1}^{n+1}} + p_{N-1}^{n+1} + \dfrac{3-\gamma}{\gamma-1}p_N^{n+1}\right) - \Delta t\dfrac{m_N^{n+1\,2} f_{at}}{2D\rho_N^{n+1}}\operatorname{sgn}(m_N^n) \end{cases} \tag{5.6}$$

Tomando-se como exemplo a simulação da partida de um gasoduto no qual a vazão de entrada é elevada instantaneamente, pode-se observar na Figura 5.1 o efeito das condições de contorno propostas. No momento, não importam os detalhes sobre o caso simulado e por essa razão não foram descritos neste ponto.

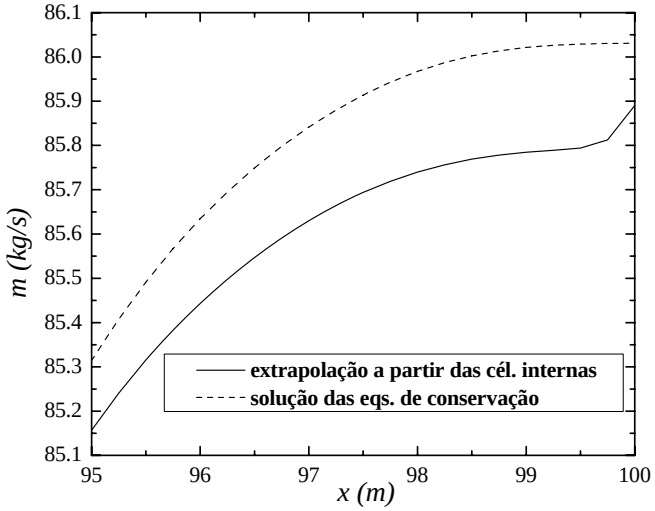


Figura 5.1 – Efeito de uma condição de contorno bem posta, ZOOM da região de saída.

5.2.2 – Escoamento multifásico

Escoamento isotérmico:

Condições de contorno na entrada:

Na entrada, as vazões mássicas são constantes e designadas por Q_g e Q_l, respectivamente. Sendo assim, deve-se obter ainda os valores das velocidades e frações volumétricas de cada fase e a pressão. As densidades são diretamente obtidas a partir da EdE. As velocidades podem ser obtidas a partir da seguinte equação:

$$v_k = \frac{Q_k}{\alpha_k \rho_k A} \tag{5.7}$$

Para isso, é necessário obter-se α_k e ρ_k. Uma opção para α_k é fazer:

$$\alpha_k^0 = \alpha_k^1 \tag{5.8}$$

A determinação de ρ_k dependerá da determinação da pressão. A determinação da pressão pode ser feita simplesmente com:

$$p^0 = p^1 \Rightarrow \rho_k^0 = \rho_k^1 \tag{5.9}$$

No entanto, essas condições produzem oscilações. Isso pode ser visto na Figura 5.2.

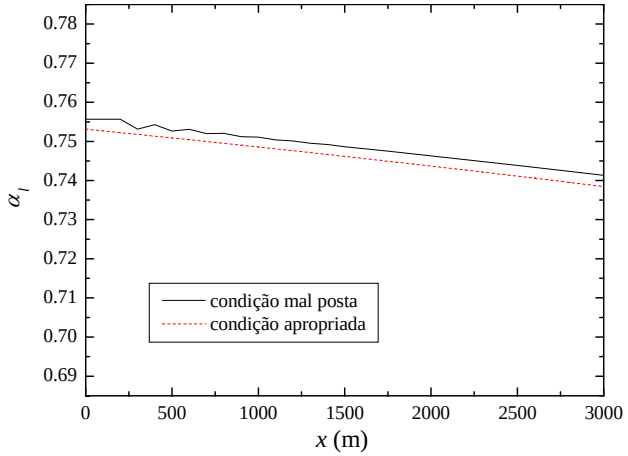


Figura 5.2 – Efeito de uma condição de contorno bem posta.

A solução bem posta foi obtida utilizando-se a condição de gradientes de pressão e fração volumétrica constantes na entrada, ou seja:

$$\begin{aligned} \alpha_k^0 - \alpha_k^1 &= \alpha_k^1 - \alpha_k^2 \\ p^0 - p^1 &= p^1 - p^2 \end{aligned} \tag{5.10}$$

Condições de contorno na saída:

Na saída apenas a pressão é conhecida. Deve-se ainda determinar as velocidades e as frações volumétricas. Uma opção é extrapolar, mas com limitador, o gradiente da fração volumétrica:

$$\alpha_k^{N+1} = \min(\max(2\alpha_k^N - \alpha_k^{N-1}, 0), 1) \tag{5.11}$$

e aplicar a continuidade:

$$\alpha_k^N \rho_k^N v_k^N = \alpha_k^{N+1} \rho_k^{N+1} v_k^{N+1} \rightarrow v_k^{N+1} = \frac{\alpha_k^N \rho_k^N v_k^N}{\rho_k^{N+1} \alpha_k^{N+1}} \tag{5.12}$$

No entanto, deve-se tomar o devido cuidado com a possibilidade de ocorrer um refluxo de líquido. Neste caso, velocidades negativas aparecerão na saída causando uma entrada de líquido pela saída. Normalmente, a descarga se dá para um equipamento no qual apenas gás retornará ao sistema. Desta forma faz-se o seguinte teste na condição de saída:

$$\text{Se } v_l^N < 0,\ \alpha_l^{N+1} = 10^{-15},\ v_l^{N+1} = 0 \ \text{ e } \ v_g^{N+1} = \frac{\alpha_l^N v_l^N + \alpha_g^N v_g^N}{\alpha_g^{N+1}} \tag{5.13}$$

onde a velocidade do gás é determinada supondo-se que o volume que o líquido deixa ao retornar no duto é ocupado pelo gás. No entanto, por vezes resultados inaceitáveis ocorrem. Primeiramente, pode ocorrer a inversão do fluxo, fazendo com que a fração volumétrica de líquido seja próxima de zero. Quando o fluxo é invertido, tornando-se positivo, a velocidade dada pela equação (5.13) apresenta valores irreais na ordem de milhares de m/s, dependendo do valor da fração volumétrica que aparece no denominador. A princípio, basta tomar o devido cuidado de não calcular o CFL com a célula fictícia. O valor alto em si não é problema, pois neste caso, as ondas se propagam para a direita e o valor na célula fictícia não chega a interferir nos volumes internos. Outro problema que ocorre é que quando a condição de contorno acima é aplicada, por vezes, é tarde demais, pois o fluxo na face entre a célula fictícia e a célula interna já foi negativo, permitindo a entrada de líquido. Uma saída já encontrada pelos pesquisadores do (Instituto Francês do Petróleo) e universidades francesas (Duret *et al.*, 2004) é fazer:

$$\text{Se } f_l^{N+1/2} < 0 \Rightarrow f_l^{N+1/2} = 0 \Rightarrow f_l^{N+1/2} = \max(f_l^{N+1/2}, 0) \tag{5.14}$$

A proposta dada pela equação (5.14) propiciou bons resultados para o caso de intermitência severa com o modelo de mistura. Vale ressaltar que estas observações não foram realizadas em qualquer publicação anterior. A referência citada (Duret *et al.*,

2004) é apenas uma apresentação encontrada na *internet* sem qualquer detalhe sobre resultados e maiores discussões. A correta definição das condições de contorno para problemas nos quais há inversão do fluxo na saída não foi completamente solucionada neste trabalho (nesta tese de doutorado). Essa dificuldade levou a uma série de testes com diferentes condições de contorno, e quase sempre os resultados são instáveis e dependentes da ordem de grandeza dos termos fonte.

5.2.3 – Condições iniciais

As condições iniciais deverão atender às condições de equilíbrio local, às condições de equilíbrio de fase, no caso multifásico, e às condições de equilíbrio químico no caso de sistemas reativos. Deve-se tomar o cuidado de não se superespecificar as variáveis realizando-se um balanço de informações. Utilizando-se o caso do escoamento de um gás ideal como exemplo, uma vez definidas a temperatura T e a massa molecular M e a razão entre as capacidades caloríficas a volume e pressão constantes γ, pode-se obter o valor da velocidade do som no meio por:

$$c^2 = \frac{RT}{\gamma M} \tag{5.15}$$

Diferentemente, também se pode estipular a velocidade do som no meio e determinar-se γ, mas não se pode especificar as duas variáveis. O importante é que as condições iniciais e aquelas impostas durante a integração estejam em total acordo evitando saltos que correspondem à dissipação de condições mal postas.

No entanto, nos sistemas multifásicos, as condições iniciais desempenham um papel mais marcante em função da grande não linearidade imposta pelos termos de arraste dependentes do padrão de escoamento. No caso da intermitência severa, por exemplo, as poucas publicações existentes (Masella *et al.*, 1998; Faille e Heintzé, 1999) primeiramente obtêm um pseudo estado estacionário. Pseudo porque o fenômeno não possui um estado estacionário. A partir desse estado é que a integração temporal é realizada.

5.3. Comparação dos métodos para escoamento compressível monofásico

Na comparação dos métodos, duas abordagens foram usadas. Primeiro, as acurácias dos métodos foram comparadas para uma dada malha. Dois casos de choque em tubos e um caso de partida de gasoduto foram utilizados. Posteriormente, foram utilizadas diferentes malhas que apresentam, para os diferentes métodos, aproximadamente a mesma acurácia. Finalmente, o número de operações de ponto flutuantes (FLOPS) e endereçamentos indiretos (IAs) foram comparados para essas malhas. Isto é importante porque comparar o número de FLOPS, IAs e tempo de CPU de métodos diferentes para uma dada malha não faz sentido, visto que o método de menor acurácia apresentaria menor tempo de CPU, IAs e FLOPS, porém, apresentaria resultados mais “pobres”. Assim, deve-se comparar tempo de CPU, IAs e FLOPS para uma dada qualidade requerida de solução. Desta forma, sabe-se que os métodos de primeira ordem apresentam menor custo computacional do que os de segunda ordem para uma dada malha, porém, não é claro se ao exigir uma dada qualidade de solução, a possibilidade de usar malhas mais grosseiras para os métodos de segunda ordem iriam compensar os maiores custos computacionais por passo de tempo destes métodos.

5.3.1 – Gases Ideais

5.3.1.1 Problemas de choque

O livro texto de Toro (1999) apresenta uma tabela com exemplos de problemas de choque não isotérmicos, que são modificações do problema de Sod (1978), dos quais dois foram escolhidos para serem resolvidos pelo TITÃS. A tabela a seguir apresenta as condições iniciais dos problemas teste 1 e 2. Vale ressaltar que estes problemas de referência com raras exceções são apresentados sem unidades de medida. As unidades serão apresentadas sempre estiverem disponíveis na referência original.

Tabela 5.1 – Problemas teste de choque em tubo. (E-esquerda;D-direita)

Teste	Densidade		Pressão		Velocidade		Posição do choque
	E	D	E	D	E	D	
1	1	0,125	1	0,1	0,75	0	0,3
2	5,99924	5,99242	460,894	46,095	19,5975	-6,19633	0,4

Os resultados para densidade, pressão, velocidade, energia total, e número de Mach para os dois casos teste são apresentados a seguir pelas figuras 5.3 e 5.4. Nestes casos apenas o método de Roe-Pike foi utilizado, com uma malha com 500 células, sendo a densidade também mostrada para uma malha de 100 células.

Para o caso teste 1, a estrutura típica da solução deste problema pode ser observada nas figuras citadas. Observando-se a densidade para o instante de tempo 0,2s, por exemplo, percebe-se uma região entre x=0 e x=0,4, aproximadamente, na qual a solução é uma rampa entre 1 e um valor pouco abaixo de 0,6. Esta região corresponde à onda de rarefação que se propaga para a esquerda. Em seguida, x=0,5, aproximadamente, percebe-se uma descontinuidade correspondendo a uma descontinuidade de contato que se propaga para a direita. Ela não é representada exatamente como uma descontinuidade devido ao pequeno número de células usado. Em seguida, x=0,7, aproximadamente, percebe-se outra descontinuidade correspondendo a uma onda de choque que se propaga para a direita. Particularmente, pode-se perceber que para a densidade com 100 células na região da onda de rarefação, uma parte da descontinuidade inicial em x=0,3 permanece ao longo do tempo. Esta descontinuidade é um problema dos métodos baseados na solução do problema de Riemann e que exige uma correção de entropia, como apresentado no capítulo 3. O caso teste 1 será novamente abordado oportunamente, e esse tipo de correção será usado.

O caso teste 2 é um caso bastante severo na qual a solução é formada por três descontinuidades que se propagam para a direita. A primeira e a segunda correspondem à uma onda de choque e a uma descontinuidade de contato, respectivamente, com face para a esquerda. A onda de choque com face voltada para a esquerda propaga-se para

direita, porém com baixa velocidade. A terceira descontinuidade é uma onda de choque que se propaga para a direita.

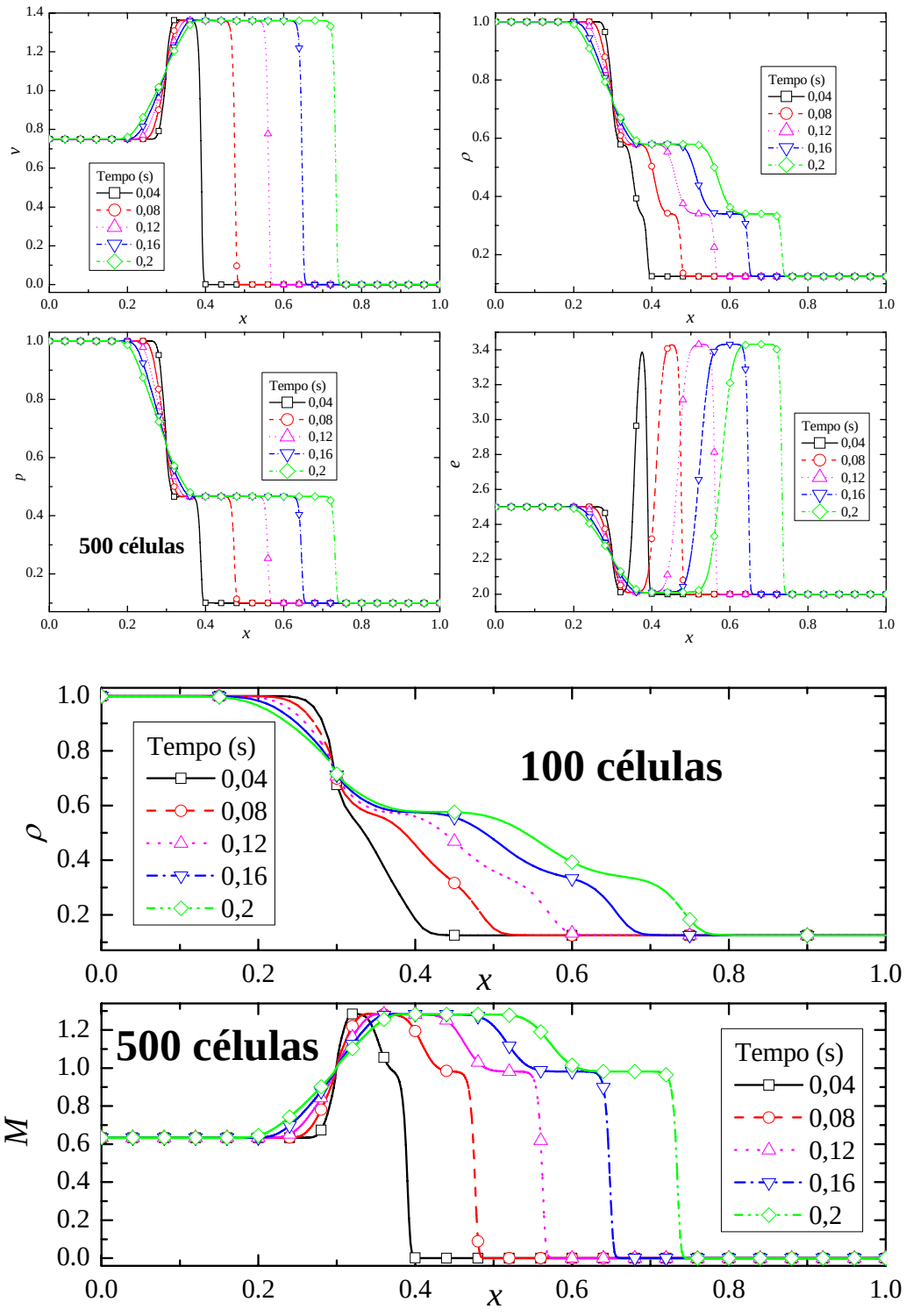


Figura 5.3 – Resultados para o caso teste 1 – Método de Roe-Pike.

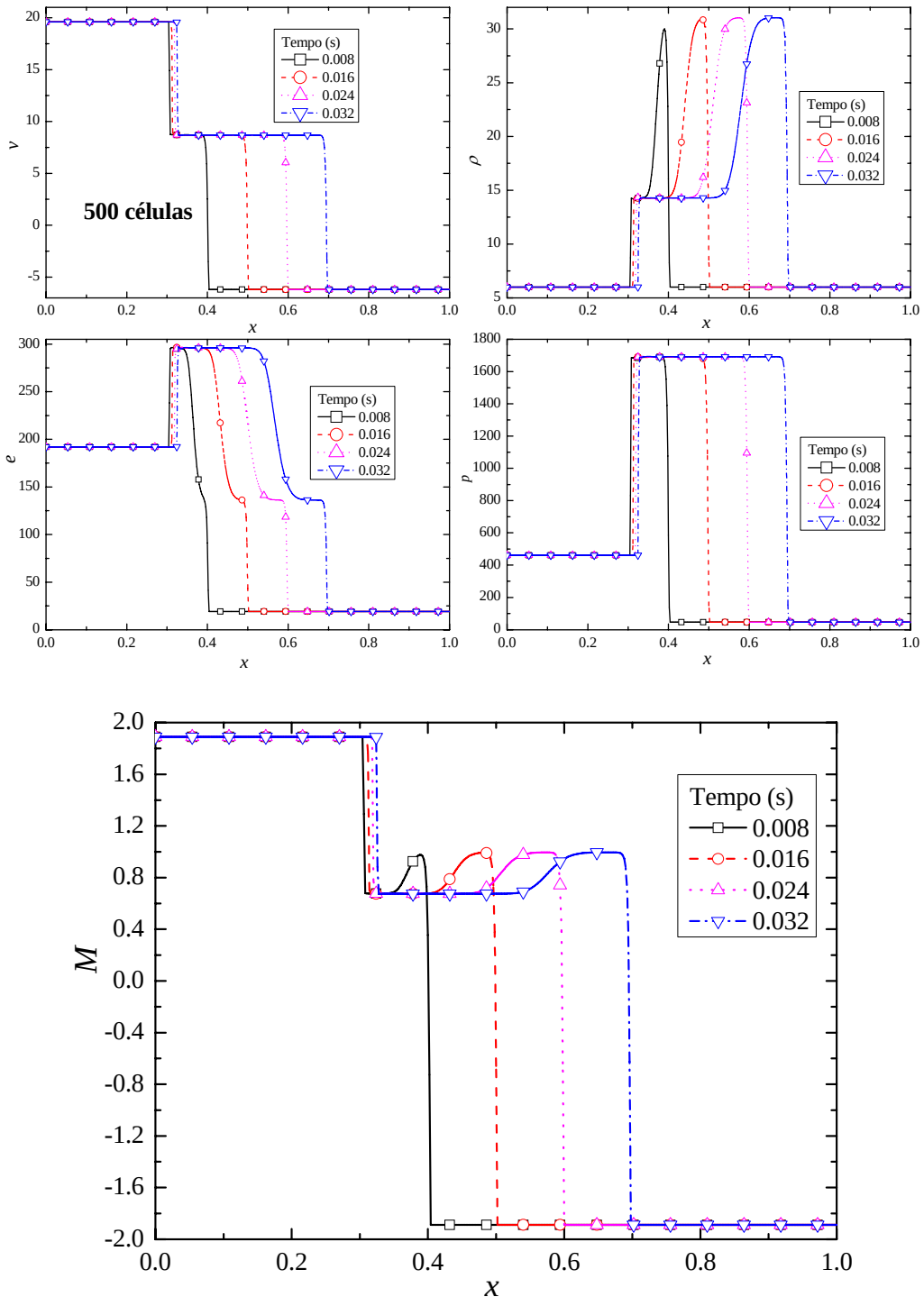


Figura 5.4 – Resultados para o caso teste 2– Método de Roe-Pike.

Outro problema de propagação de choque de interesse na indústria de petróleo e gás é a propagação de *blast waves*. Estas ondas aparecem mesmo em regiões afastadas do local onde ocorrem as explosões. Woodward e Colella (1984) apresentaram um problema que consiste na propagação de duas *blast waves*. O problema (teste 3) tem condições iniciais dadas em três regiões: (i) x<0,1; (ii) 0,1<x<0,9; (iii) 0,9<x, nas quais o valor inicial do vetor [p, v, ρ] é dado por: [1000, 0, 1], [0.01, 0, 1] e [100, 0, 1], respectivamente. A Figura 5.5 apresenta um histórico dos perfis de pressão em vários instantes de tempo. Pode-se perceber a escala que tempo envolvida é reduzida. As duas ondas iniciais se propagam e interagem construtivamente formando uma onda de amplitude superior (cor amarelada) às ondas originais momentos antes da interação (cor magenta).

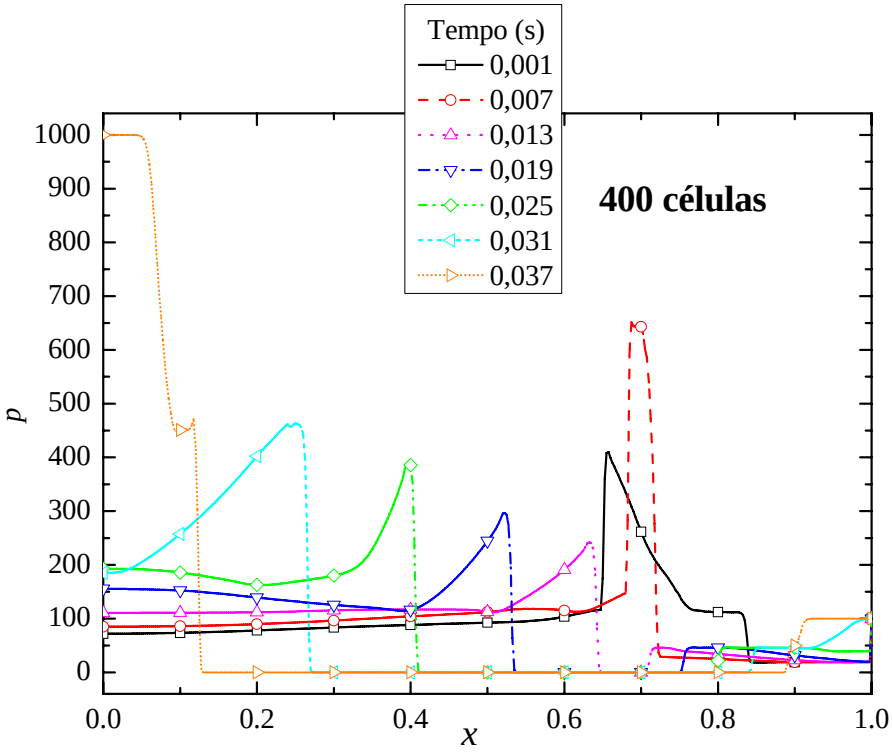


Figura 5.5 – Resultados para o caso teste 3– Método de MUSCL Roe-Pike.

As Figuras 5.6 a 5.13 mostram uma comparação para o caso teste 1 entre os resultados com o esquema de Roe-Pike com correção entrópica de Harten-Hyman e com o limitador de Harten, e usando Roe-Pike com a correção de Harten-Hyman com reconstrução de dados via MUSCL e duas opções de limitadores (MINMOD e SUPERBEE), para 50 e 100 células. Os resultados são comparados com a solução

analítica obtida pelo programa E1RPEX.f da biblioteca NUMERICA (www.numeritek.com).

Estas figuras mostram que os dois esquemas MUSCL fornecem resultados superiores aos métodos de primeira ordem. Além disso, os resultados mostram que o esquema MINMOD apresentou os melhores resultados para esses problemas, seguido de perto pelo SUPERBEE. Em ordem decrescente de acurácia, eles são seguidos pelos métodos de Harten e Roe-Pike. Pode-se observar que o SUPERBEE apresenta menores erros nas frentes das ondas de rarefação mas maiores picos e algumas oscilações na traseira da mesma. Na traseira das ondas de choque, o método de Harten apresenta maiores desvios do que o Roe-Pike.

As Figuras 5.14 a 5.16 mostram o gráfico do erro absoluto para a densidade, energia total e velocidade, respectivamente, para malha de 50 células. A pressão possui perfil do erro similar ao da densidade, não sendo necessário mostrar ambos. Estes gráficos confirmam a superioridade do método MUSCL usando o limitador MINMOD.

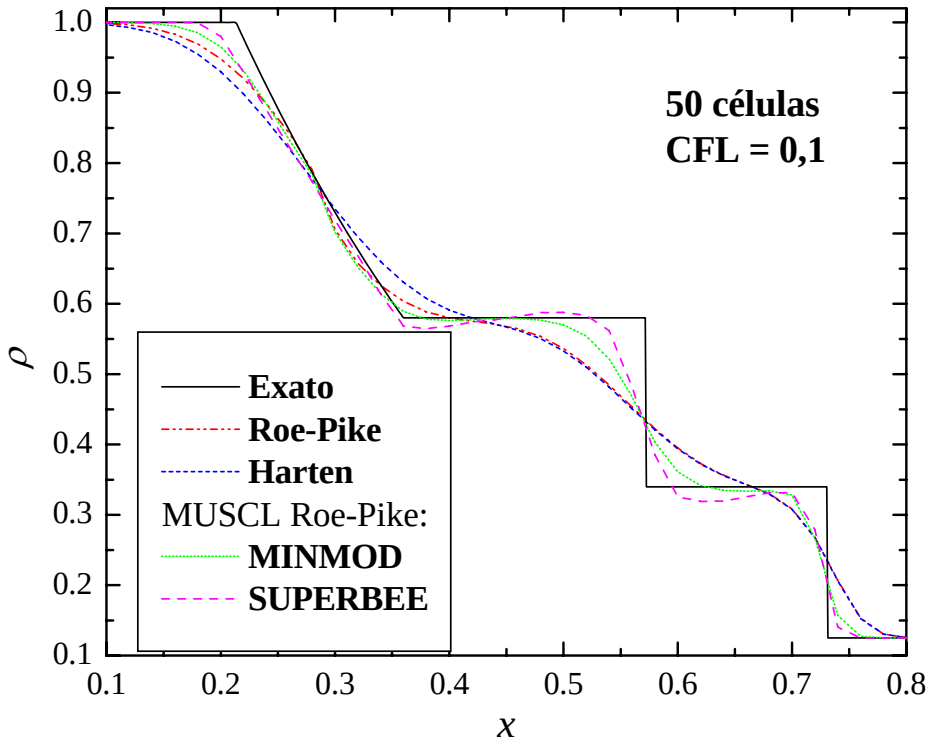


Figura 5.6 – Comparação entre as densidades obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 50 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

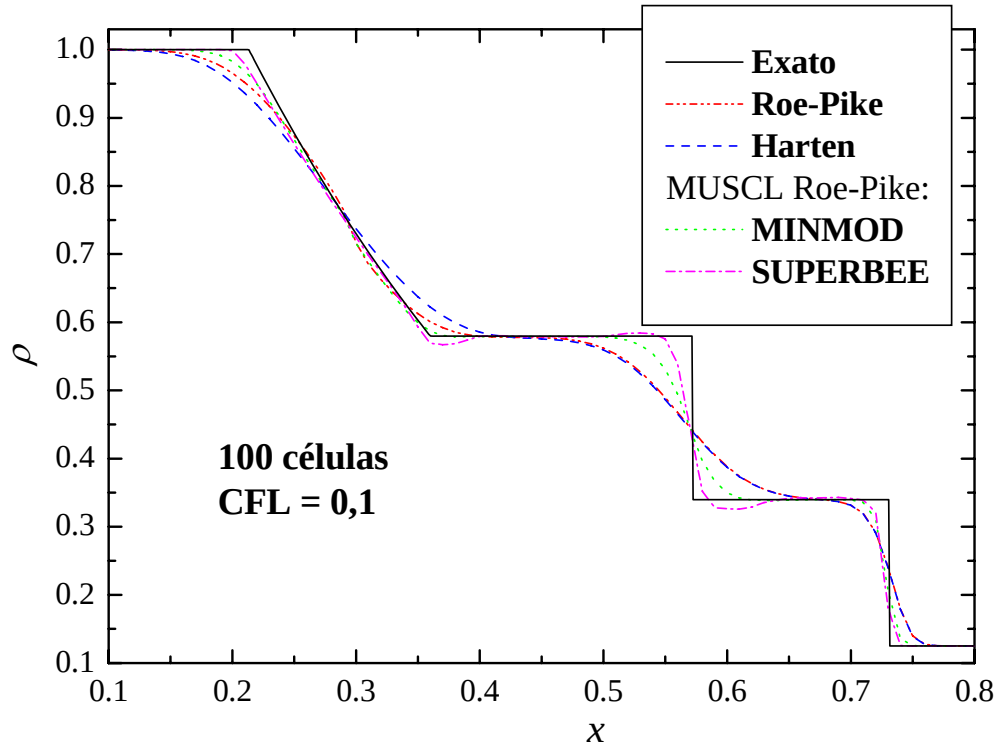


Figura 5.7 – Comparação entre as densidades obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 100 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

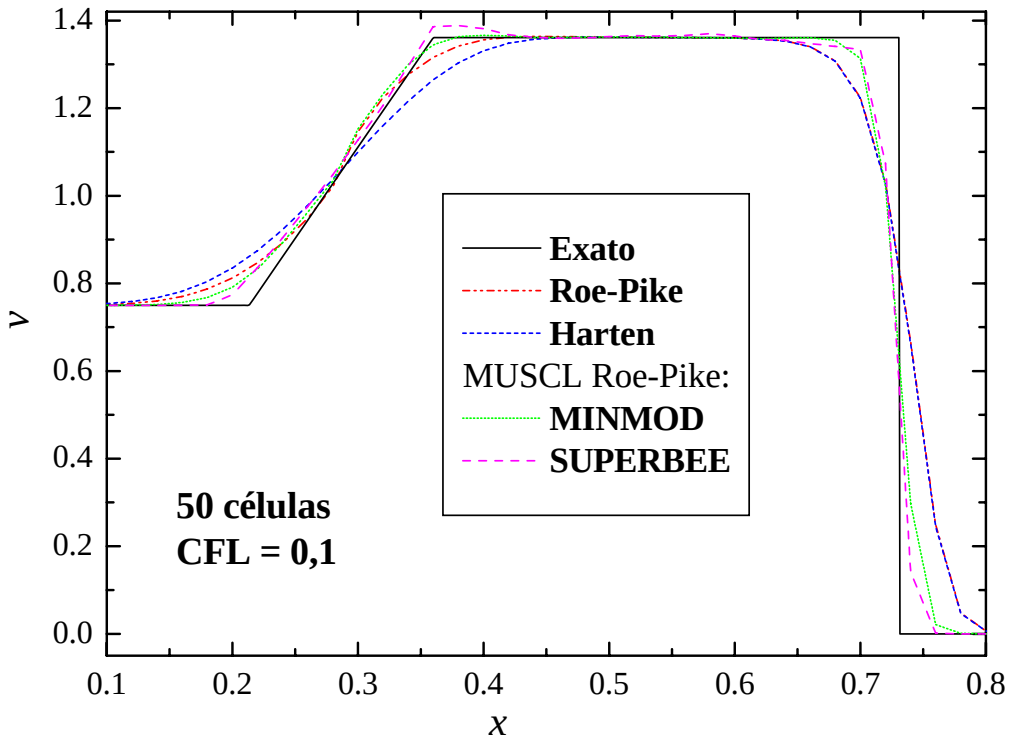


Figura 5.8 – Comparação entre as velocidades obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 50 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

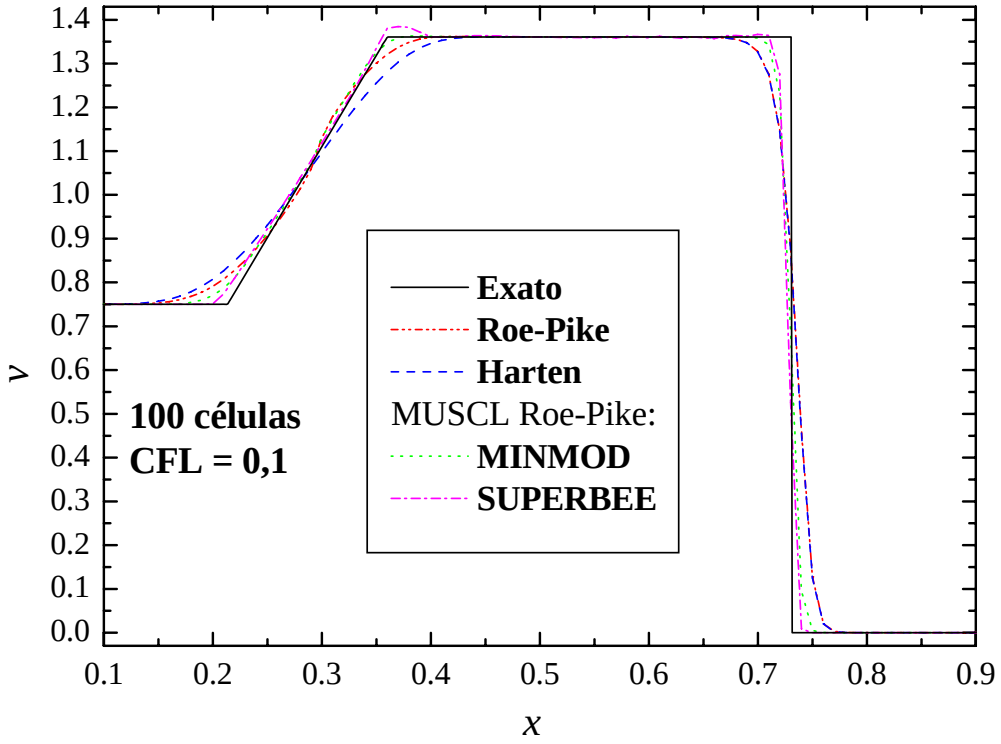


Figura 5.9 – Comparação entre as velocidades obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 100 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

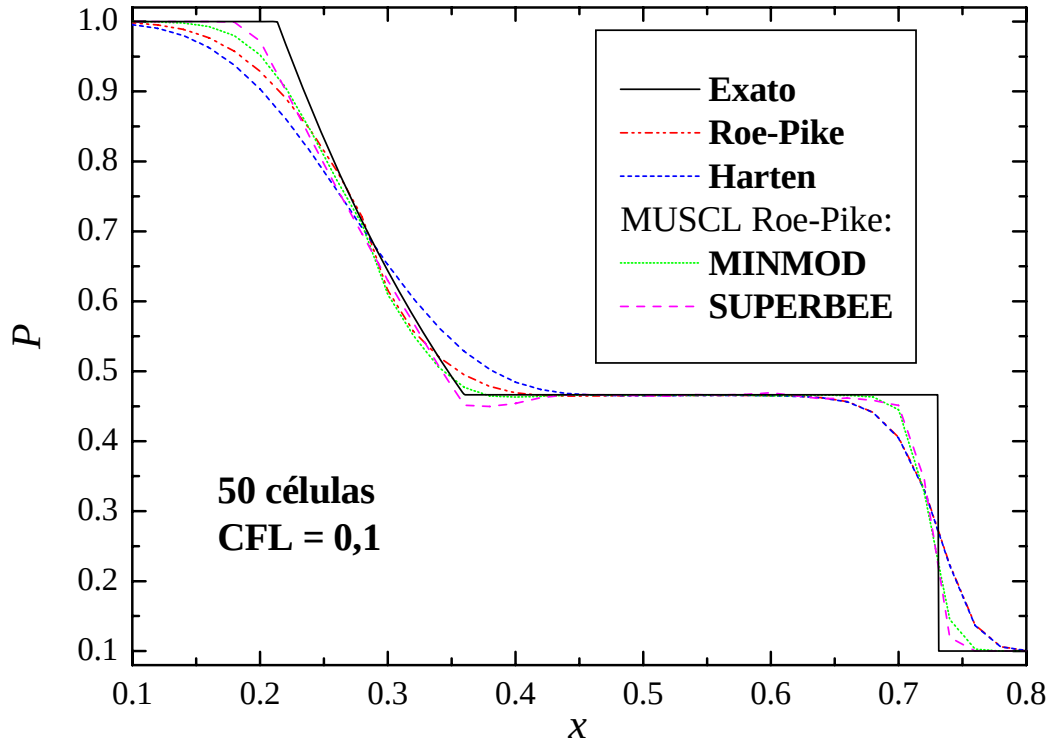


Figura 5.10 – Comparação entre as pressões obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 50 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

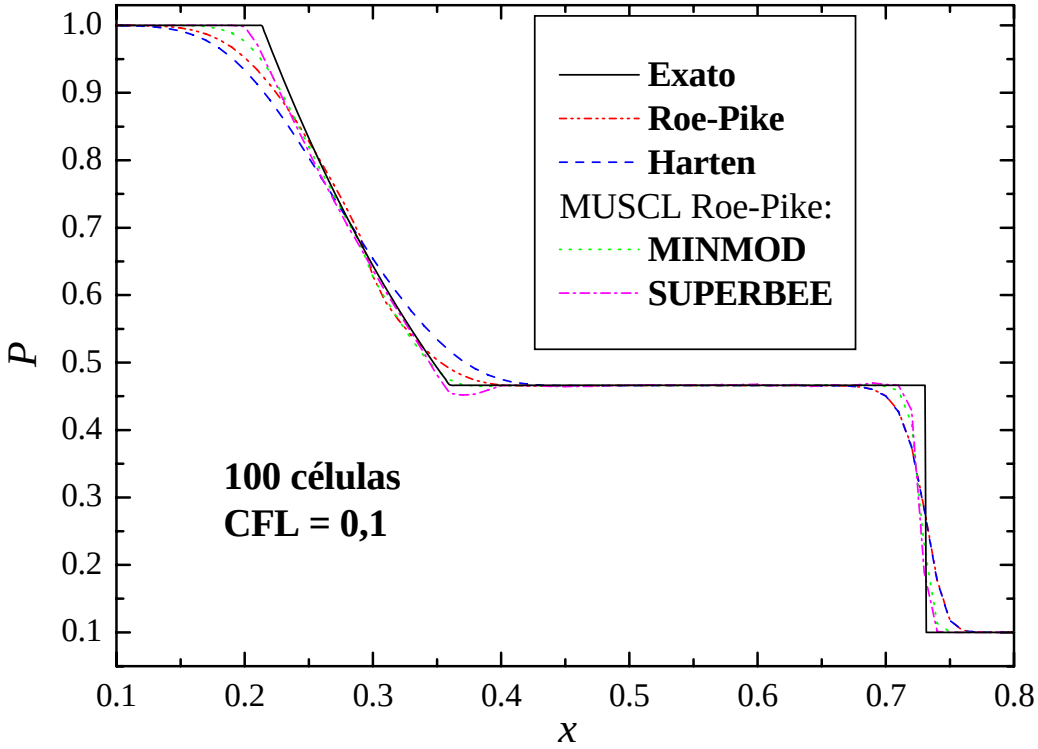


Figura 5.11 – Comparação entre as pressões obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 100 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

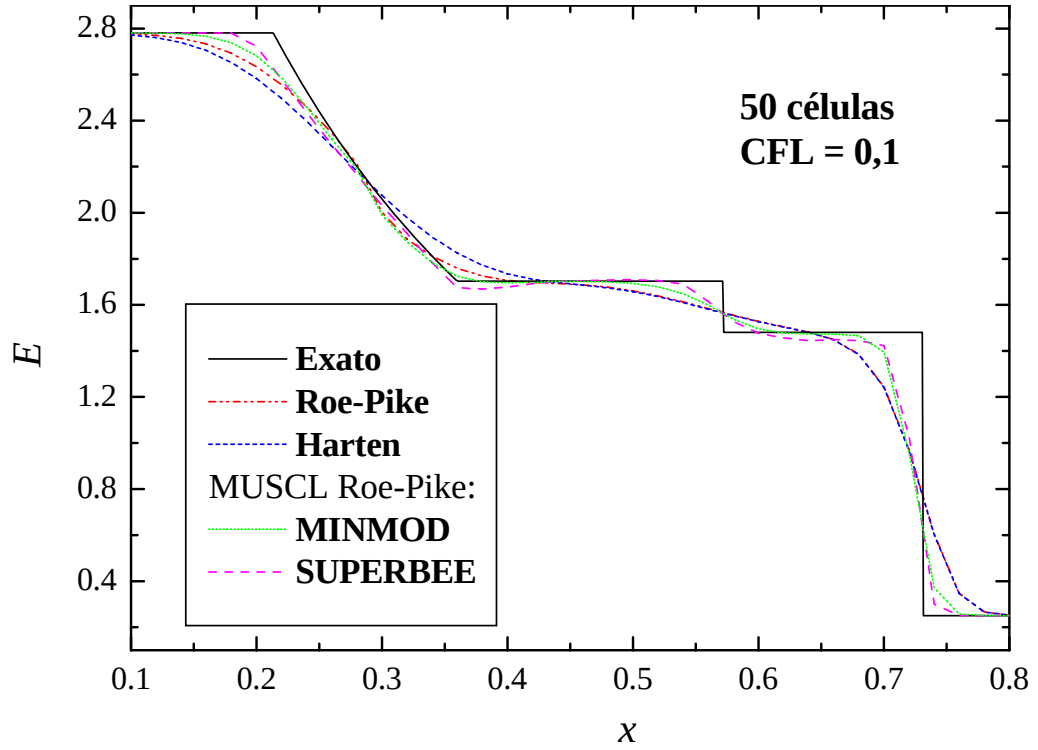


Figura 5.12 – Comparação entre as energias totais obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 50 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

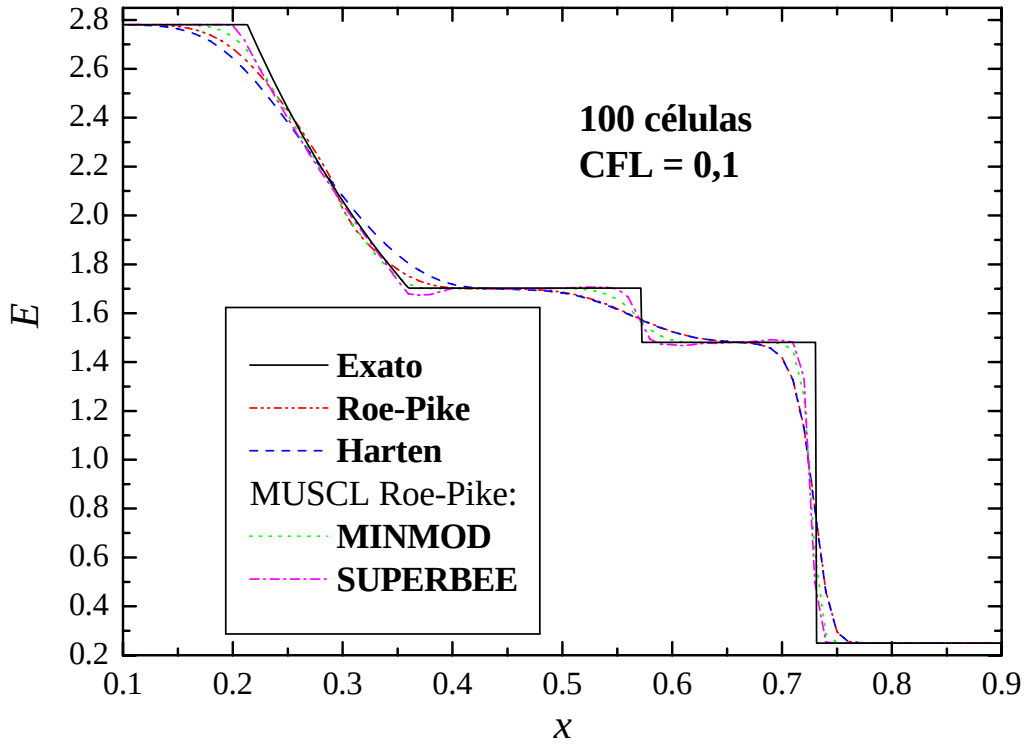


Figura 5.13 – Comparação entre as energias totais obtidas por vários limitadores de fluxo para uma malha de 100 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

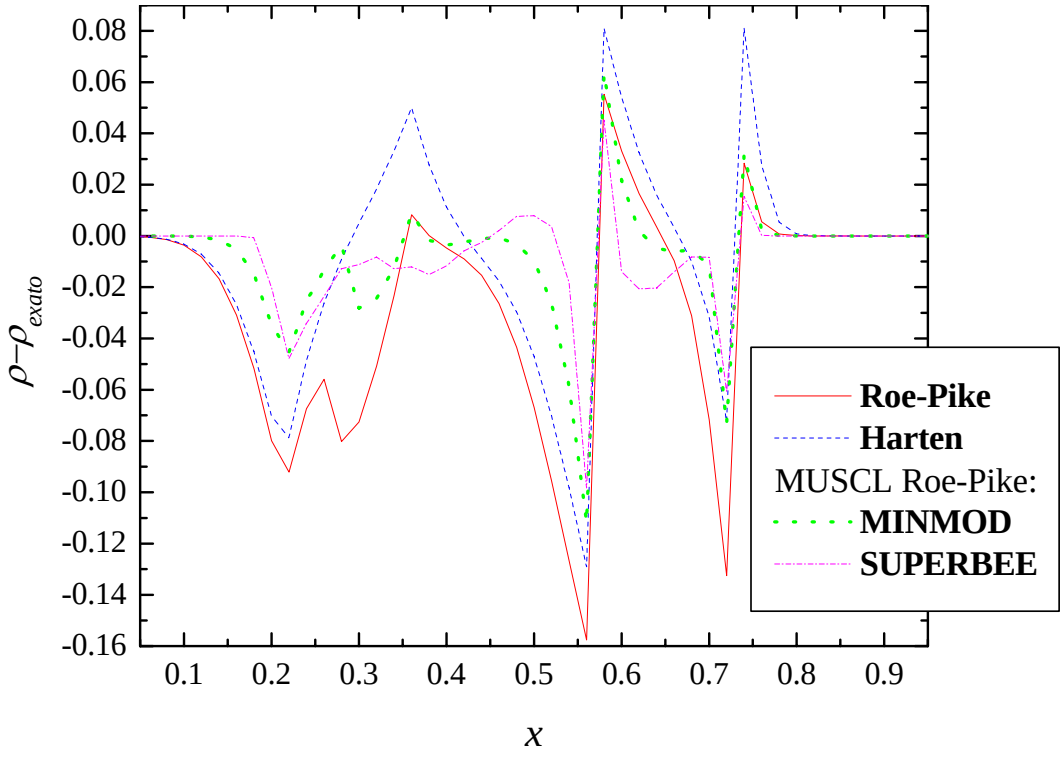


Figura 5.14 – Comparação entre os valores do erro absoluto para a densidade usando diversos métodos, para uma malha de 50 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

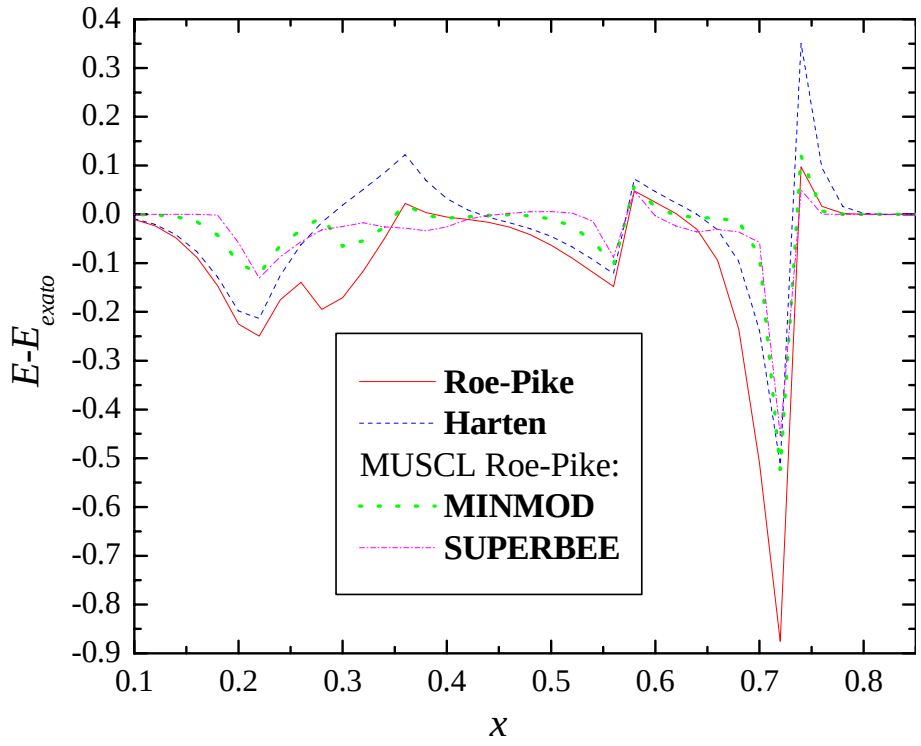


Figura 5.15 – Comparação entre os valores do erro absoluto para a energia total usando diversos métodos, para uma malha de 50 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

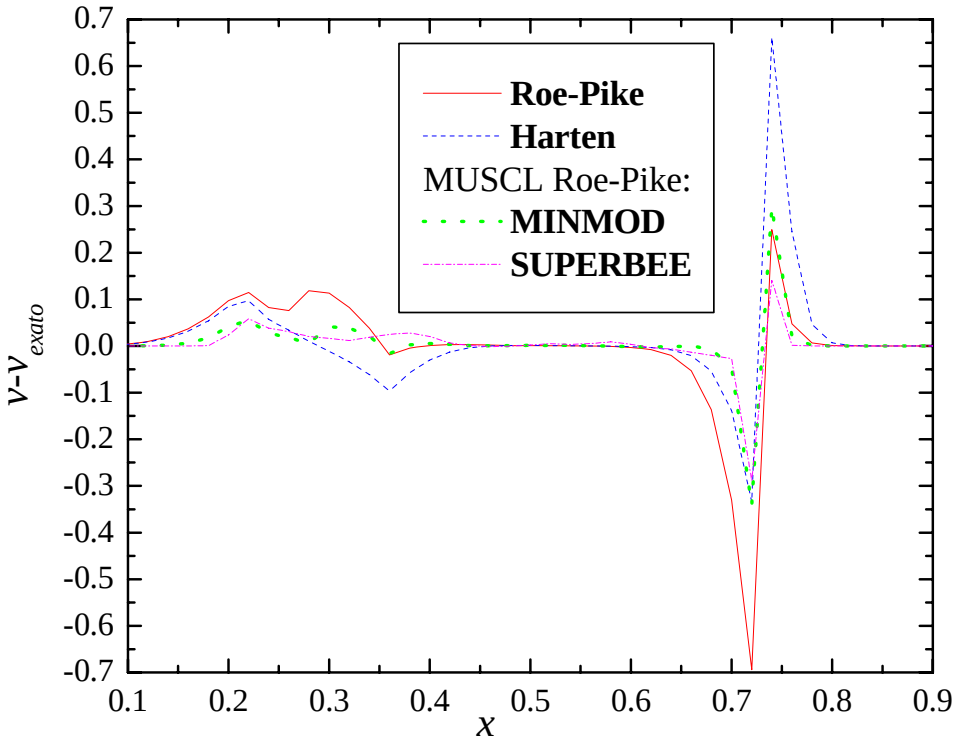


Figura 5.16 – Comparação entre os valores do erro absoluto para a velocidade usando diversos métodos, para uma malha de 50 células (caso teste 1, tempo de 0,2 s).

5.3.1.2 Partida isotérmica de gasoduto

Outro problema interessante é o escoamento compressível em dutos de larga escala. Os exemplos a seguir apresentam os resultados obtidos pelo método Roe-Pike para uma tubulação de 30 cm de diâmetro e com 100 m de comprimento. O fator de atrito é introduzido, e o estado estacionário é então obtido. A pressão de saída e a vazão mássica de entrada são especificadas. Este é o problema teste 4.

A vazão mássica na entrada é especificada para 70 kg/s e a pressão de descarga igual a $1{,}0\times10^5$ N/m^2. Um total de 400 células foi utilizado e o passo de tempo foi de 0,0001s, tendo sido usado um esquema explícito no tempo. Inicialmente, a tubulação encontra-se a pressão constante ($1{,}0\times10^5$ N/m^2) e vazão nula, sendo esta modificada apenas no primeiro volume para iniciar a alimentação de gás na tubulação. Os resultados encontrados estão de acordo com o esperado visto que, no estado estacionário ($||\underline{u}^{n+1}-\underline{u}^{n}||<10^{-10}$), a vazão mássica é praticamente constante, e os perfis de pressão e vazão volumétrica são parabólicos. As Figuras 5.17 e 5.18 apresentam os perfis de pressão e velocidade, respectivamente, para alguns instantes de tempo. Pode-se perceber que uma onda de pressão de elevada amplitude atinge a descarga do duto. Esta onda é amortecida ao longo do tempo, produzindo um estado com perfil de pressão praticamente linear em um curto intervalo de tempo (1,5s). Um comportamento semelhante ocorre para a velocidade. Pode-se perceber um elevado pico de velocidade e vazão (Figura 5.22) em torno de 0,5s. Este pico pode acarretar em problemas operacionais. Após algum curto período de tempo a velocidade permanece praticamente constante, sendo a pequena variação fruto do perfil de densidade. Uma observação importante é que a duração destes picos é curta o que os torna mais severo, por exemplo, quando incidindo sobre elementos estruturais.

A Figura 5.19 apresenta uma comparação entre os resultados das simulações do problema de partida de gasoduto no instante 0,1 s. As observações feitas para os problemas de choque, quanto à acurácia, permanecem válidas. Quando comparadas aos limitadores de Roe-Pike e Harten, o esquema MINMOD apresenta uma melhora acentuada. Isto pode ser comprovado pela Figura 5.19 onde o esquema de Roe-Pike

exigiu 800 células para atingir acurácia equivalente àquela apresentada pelo esquema MINMOD com 200 células. As Figuras 5.20 a 5.23 mostram o transiente das variáveis em algumas posições selecionadas para o problema de partida de gasoduto.

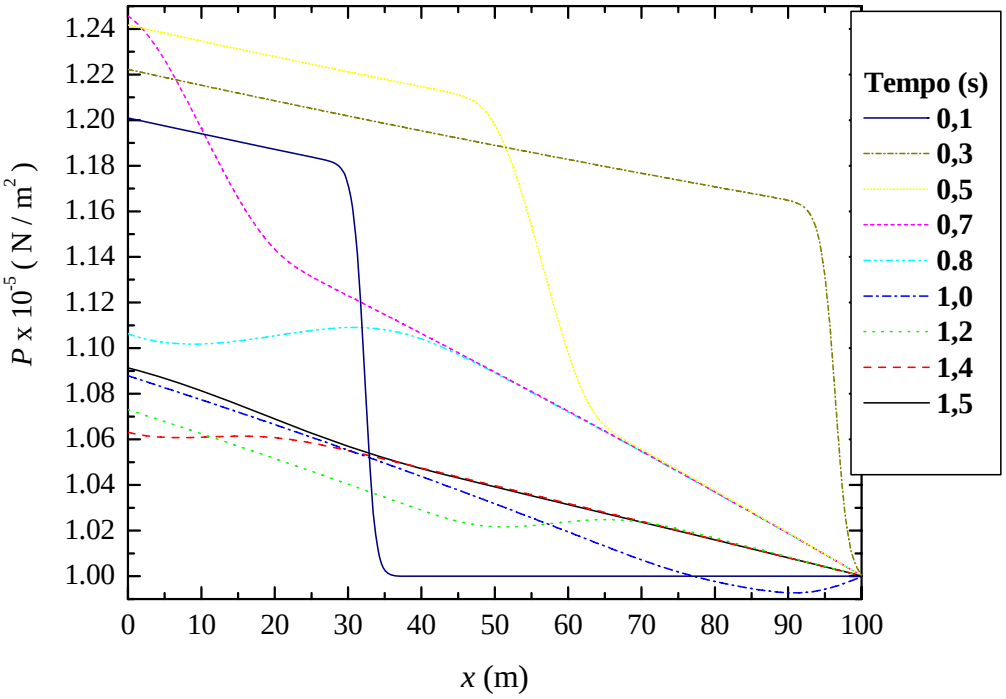


Figura 5.17 – Pressão para o problema de partida de gasoduto entre os instantes 0,1 s e 1,5 s.

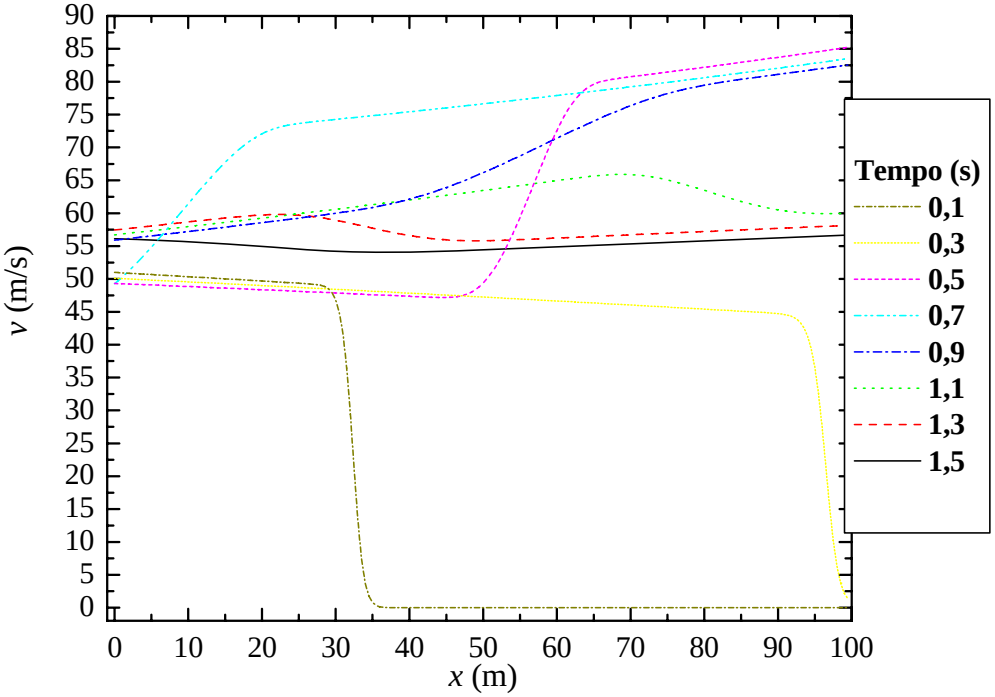


Figura 5.18 – Velocidade para o problema de partida de gasoduto entre os instantes 0,1 s e 1,5 s.

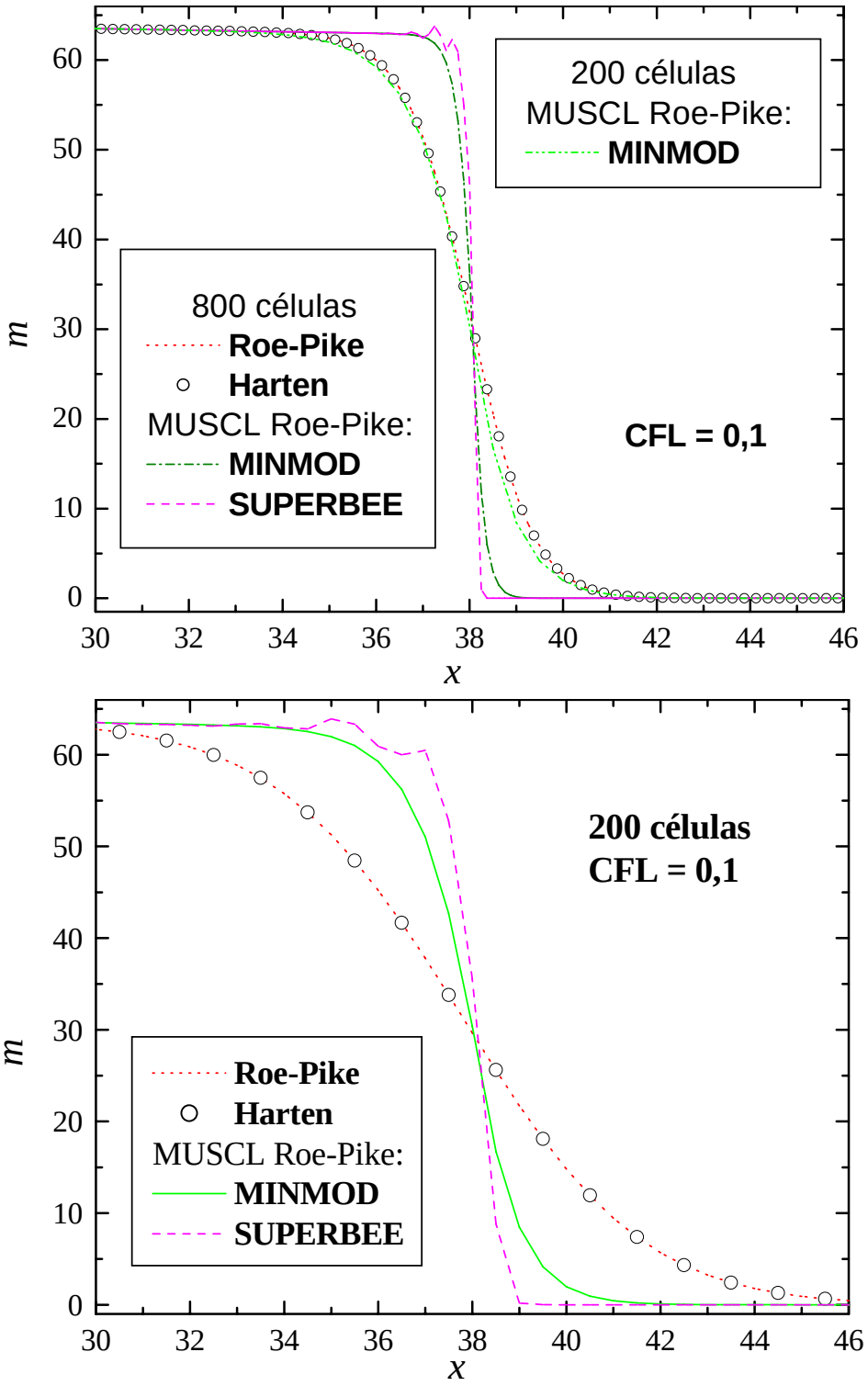


Figura 5.19 - Variação no tamanho da malha para o problema de partida de gasoduto.

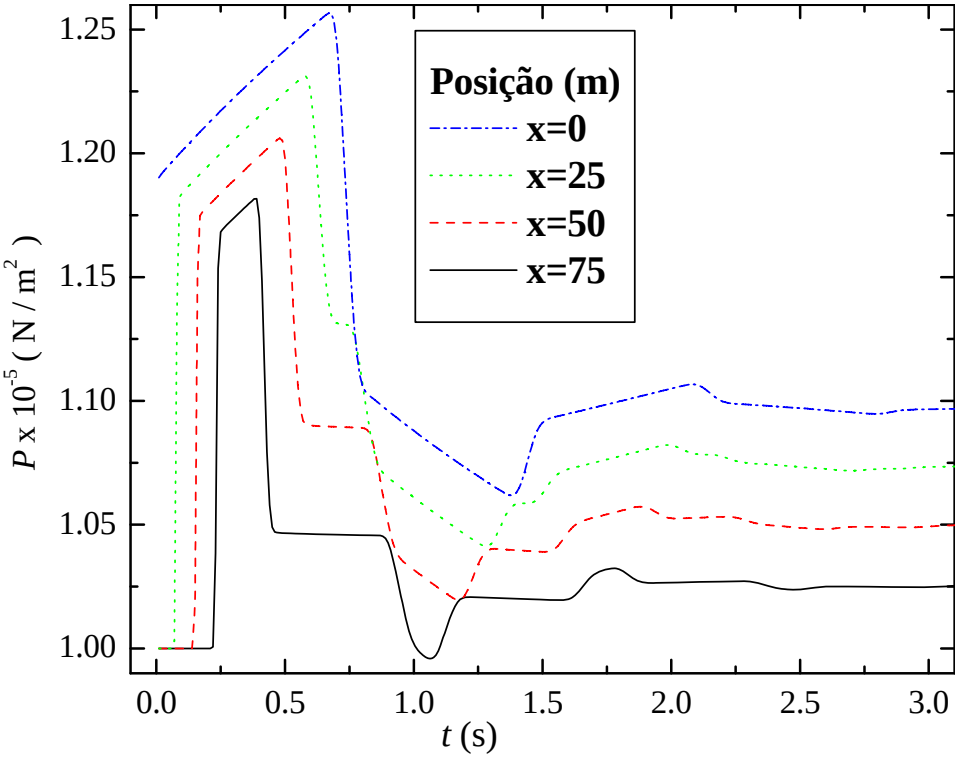


Figura 5.20 - Transiente de pressão em posições selecionadas (problema de partida de gasoduto).

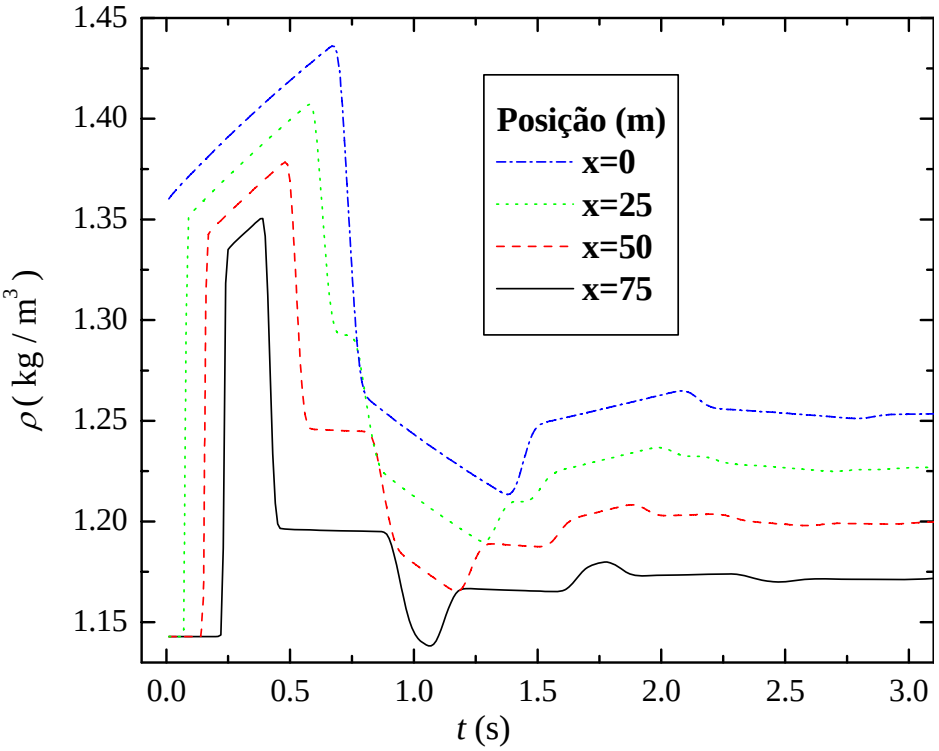


Figura 5.21 - Transiente de densidade em posições selecionadas (problema de partida de gasoduto).

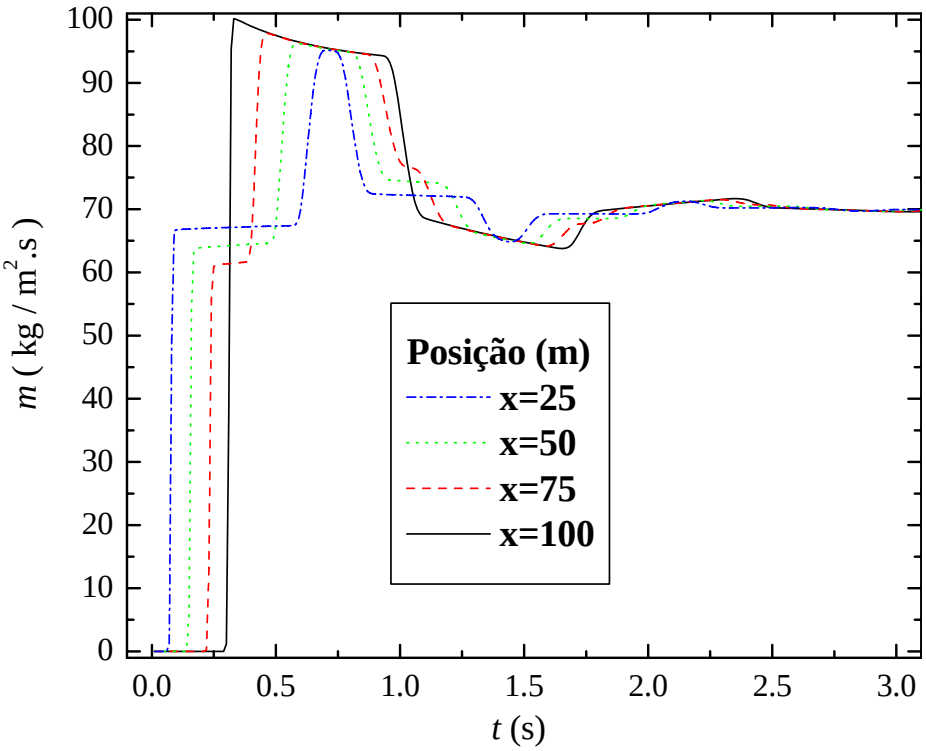


Figura 5.22 - Transiente de vazão mássica em posições selecionadas (problema de partida de gasoduto).

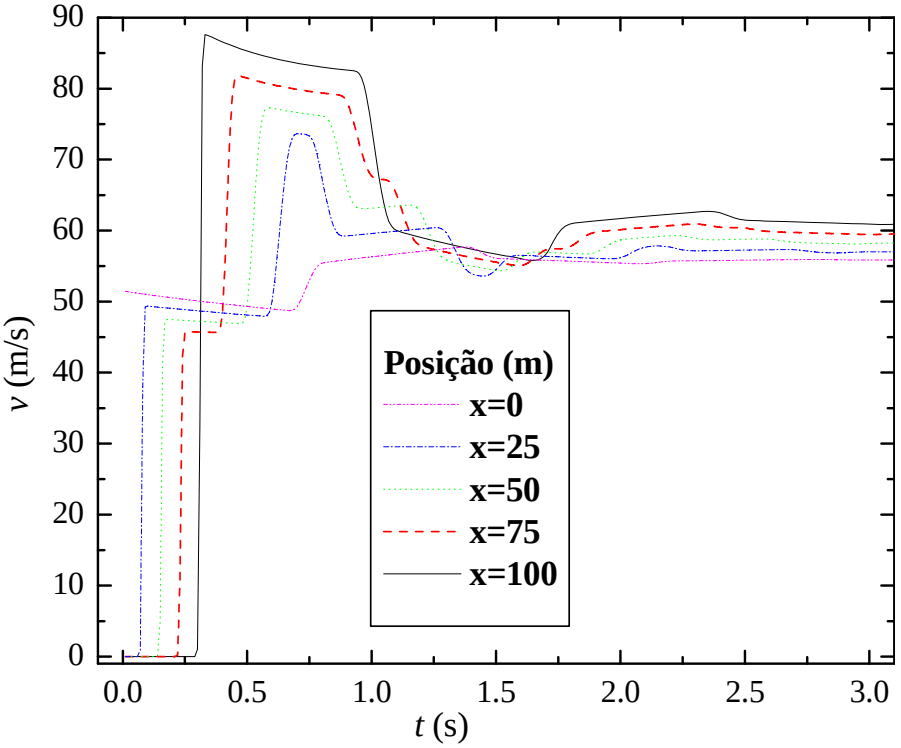


Figura 5.23 - Transiente de velocidade em posições selecionadas (problema de partida de gasoduto).

Um aspecto importante ao se resolver problemas de fluidodinâmica por computador é a conservação de massa. Tanto a limitação na precisão do computador ao lidar com número reais quanto as características do método interferem neste quesito. Novamente, tomemos como exemplo o problema de partida de gasoduto, com gás ideal em condições isotérmicas. Estamos interessados em observar a taxa de perda de massa no estado estacionário, que corresponderá à diferença entre os fluxos mássicos na entrada e na saída do duto. Essa diferença deveria ser zero mas devido às imprecisões citadas ela não o é. Os resultados estacionários para o caso teste 4 são apresentados nas Figuras 5.24 a 5.27. Na Figura 5.25 o fluxo mássico parece ser constante na escala escolhida. Na realidade, o fluxo mássico apresenta uma ligeira queda. A Tabela 5.2 apresenta o resíduo médio baseando-se na solução exata que é dada por um fluxo mássico constante. Pode-se observar que os métodos de Roe-Pike e Harten apresentam resultados similares. O método de Roe-Pike exigiu uma malha com cerca de 3000 células para atingir uma acurácia similar àquela apresentada pelos esquemas MUSCL para uma malha de 400 células.

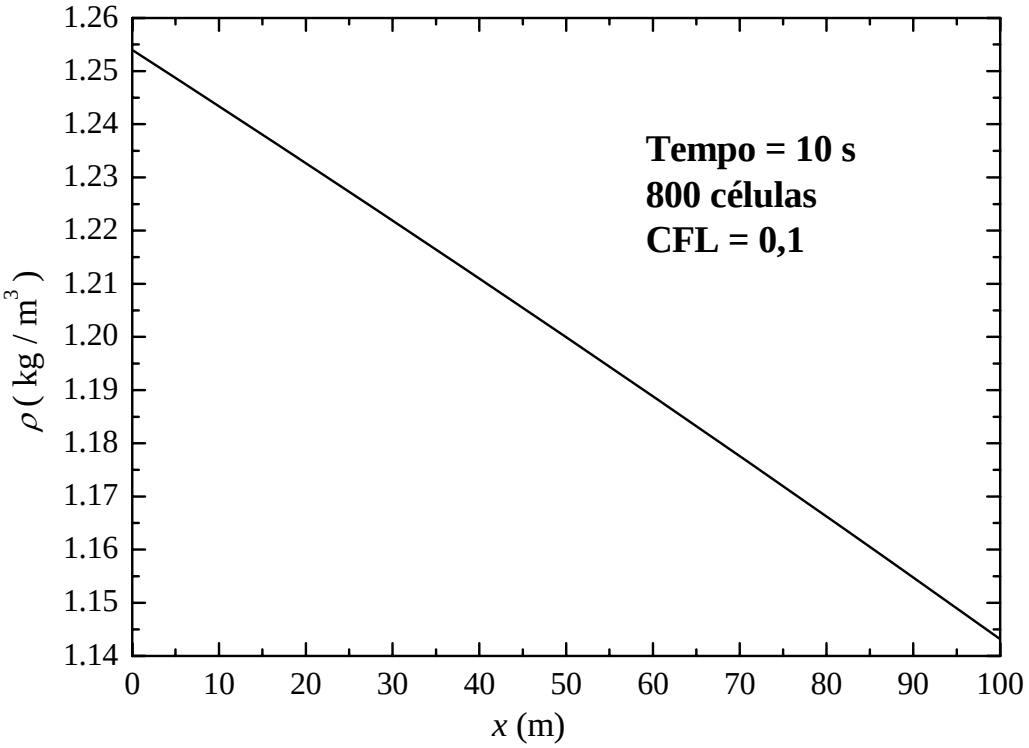


Figura 5.24 – Densidade no estado estacionário para o problema de partida de gasoduto (tempo=10s).

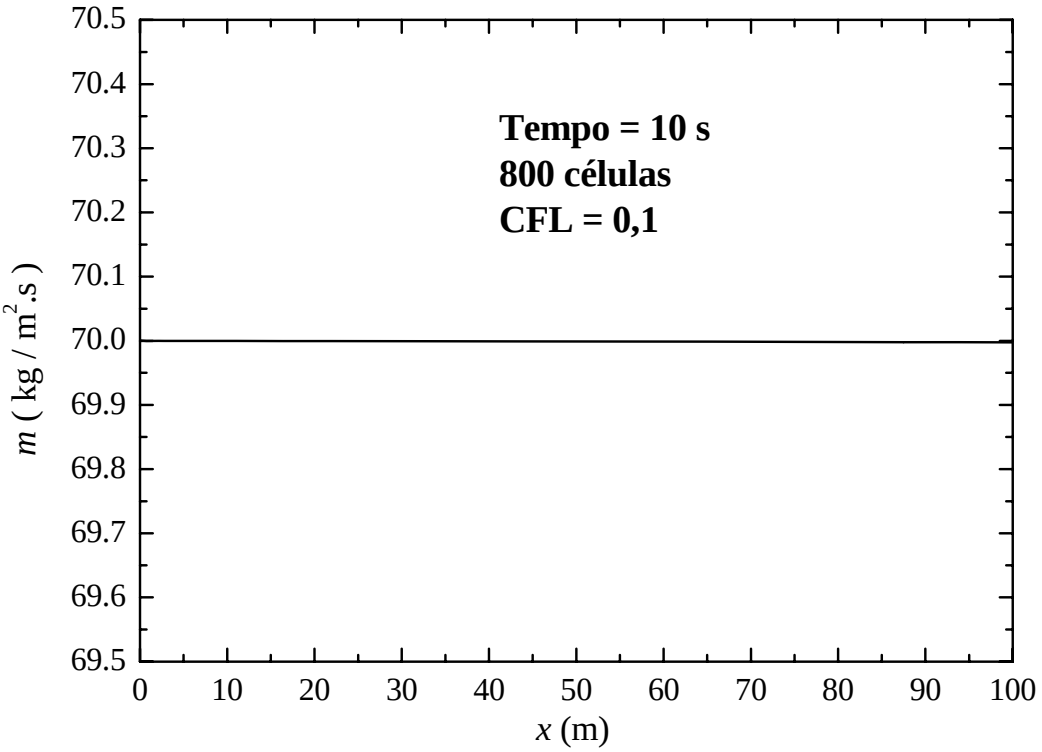


Figura 5.25 – Vazão mássica no estado estacionário para o problema de partida de gasoduto (tempo=10s).

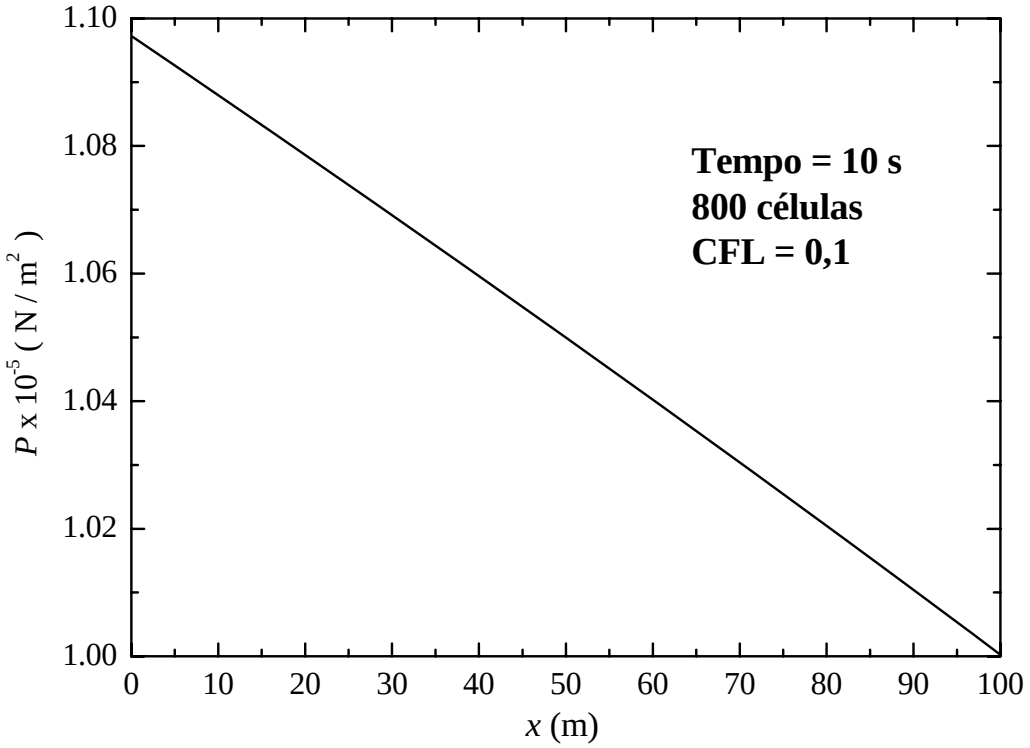


Figura 5.26 – Pressão no estado estacionário para o problema de partida de gasoduto (tempo=10s).

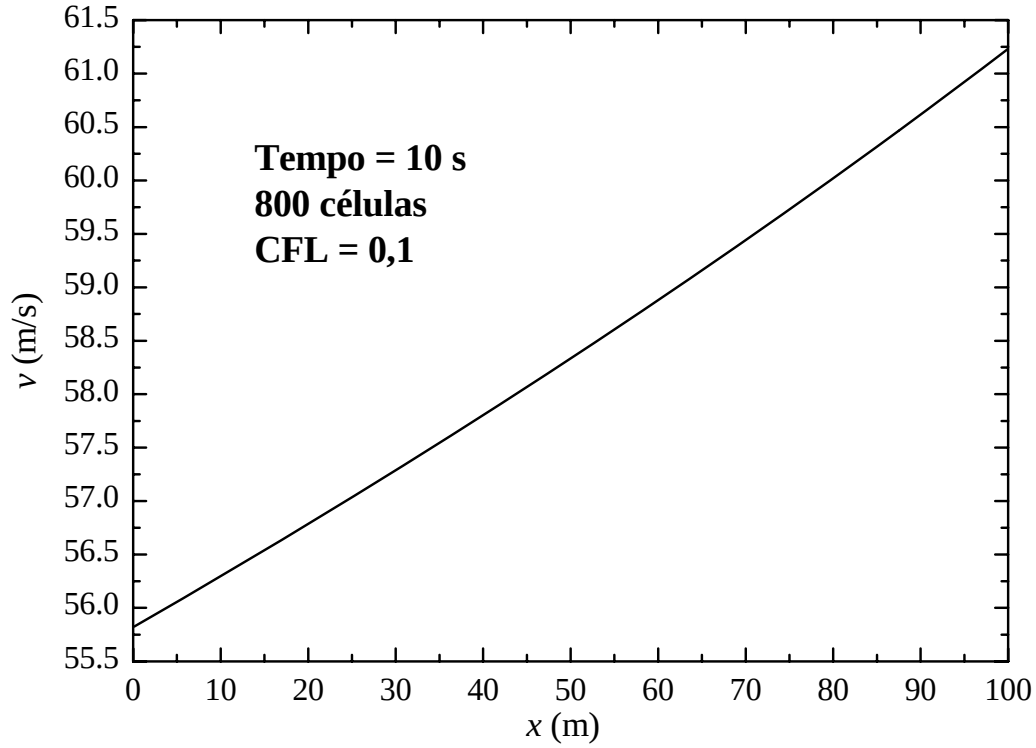


Figura 5.27 – Velocidade no estado estacionário para o problema de partida de gasoduto (tempo=10s)

Tabela 5.2 – Valores médios dos resíduos de balanço de massa.

	$\frac{1}{nc}\sum_{i=1}^{nc}\left\|\Delta m_j\right\|$	
Método \ *nc*	400	1000
Roe-Pike	$3{,}8 \times 10^{-6}$	$6{,}1 \times 10^{-7}$
Harten	$3{,}8 \times 10^{-6}$	$6{,}1 \times 10^{-7}$
MUSCL MINMOD	$6{,}2 \times 10^{-7}$	$1{,}0 \times 10^{-8}$
MUSCL SUPERBEE	$6{,}1 \times 10^{-7}$	$6{,}0 \times 10^{-8}$

nc: número de células

Pode-se observar que o comportamento dos métodos quanto ao resíduo observado está associado ao comportamento durante o transiente. Com isso, quer-se dizer que a análise do estado estacionário apresentou os mesmos efeitos observados no transiente, tanto quanto a superioridade dos esquemas MUSCL quanto à semelhança dos resultados entre os esquemas Roe-Pike e Harten. Diversos CFL's foram utilizados

mostrando que este efeito da perda de massa é pouco sensível a esse número, e por isso, apenas os resultados para um CFL de 0,1 foram apresentados.

Quando estamos interessados em avaliar vários métodos numéricos a serem implementados em um código computacional, devemos observar alguns fatores como a acurácia do método, a generalidade e a robustez. Deve-se analisar também a eficiência computacional, pois um método pode ter boa acurácia, robustez e ser aplicável a vários sistemas, porém, pode exigir um tempo computacional inviável. A eficiência computacional deve ser avaliada segundo o número total de indexações indiretas (IAS) e número de operações de ponto flutuante (FLOPS) requeridos. No entanto, quando desejamos comparar métodos com acurácias diferentes não se pode prever, *a priori*, a diferença entre o número de células que cada método exigirá a fim de obter-se a mesma acurácia.

Um método de primeira ordem pode, a princípio, exigir um menor número de IAs e FLOPS por passo temporal por célula que um outro método de segunda ordem. No entanto, o mesmo poderá ser menos eficiente computacionalmente por exigir um número maior de células e, adicionalmente, um menor passo temporal para atingir dada acurácia. Como não é possível prever quantas células um método necessitará para atingir a acurácia de outro, deve-se avaliar tanto o número de IAs e FLOPS por passo de tempo por célula de cada método (característico do método), quanto resolver alguns casos a fim de comparar o total de IAs e FLOPS para uma dada acurácia.

Deve-se lembrar que essa relação entre o tamanho das malhas é relativo ao problema em questão e não pode ser generalizado. Um erro comum encontrado na literatura é a comparação de métodos a partir do tempo de CPU. Esse parâmetro serve somente para ter-se uma ligeira idéia do tempo computacional exigido mas tem pouca utilidade prática. Por exemplo, dizer-se que um cômputo exige tantos segundos de CPU em um PENTIUM não significa nada para um usuário de CRAY. E mesmo para um usuário de um PENTIUM, não é possível saber se o código utilizado está otimizado, ou seja, um método com menos IAs e menos FLOPS pode exigir um tempo computacional maior por ineficiência do programador. Diferentemente, um programador seja de

PENTIUM ou de CRAY estará certo de que o método com menos IAs e FLOPS deverá, para uma mesma malha e mesmo passo de integração, exigir um tempo menor de computação.

Os algoritmos apresentados possuem diversas etapas idênticas sendo importante, para efeitos de comparação, apenas o número de IAs e FLOPS das etapas diferentes. Na realidade, as únicas diferenças entre o limitador de Roe e o de Harten encontram-se no cálculo de $\tilde{\beta}$ na equação 3.38. Durante o *loop* nas células, deve-se ter em mente que as grandezas calculadas com os valores de uma dada célula serão utilizadas em mais de um valor do contador. Por exemplo, os valores de $\tilde{\alpha}$ calculados para uma dada face serão utilizados no cálculo dos balanços para mais de um volume. Sendo assim, é preferível armazenar os valores de todas as grandezas calculadas com os valores de cada célula ou face, evitando a repetição de diversos FLOPS em detrimento de um aumento do número de indexações indiretas e uso de memória RAM. A contagem do número de IAs para o cálculo de $\tilde{\beta}$ deve considerar a indexação indireta X(vol) para todas as grandezas X que são armazenadas por célula ou face. No caso do esquema MUSCL-Hancock, a diferença entre o número de IAs e FLOPS em relação ao limitador de Roe, fica por conta das etapas de reconstrução de dados. O esquema Roe-Pike foi analisado sem a correção entrópica em virtude desta ser uma função da EdE adotada, não tendo um número de FLOPS e IAs fixo. A Tabela 5.3 indica o número total de IAs e FLOPS para o cálculo de $\tilde{\beta}$ para os limitadores de Roe e Harten, e para o cálculo de $\tilde{\beta}$ (Tabela 3.2) e dos dados reconstruídos do esquema MUSCL-Hancock.

Pode-se observar que o número de operações de ponto flutuante é muito maior no esquema MUSCL-Hancock, o que implica que o mesmo deve levar um tempo de CPU cerca de $28nv/(17nv+2nv^2)$ vezes maior que o de Harten para uma dada malha. Na realidade, o número de IAs compensa parte desses FLOPS, embora os vetores sejam acessados ordenadamente, no caso 1D, diminuindo a importância dos IAs. Além disso, deve-se salientar que tanto o limitador de fluxo de Harten como o esquema MUSCL-Hancock possuem cláusulas de "if" que são bastante ineficientes, e esse efeito não pode ser percebido na tabela, embora essas clausulas possam compensar muitos FLOPS e IAs a mais que outro algoritmo.

Como foi mostrado anteriormente, o estado estacionário do caso teste 4 apresenta uma pequena perda de massa, permitindo que o fluxo mássico não seja constante. Naquele item, foi mostrada a diferença entre a acurácia dos esquemas em estudo para diversas malhas. Agora, a estratégia consiste em aumentar as malhas para o limitador de Roe-Pike e Harten até que os mesmos atinjam a acurácia do esquema MUSCL-Hancock com 400 células. O número de IAs e FLOPS são então comparados para essas malhas que produzem os mesmos resultados. A Tabela 5.3 apresenta o número de células utilizado para cada método, o total de FLOPS e IAs, e uma estimativa do tempo de CPU em segundos em processador PENTIUM 933Mhz.

Tabela 5.3 – Total de IAs e FLOPS e tempo de CPU para cada algoritmo no cálculo de $\tilde{\beta}$ e na reconstrução de dados (PENTIUM III 933Mhz computer) para o problema de partida em gasodutos (nv=2).

	Roe-Pike	**Harten**	**MUSCL**
	cálculo de $\tilde{\beta}$	**cálculo de $\tilde{\beta}$**	**cálculo de $\tilde{\beta}$ e reconstrução de dados**
IA's	2 *nv nc ns*	11 *nv* (*nc* + 1) *ns*	10 *nv* (*nc* + 1) *ns*
FLOPS	(2 *nv* + 2 nv^2) *nc ns*	(17 *nv* +2 nv^2) (*nc*+1) *ns*	28 *nv* (*nc* + 1) *ns*
	Total para dada malha e número de passos de tempo para o caso teste 4		
nc, ns	**3200, 800000**	**3200, 800000**	**400, 100000**
IA's	$1{,}02\times10^{10}$	$5{,}63\times10^{10}$	$8{,}02\times10^{8}$
FLOPS	$3{,}07\times10^{10}$	$1{,}08\times10^{11}$	$2{,}25\times10^{9}$
CPU time (s)	11263	13111	188

(*nv* é o número de variáveis do problema, *nc* é o número de células internas da malha e *ns* é o número de passos temporais.)

Pode-se observar que, se o mesmo número de passos de tempo fosse usado para todos os métodos, o número de FLOPS em uma malha de 400 células para o MUSCL seria 40% menor que o de Roe-Pike e Harten com 3200 células (Roe-Pike=(2x2+2x2^2).3200.*ns*, MUSCL=28.(400+1).*ns*). No entanto, para um dado CFL, o maior passo espacial proporcionará passos de tempo bem maiores para o MUSCL,

reduzindo o número de passos de tempo necessários e aumentando enormemente essa vantagem. Isso mostra a vantagem do uso desse tipo de extensão de métodos a segunda ordem.

5.3.2 –Gases Reais

Os métodos HLFW (método híbrido de Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff), MUSCL AUSM+ e MUSCL VFRoe foram comparados, em termos de acurácia e custo computacional, para três casos testes encontrados na literatura com a equação de estado de Van der Waals. O esquema MINMOD foi adotado para a reconstrução de dados porque o SUPERBEE apresenta algumas oscilações próximas às descontinuidades. Os casos testes 1, 2 e 3 para gases reais são problemas de choque definidos como problemas de Riemann com o vetor $\underline{w}=(\rho,v,p)$ dados para o lado esquerdo e direito. Estes estados são dados por $\underline{w}^L$= (100kg/m^3; 0 m/s; 115931328,765 Pa) e $\underline{w}^R$ = (10 kg/m^3; 0 m/s; 6935545,80532 Pa) para o caso teste 1 (Saurel *et al.*, 1994), $\underline{w}^L$ = (250; 0; 35966778) e $\underline{w}^R$ = (166,6; 0; 27114795) para o caso teste 2 (Buffard *et al.*, 2000) e $\underline{w}^L$ = (1,818; 0; 3) e $\underline{w}^R$ = (0,275; 0; 0,575), para o caso teste 3 (Guardone e Vigevano, 2002). Os parâmetros adicionais para a EdE são dados pelo vetor (a_{vw}, b_{vw}, δ_{vw}) que é igual a (0,138; 3,258×10^{-5}; 0,4), (1684,54; 1,692×10^{-2}; 0,3292) e (3; 0,333; 0,3292) para os casos teste 1, 2 e 3, respectivamente.

As figuras 5.28 a 5.39 comparam os métodos para os casos teste 1 a 3. Uma malha de 200 células foi usada para todos os métodos, cujos resultados podem ser comparados com os obtidos em uma malha de 2000 células para o MUSCL AUSM+. Como é de interesse avaliar a acurácia e eficiência dos métodos, um zoom foi dado nas regiões de maior desvio. As soluções para todas as regiões podem ser encontradas nas referências originais.

Para o caso teste 1, a solução do MUSCL VFRoe apresentou maiores desvios para *v* e *E*. Além disso a amplitude das ondas também apresentou grandes desvios, conservando-os nas regiões vizinhas às regiões de valores constantes. Para todos os casos teste, os resultados do HLFW foram pouco abaixo daqueles obtidos pelo MUSCL AUSM+. Para a densidade, o HLFW levou a uma predição pobre da descontinuidade de

contato em torno da região x=0,29. Como pode ser observado pelas figuras 5.28 a 5.31, os resultados do MUSCL AUSM+ foram os melhores para este caso.

Para o caso teste 2, o MUSCL AUSM+ e MUSCL VFRoe apresentaram oscilações numéricas perto das descontinuidades, com amplitudes menores para o MUSCL AUSM+ mas com maiores freqüências. Ambos apresentaram oscilações espúrias na região $250<x<300$. Essas oscilações são causadas pela reconstrução MUSCL, pois ao usar-se a versão de primeira ordem dos métodos, VFRoe e AUSM+, as oscilações desaparecem, embora a difusão numérica aumente. Buffard *et al.* (2000) usaram a estratégia MUSCL para vários casos de gás ideal mas não a usaram, ou não incluíram, para o caso teste 2. Isso pode ter ocorrido devido a essas oscilações. Para este caso teste, todos os métodos apresentaram bons resultados, com alguma vantagem para o MUSCL AUSM+. No entanto, o HLFW apresentou menores oscilações. Isso mostra que o HLFW corretamente adiciona difusão numérica aos casos nos quais oscilações apareceriam devido à ordem do método. Os resultados são apresentados nas figuras 5.32 a 5.35.

No caso teste 3, o método HLFW apresentou uma descontinuidade na parte central da onda de rarefação. Isto se deve ao método HLFW ter uma relaxação em relação à desigualdade entrópica. Sendo assim, uma violação entrópica ocorre no ponto sônico já observado por De Vuyst (2004) para gás ideal. Vale lembrar que o método de Roe original apresenta o mesmo desvio (Toro, 1999), o que foi eliminado com a correção de Harten-Hymann. O HLFW método também apresentou maiores desvios nas regiões de ondas mistas (G<0, Figura 5.40). O método de VFRoe apresentou oscilações numéricas similares àquelas observadas no caso teste 2, o que não ocorreu com o MUSCL AUSM+, que apresentou difusão numérica um pouco maior. Os resultados podem ser observados nas figuras 5.36 a 5.39.

A acurácia dos métodos foi comparada ao método de MUSCL AUSM+ de 2000 células para as quais os métodos de MUSCL VFRoe e MUSCL ASUM+ apresentam os mesmos resultados. A Tabela 5.4 apresenta os valores absolutos máximo e médio dos resíduos para o caso teste 3 para cada um dos métodos, para a velocidade, densidade e

energia. MUSCL VFRoe e MUSCL AUSM+ apresentaram resultados semelhantes para uma dada malhas, mas o MUSCL AUSM+ foi um pouco superior, porém, com maiores oscilações do que o MUSCL VFRoe. No entanto, o MUSCL AUSM+ apresentou maior difusão numérica que o MUSCL VFRoe nas regiões de choque, como pode ser visto nas figuras 5.36 a 5.39. Estas regiões fizeram o resíduo máximo do MUSCL AUSM+ maior do que o resíduo do MUSCL VFRoe, com exceção da densidade. No entanto, em uma vasta região próximo a x=0,5, o MUSCL VFRoe apresentou resíduos maiores que o MUSCL AUSM+. Esta região fez com que o resíduo médio para o MUSCL VFRoe fosse maior do que os valores para o MUSCL AUSM+. O método HLFW foi menos acurado do que os outros métodos. A solução daquele método apresentou maior difusão numérica do que o MUSCL VFRoe, porém menores oscilações do que o MUSCL AUSM+. No entanto, o HLFW apresentou maiores desvios nas regiões de ondas mistas e nas descontinuidades de contato.

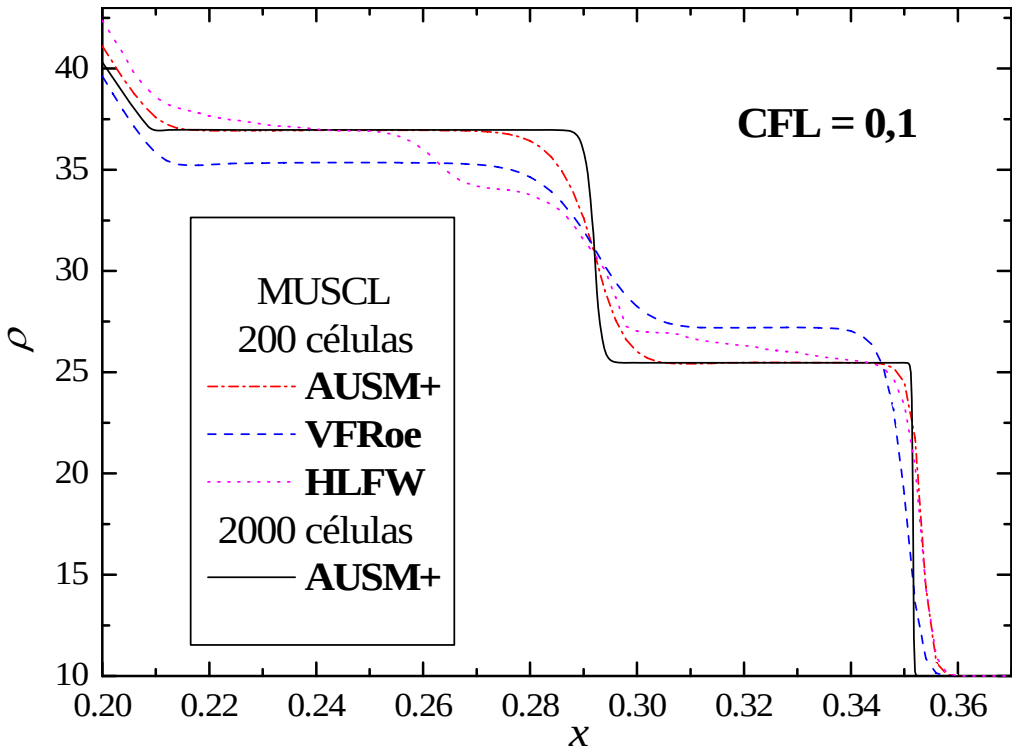


Figura 5.28 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 1 (t=8x10^{-5}s).

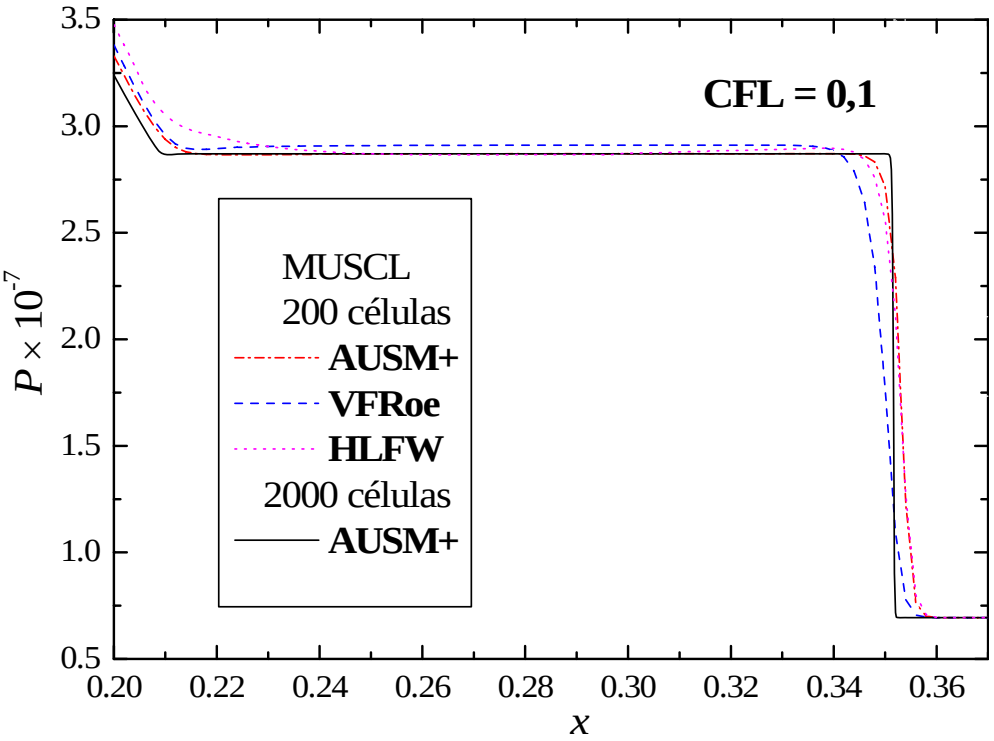


Figura 5.29 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 1 (t=8x10^{-5}s).

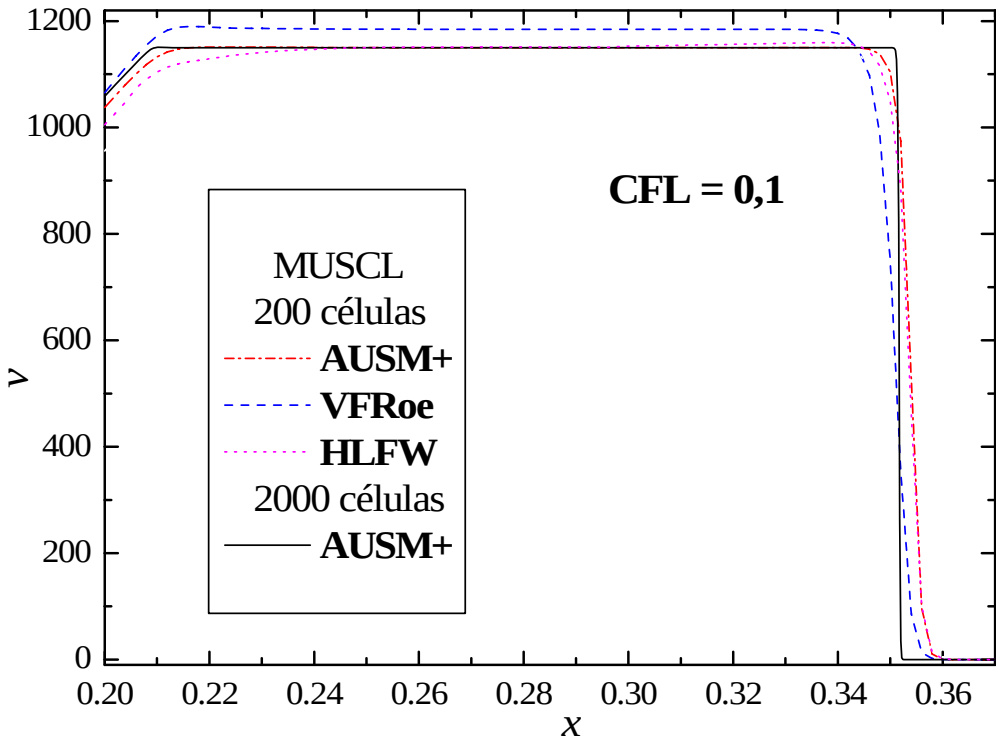


Figura 5.30 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 1 (t=8x10^{-5}s).

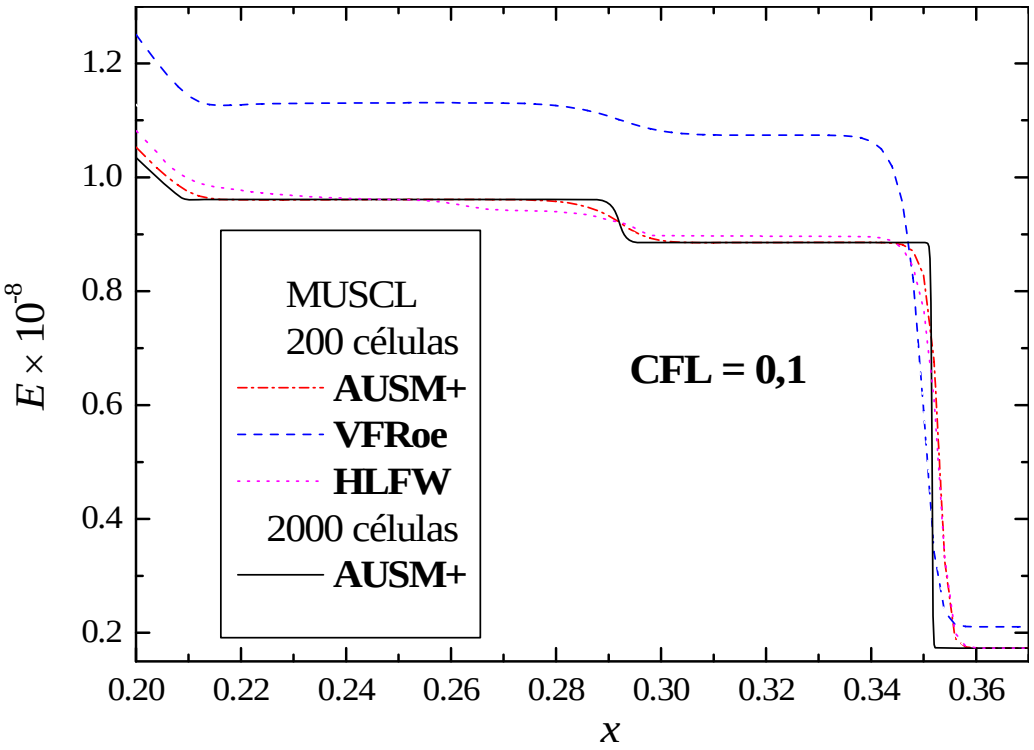


Figura 5.31 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 1 (t=8x10^{-5}s).

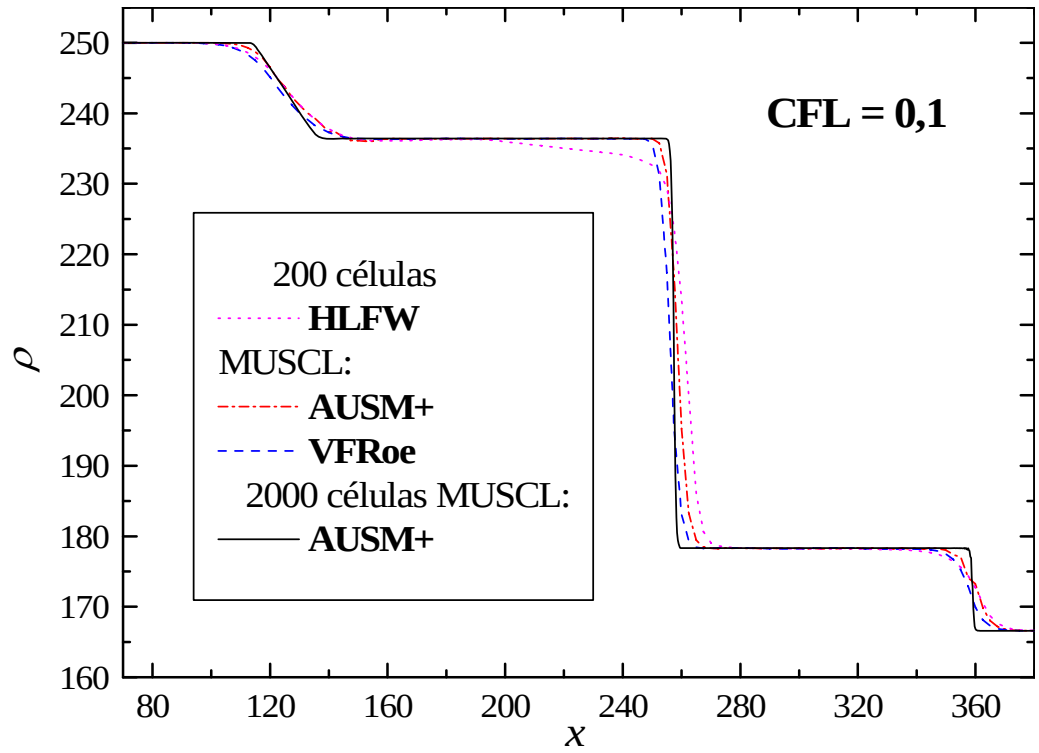


Figura 5.32 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 2 (t=0,2s).

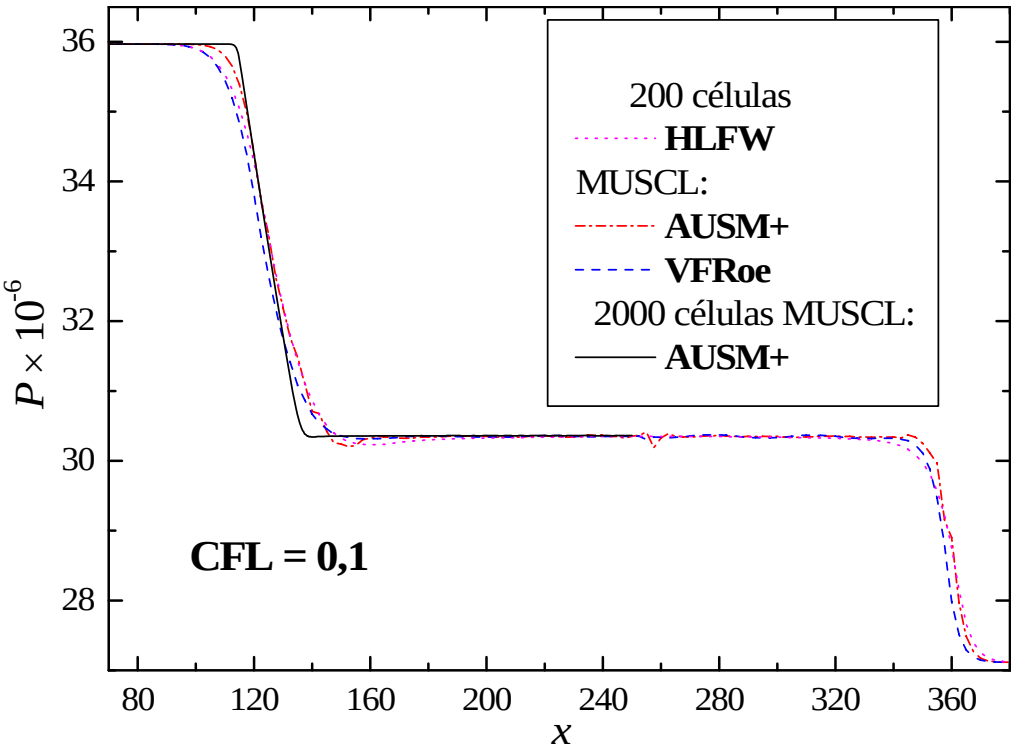


Figura 5.33 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 2 (t=0,2s).

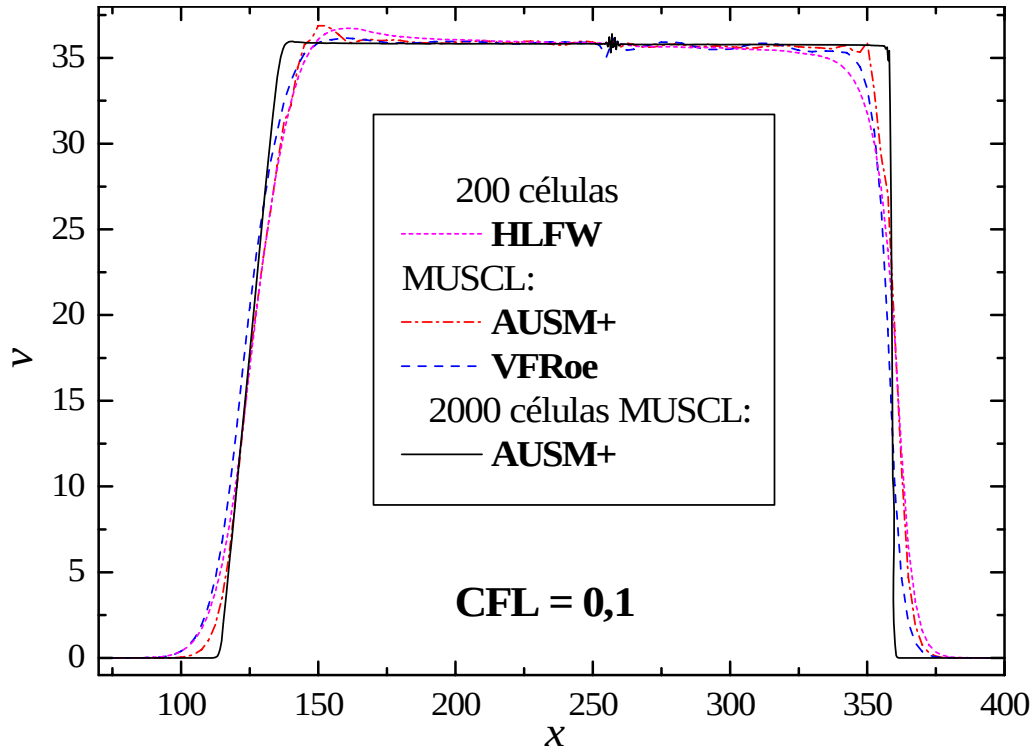


Figura 5.34 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 2 (*t*=0,2s).

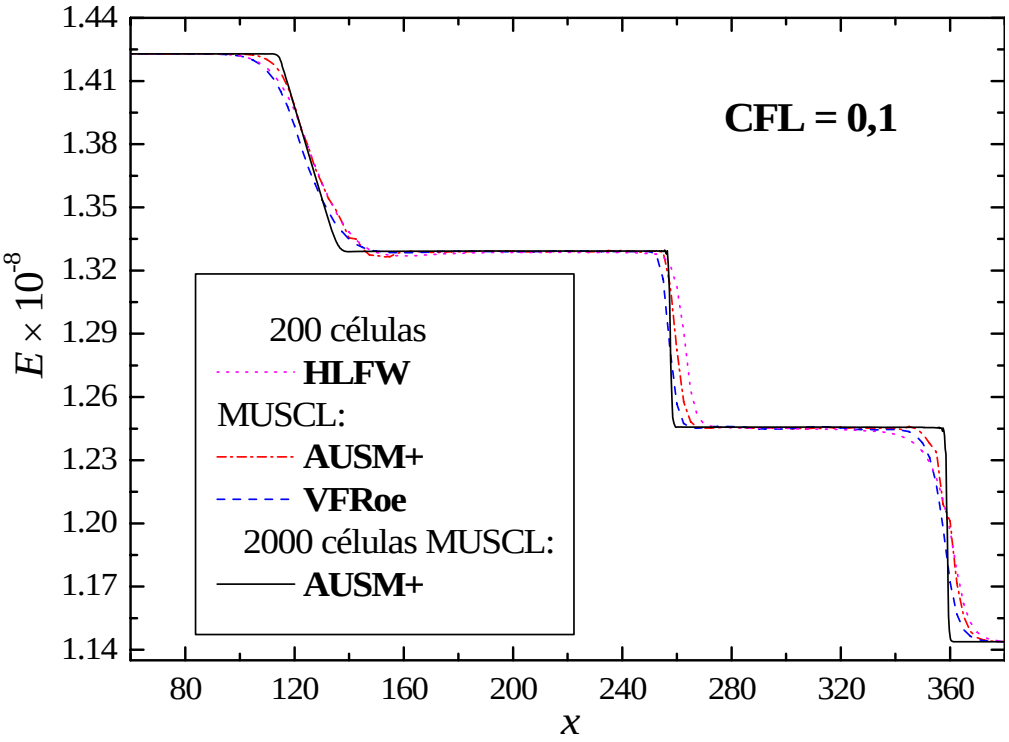


Figura 5.35 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 2 (t=0,2s).

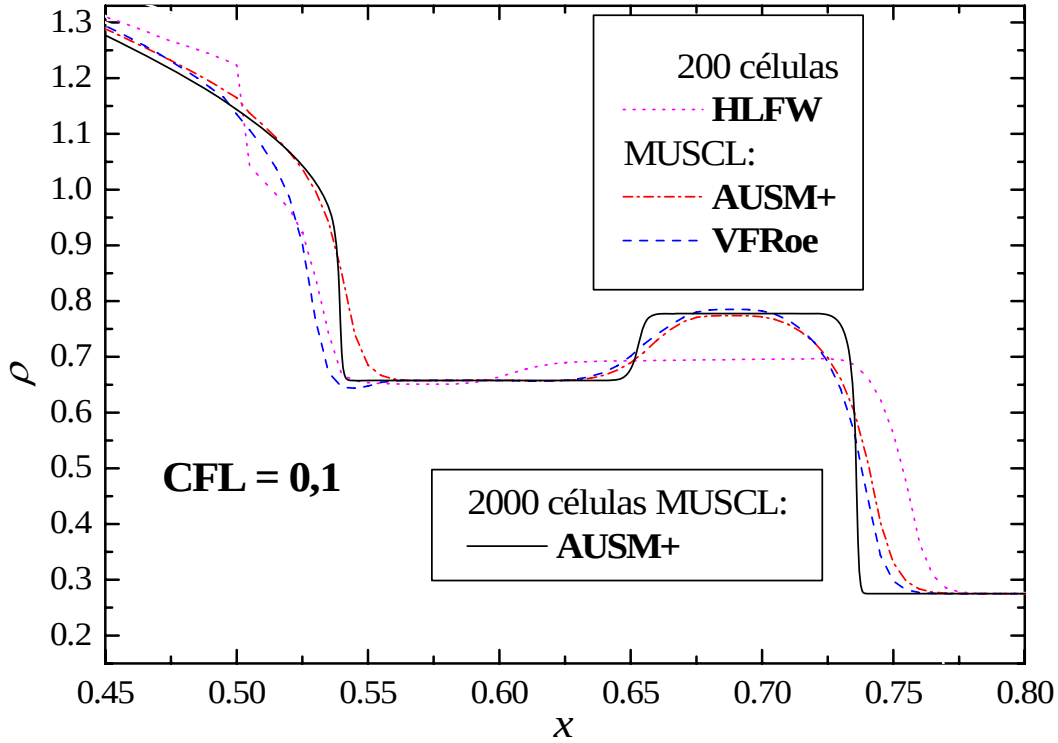


Figura 5.36 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 3 (t=0,15s).

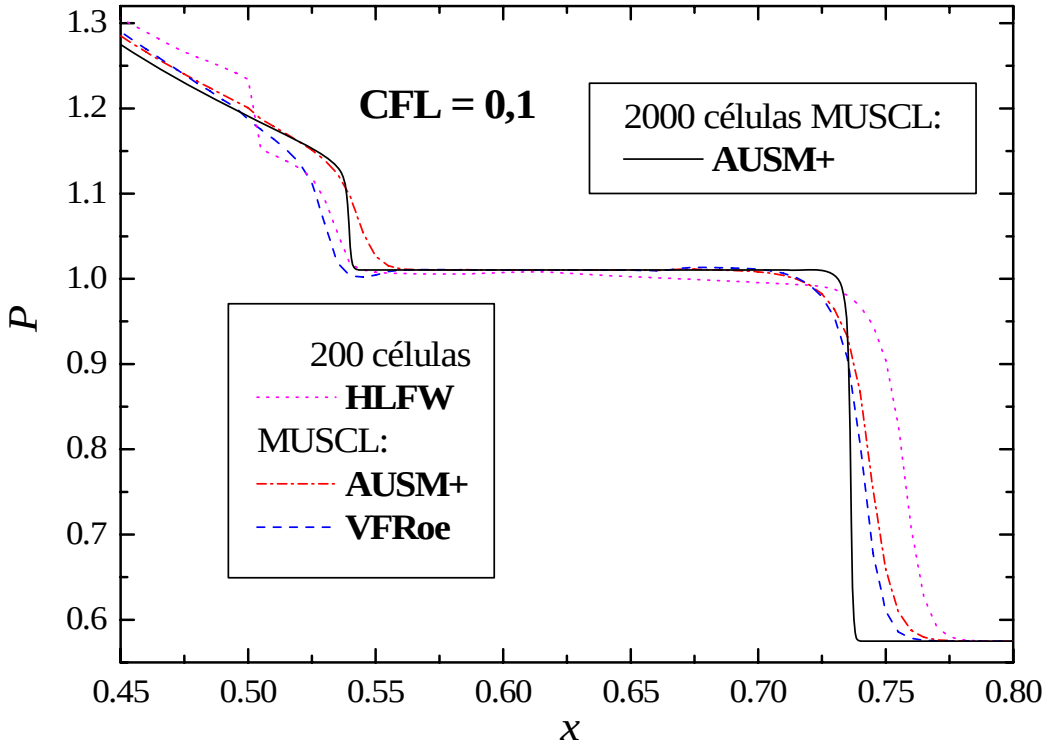


Figura 5.37 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 3 (t=0,15s).

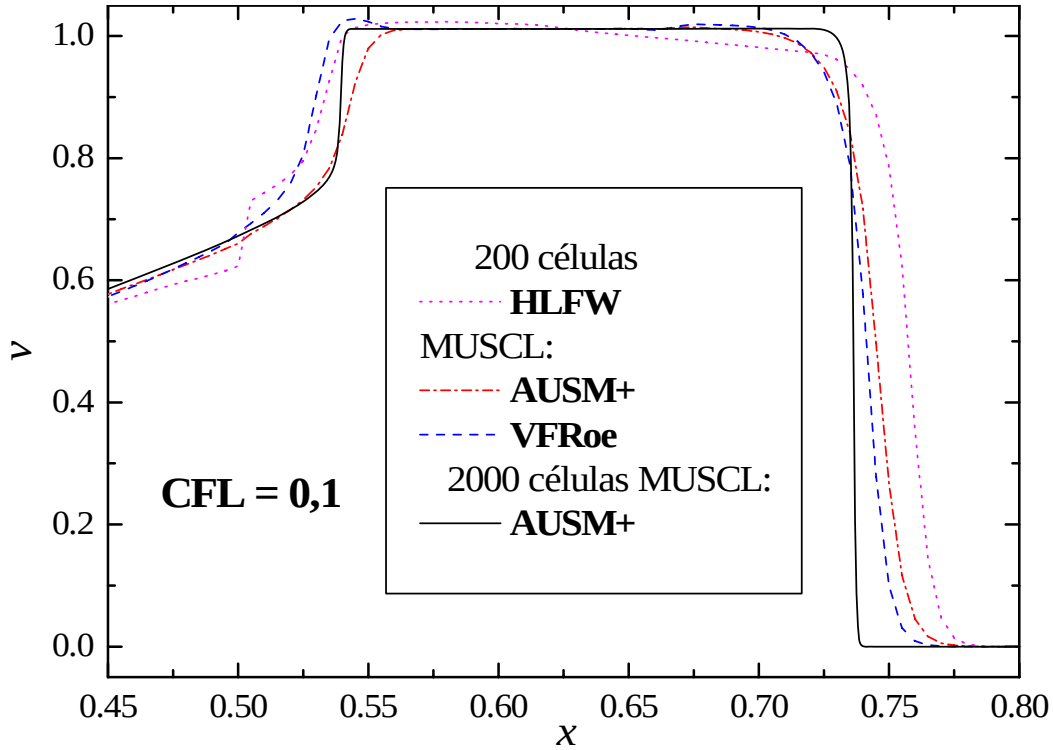


Figura 5.38 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 3 (t=0,15s).

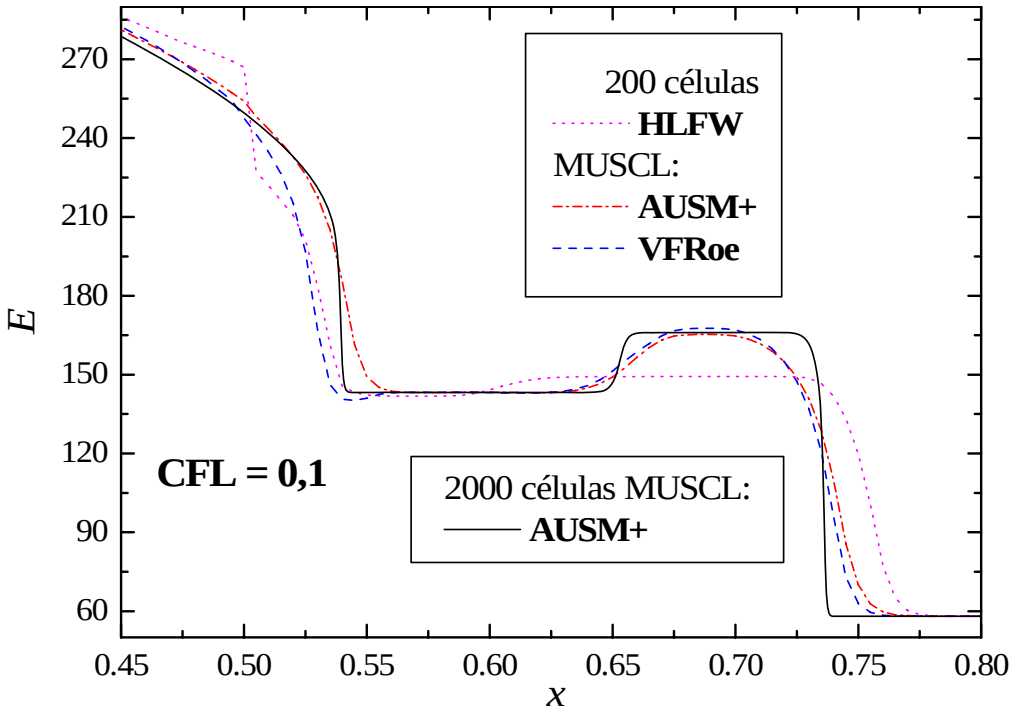


Figura 5.39 – Comparação dos métodos MUSCL VFRoe, MUSCL AUSM+ e HLFW para o caso teste 3 (t=0,15s).

A Figura 5.40 mostra a derivada fundamental para os casos teste 1, 2 e 3. Para o caso teste 3 onde a derivada fundamental apresenta mudança de sinal levando a ondas mistas, os métodos de MUSCL AUSM+ e MUSCL VFRoe foram capazes de capturar a elevação da densidade na região x=0,7. O método HLFW apresentou grande desvio nessa região.

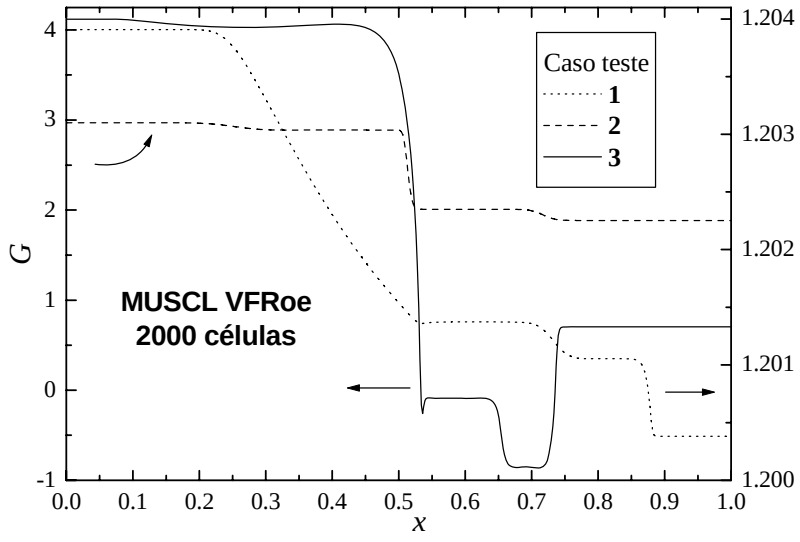


Figura 5.40 – Derivada fundamental para os casos teste 1 a 3 (t=0,15s).

Para comparação do tempo de CPU, o caso teste 3 foi considerado. Para malhas refinadas, os métodos tendem a ter uma acurácia similar. Para se obter acurácias comparáveis para pequenas malhas, uma malha de 200 células para o MUSCL AUSM+ exigiu uma malha de 230 e 700 células para os métodos MUSCL VFRoe e HLFW, respectivamente. Os resultados para o tempo de CPU relativos ao gasto pelo MUSCL AUSM+ são apresentados na Tabela 5.4. Os mesmos valores são apresentados na Tabela 5.4 para malhas de 5000 células, na qual os métodos também apresentam acurácia equivalentes. Para esta malha refinada, o HLFW necessitou de 5,6 vezes mais tempo de CPU do que o MUSCL AUSM+, porém, o HLFW foi 2 vezes mais rápido do que o VFRoe. Para malhas menores com mesma acurácia, o MUSCL AUSM+ foi tremendamente mais rápido do que os outros métodos e o MUSCL VFRoe foi cerca de 9 vezes mais rápido que o HLFW, invertendo o resultado. Normalmente, se está interessado em malhas menores que possam ser usadas para várias execuções, tempo longos e na aplicação a problemas com mais de uma dimensão.

Tabela 5.4 – Valores médio e máximo do resíduo absoluto para a densidade, velocidade e energia, e tempo de CPU para o caso teste 3 com CFL=0.1.

	Resultados para 100, 200 e 500 células		
	VFRoe	AUSM+_M	HLFW
resíduo médio ρ	0,029; 0,015; 0,006	0,017; 0,009; 0,004	0,053; 0,035; 0,017
resíduo max. ρ	0,39; 0,32; 0,26	0,28; 0,24; 0,22	0,39; 0,40; 0,40
resíduo médio *v*	0,032; 0,016; 0,006	0,027; 0,013; 0,006	0,07; 0,04; 0,017
resíduo max. *v*	0,65; 0,58; 0,52	0,78; 0,72; 0,68	0,91; 0,93; 0,91
resíduo médio *E*	5,6; 2,8; 1,2	5,3; 2,6; 1,2	11,5; 7,5; 3,5
resíduo max. *E*	70; 62; 57	79; 70; 65	86; 87; 86
	Malhas com acurácia comparáveis | malha refinada		
nc	230 | 5000	200 | 5000	700 | 5000
Tempo de CPU relativo	17,6 | 9153	1 | 667	159,8 | 3740

Finalmente, o problema proposto por Saurel (1994) (caso teste 1) foi modificado, reduzindo-se a temperatura, e resolvido usando as EdE's de Van der Waals e Redlich-Kwong. Além disso, as propriedades do metano foram adotadas. Essas propriedades são dadas na Tabela 5.5. A temperatura de referência é aquela na qual a entalpia de referência é calculada. As condições de contorno apresentadas anteriormente são correspondentes a temperaturas dadas pela EdE de Van der Waals. No entanto, o mesmo vetor de estado (p,v,T) não é válido para ambas as EdE's. Desta forma, foi escolhido manter-se a temperatura e modificar as densidades extremas. O problema em questão ficou dado por: $\underline{w}^L$ = (89,872 kg/m^3; 0 m/s; 115931328,765 Pa) e $\underline{w}^R$ = (8,775 kg/m^3; 0 m/s; 6935545,80532 Pa) para a EdE de Van der Waals e $\underline{w}^L$ = (93,71 kg/m^3; 0 m/s; 115931328,765 Pa) e $\underline{w}^R$ = (8,783 kg/m^3; 0 m/s; 6935545,80532 Pa) para a EdE de Redlich-Kwong, onde $\underline{u}$=(ρ,v,p). Estes estados correspondem a temperaturas de 2000 K e 1500 K para os estados à esquerda e direita, respectivamente.

Tabela 5.5 – Propriedades do Metano.

P_C	46,0x10^5 Pa
T_C	190,6 K
R	519,625
$A1$, $A2$, $A3$, $A4$ $Cp(T) = A1 + A2.T+A3.T^2+A4.T^3$	19,25; 5,213x10^{-2}; 1,197x10^{-5}; -1,132x10^{-8}
$Tref$	298,2 K
a_{RK}, b_{RK}	$\frac{0,4278R^2T_C^{2,5}}{P_C}$, $\frac{0,0867RT_C}{P_C}$

As figuras 5.41 a 5.44 apresentam a comparação entre as equações de estado cúbicas de Van der Waals e de Redlich-Kwong. As oscilações observadas para a equação de Van der Waals para o método HLFW, permanecerem para a equação de Redlich-Kwong. O método MUSCL AUSM+ não apresentou oscilações para as duas EdEs. No entanto, diferenças marcantes são observadas entre os resultados para as EdE

de Redlich-Kwong e de Van der Waals, e podem ser vistas tanto para o método HLFW quanto para o método MUSCL-AUSM+. A temperatura é uma variável particularmente interessante, neste caso, devido a pequenas variações de densidade produzirem grandes variações de temperatura, principalmente para a equação de Van der Waals. Observando-se a forma da EdE de Redlich-Kwong pode-se perceber que aumentos da densidade (redução do volume específico) produzirão menores aumentos de temperatura (para uma pressão fixa).

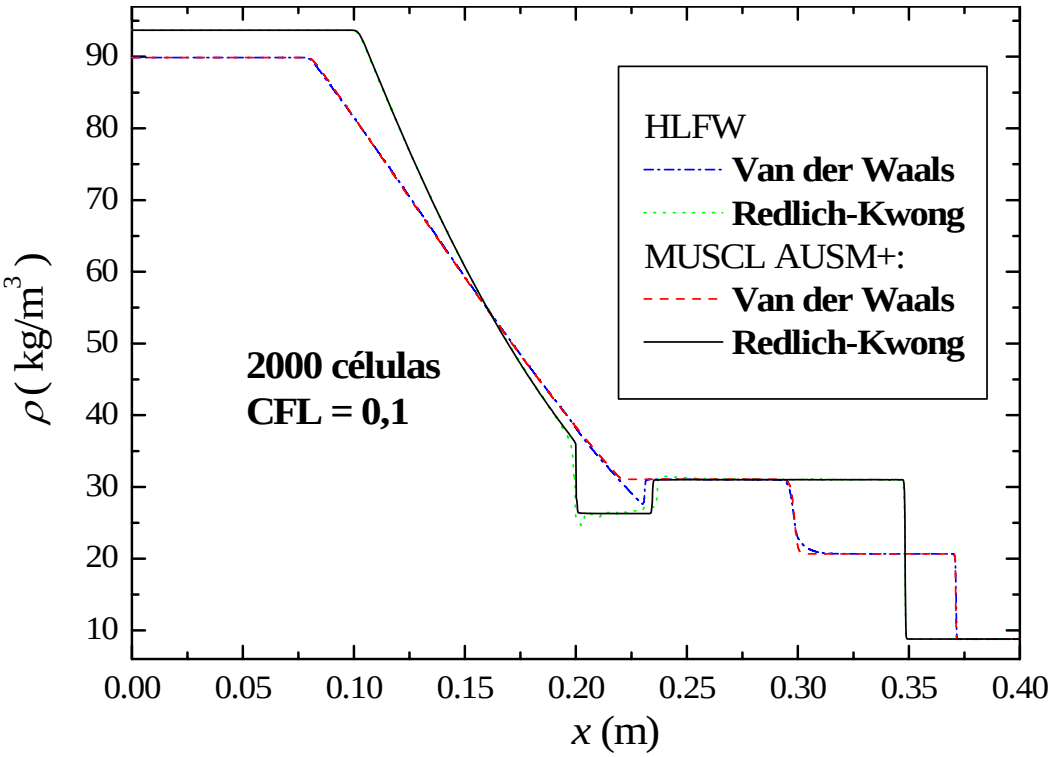


Figura 5.41 – Comparação da densidade obtida pelos métodos MUSCL AUSM+ e HLFW para as Equações de Estado de Van der Waals e Redlich-Kwong (t=8x10^{-5}s).

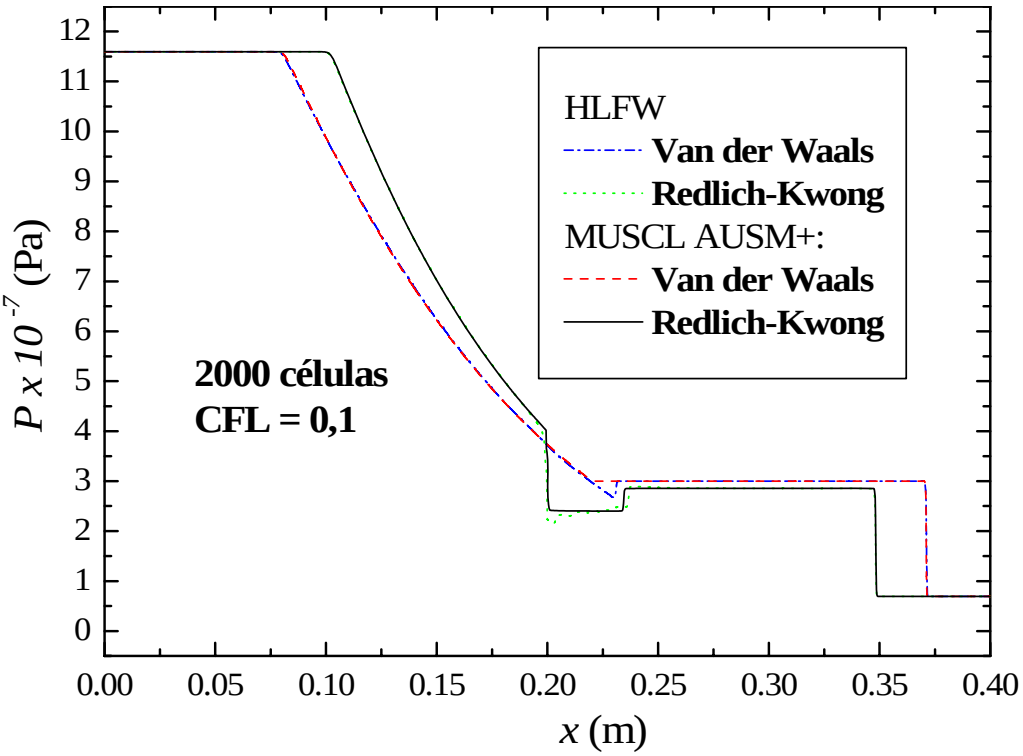


Figura 5.42 – Comparação da pressão obtida pelos métodos MUSCL AUSM+ e HLFW para as Equações de Estado de Van der Waals e Redlich-Kwong (t=8x10^{-5}s).

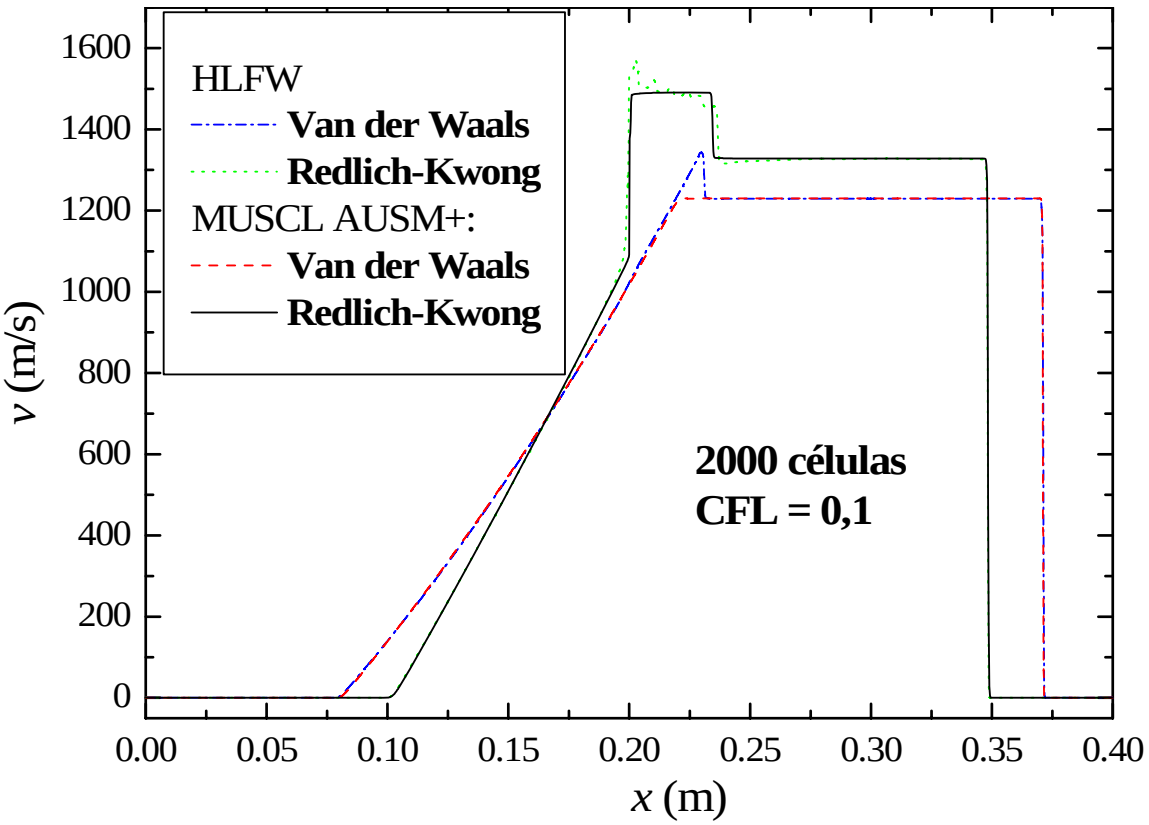


Figura 5.43 – Comparação da velocidade obtida pelos métodos MUSCL AUSM+ e HLFW para as Equações de Estado de Van der Waals e Redlich-Kwong (t=8x10^{-5}s).

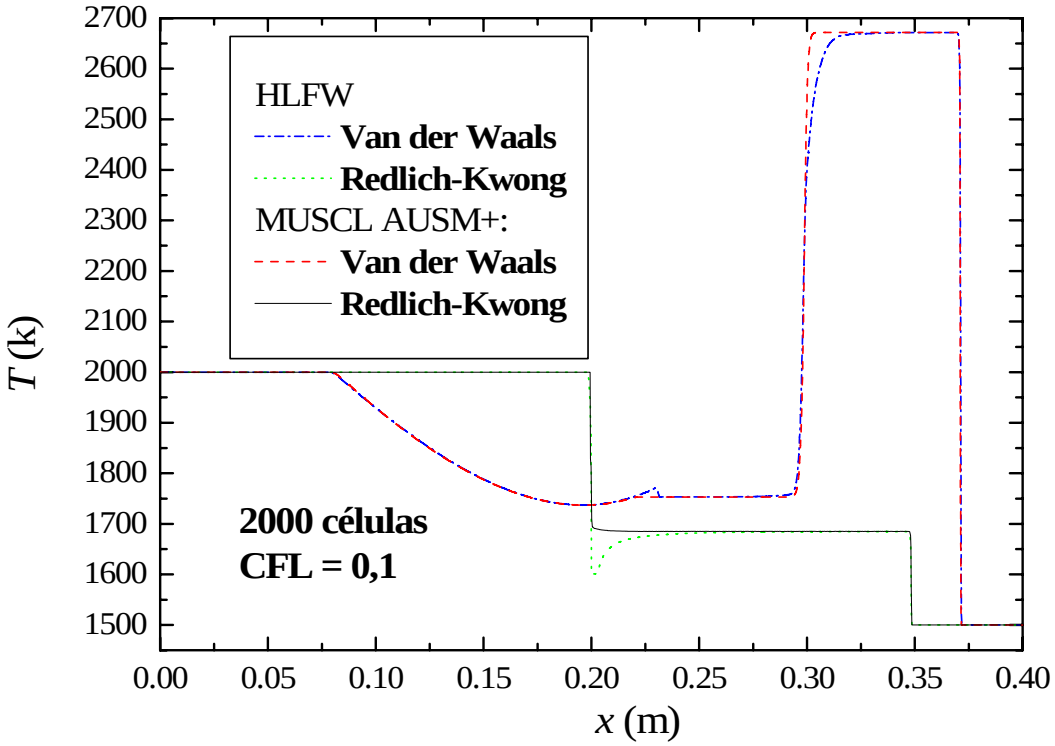


Figura 5.44 – Comparação da temperatura obtida pelos métodos MUSCL AUSM+ e HLFW para as Equações de Estado de Van der Waals e Redlich-Kwong (t=8x10^{-5}s).

5.4. Comparação dos métodos para escoamento compressível bifásico

5.4.1 – Módulo HERA - Escoamentos multifásicos a baixa velocidades

O primeiro exemplo é uma partida de um duto de 420 m com os dados de Masella *et al.* (1998) para escoamento de querosene-ar cujos resultados são apresentados nas figuras 5.45 e 5.46. No trabalho de Masella *et al.* (1998), apenas uma das pressões é informada e, portanto, apenas as propriedades físicas e a pressão de saída são idênticas. As pressões na entrada e na saída são iguais a $1{,}23 \times 10^5$ Pa e 1×10^5 Pa, respectivamente. A fração volumétrica de líquido foi estimada em 0,11. Uma malha de 80 células foi utilizada. A pressão na entrada inicia com um valor igual ao da saída e é aumentada até o valor prescrito em 20s. A densidade do líquido é constante e igual a 813 kg/m^3, a viscosidade do líquido é $1{,}5 \times 10^{-6}$ m^2/s, e a viscosidade do gás é $1{,}5 \times 10^{-5}$ m^2/s.

No segundo exemplo, a partida de um duto de 800m é simulada e os resultados são apresentados nas figuras 5.47 e 5.48. Os dados físicos do duto foram os apresentados por Taitel e Barnea (1997), mas que não informaram os fluidos utilizados no seu trabalho. Os presentes resultados foram obtidos para o sistema água-ar. A fração volumétrica de líquido é de 0,2 e as pressões na entrada e na saída tem uma relação próxima a 1 (ver Figura 5.48), sendo a pressão de saída igual a 1×10^5 Pa. Uma malha de 80 células foi utilizada. A pressão na entrada inicia com um valor igual ao da saída e é aumentada até o valor prescrito em 300s. A densidade do líquido é constante e igual a 1000 kg/m^3, a viscosidade do líquido é $1{,}8 \times 10^{-6}$ m^2/s, e a viscosidade do gás é $1{,}1 \times 10^{-5}$ m^2/s.

Finalmente, no terceiro exemplo, cujos resultados são apresentados nas figuras 5.49 a 5.52, analisou-se a partida do mesmo duto utilizado no segundo exemplo, porém com a pressão na entrada especificada em um valor cerca de três vezes maior. Além disso, uma malha com 160 células foi utilizada. Pode-se observar pelos resultados do exemplo 2 e 3 que o método *upwind* implícito (apêndice A) apresentou resultados razoáveis para baixas pressões na entrada. O mesmo não pode ser dito em relação ao terceiro caso onde

oscilações aparecem. O terceiro caso apresenta vazões na saída na ordem de 6 kg/s. Quando o mesmo tipo de simulação foi realizado com os métodos de solução de sistemas hiperbólicos vazões mássicas cinco vezes maiores estavam presentes.

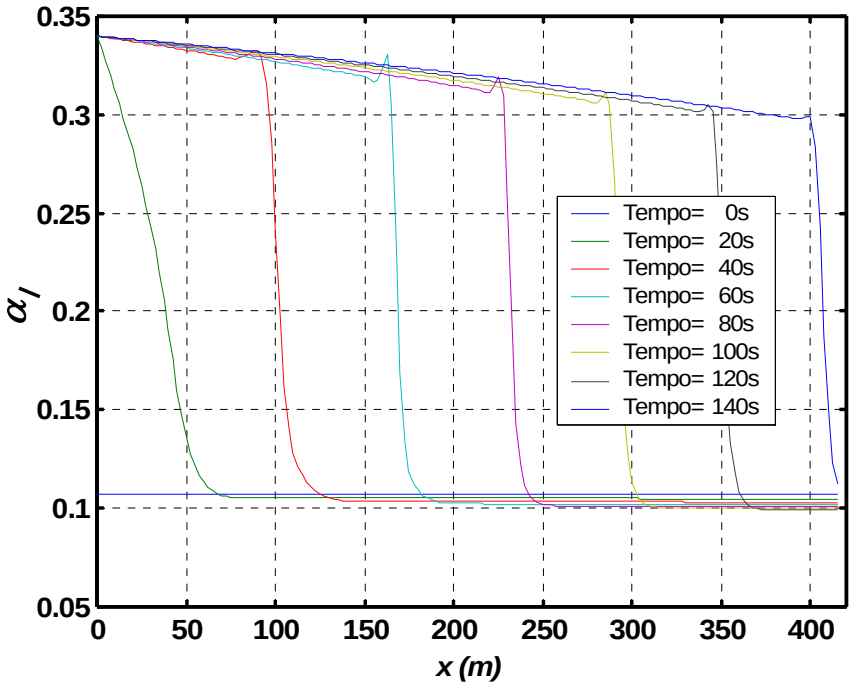


Figura 5.45 - Perfil de *holdup* para o escoamento querosene-ar - dados do duto e dos fluidos de Marsella *et al.* (1998).

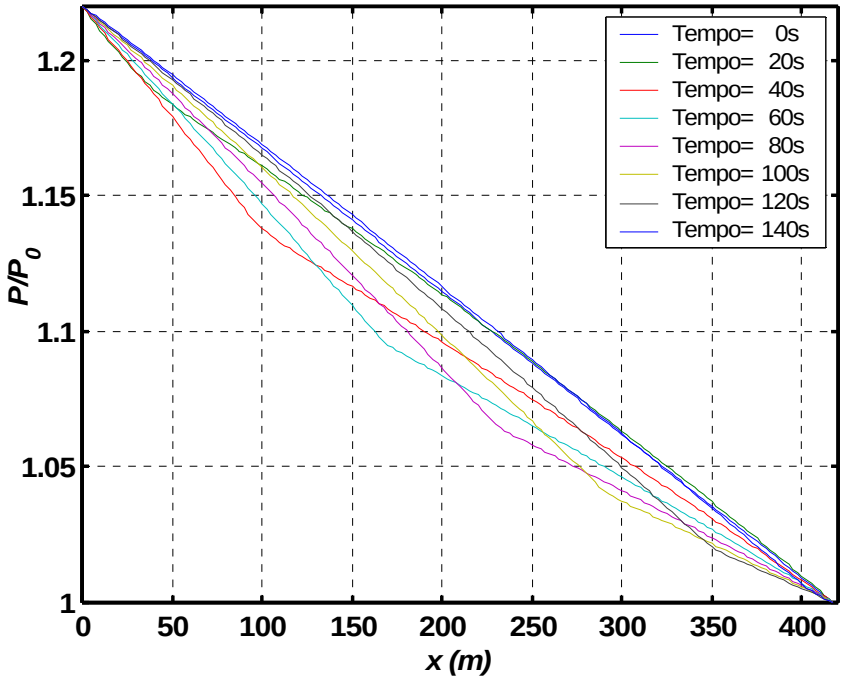


Figura 5.46 - Perfil de pressão/pressão na saída para o escoamento querosene-ar - dados do duto e dos fluidos de Marsella *et al.* (1998).

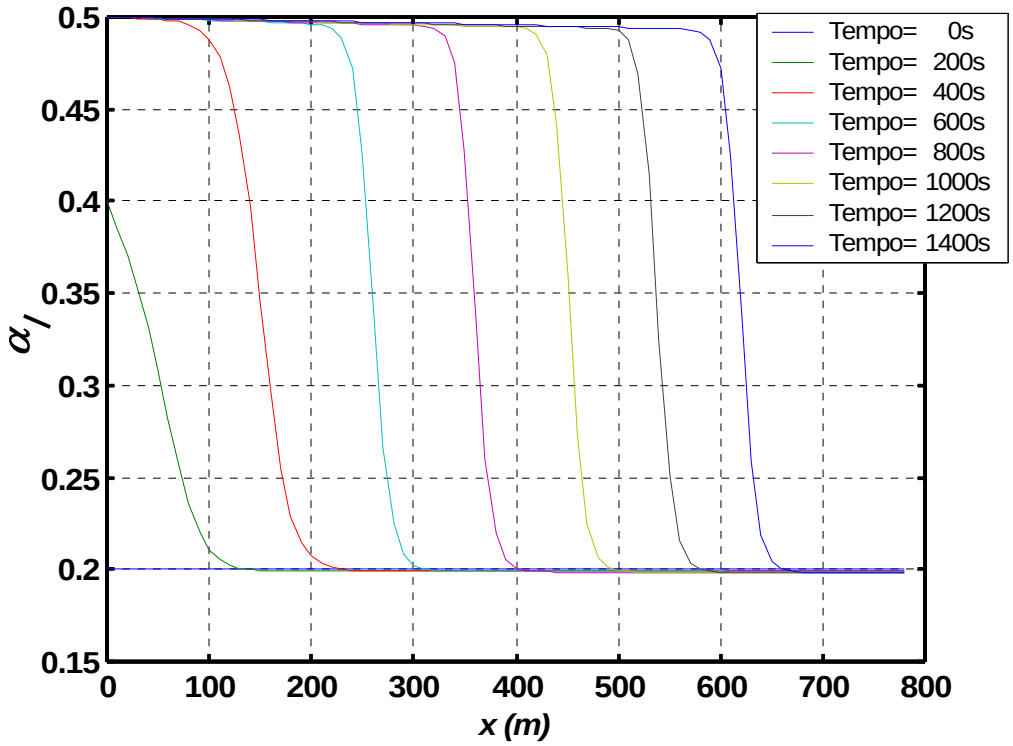


Figura 5.47 - Perfil de *holdup* para o escoamento água-ar - dados do duto de Taitel e Barnea (1997).

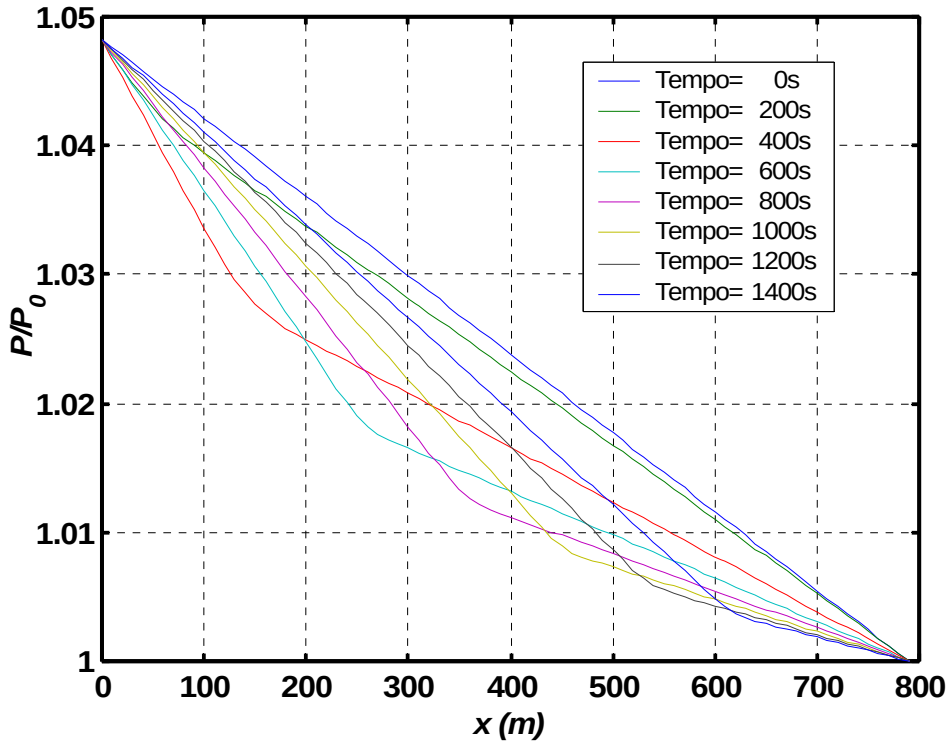


Figura 5.48 - Perfil de pressão/pressão na saída para o escoamento água-ar - dados do duto de Taitel e Barnea (1997).

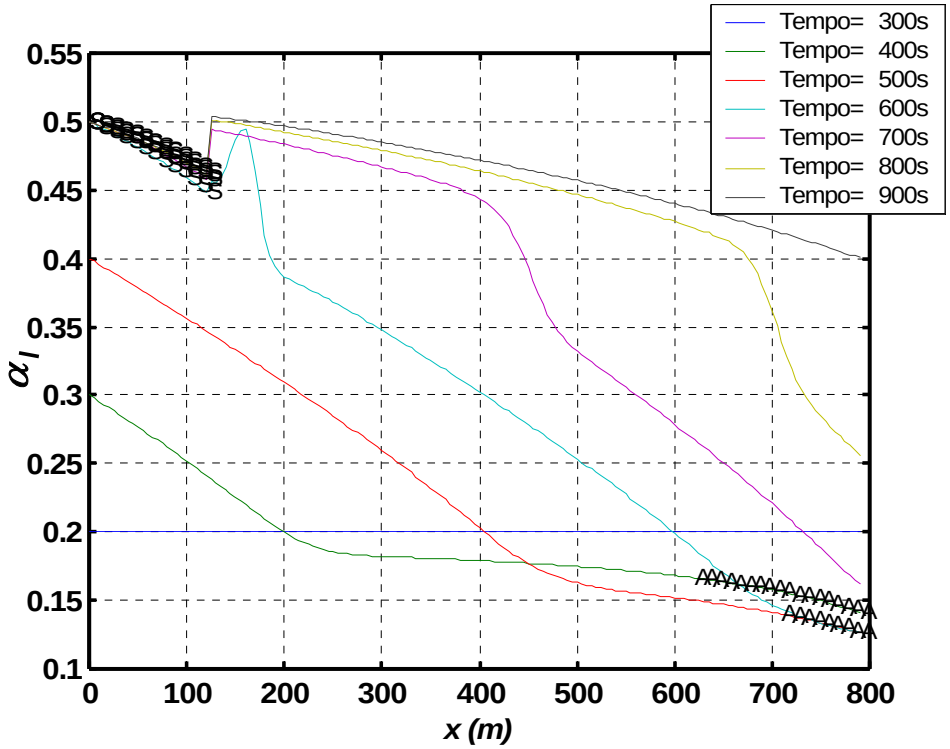


Figura 5.49 - Perfil de *holdup* para o escoamento água-ar a alta pressão (S-*slug* e A-anular).

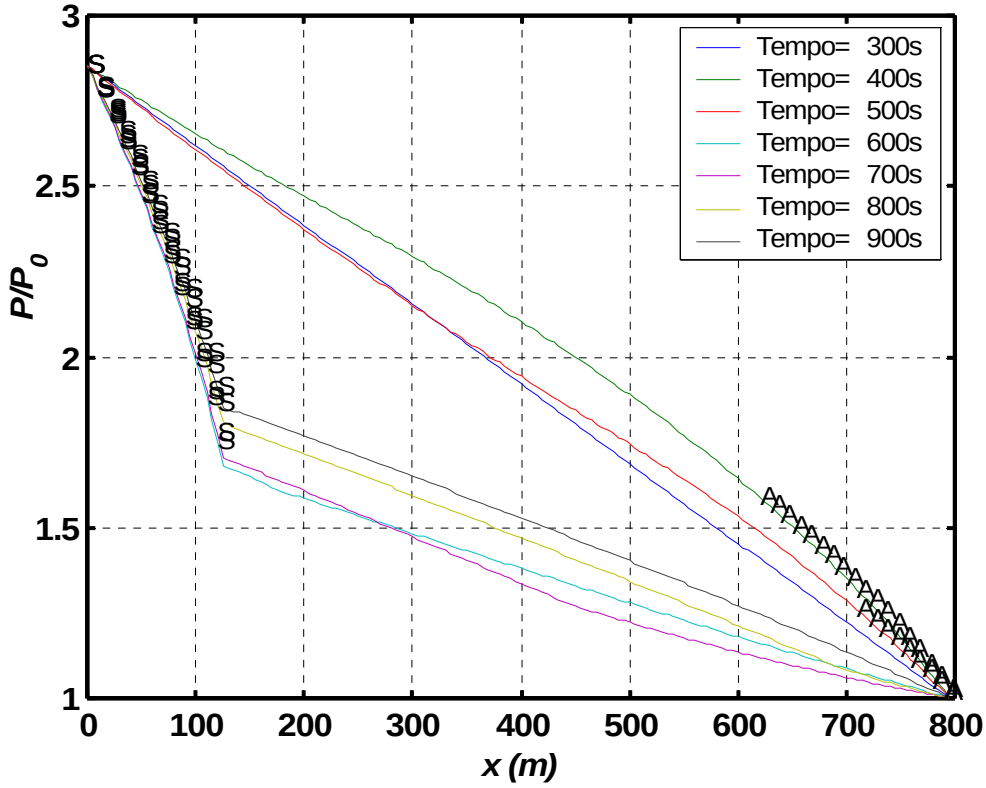


Figura 5.50 - Perfil de pressão para o escoamento água-ar a alta pressão (S-*slug* e A-anular).

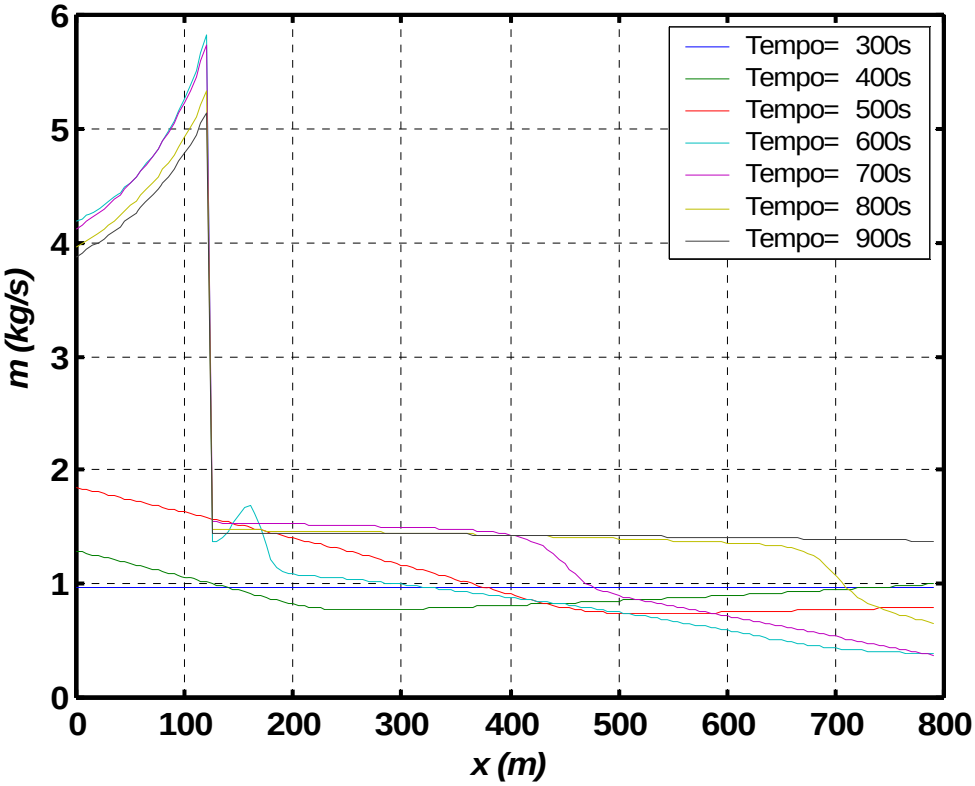


Figura 5.51 - Perfil de vazão mássica de líquido para o escoamento água-ar a alta pressão.

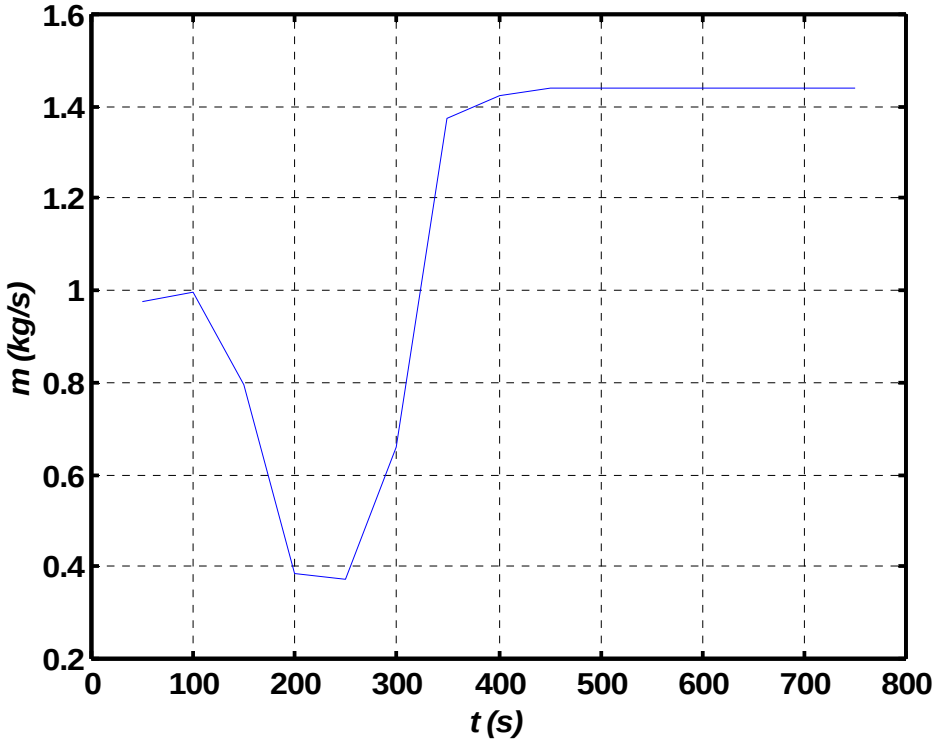


Figura 5.52 - Vazão mássica de líquido na saída da linha para o escoamento água-ar a alta pressão.

5.4.2 –Escoamentos multifásicos a altas velocidades- Módulo ZEUS

5.4.2.1 Choque em dutos com modelo de dois fluidos

A primeira aplicação dos métodos apresentados foi um problema de choque em duto com grande velocidade relativa, proposta por Cortes *et al.* (1998). Este é um problema de Riemann com os estados à direita e à esquerda dados por $\underline{w}_L$=[0,71, 65, 1, 265000] e $\underline{w}_R$=[0,7, 50, 1, 265000] ($\underline{w}$=[α_g,v_g, v_l, p]), respectivamente. O comprimento do duto é de 100m. Como não há solução analítica, a solução pelo método HLFW usando uma malha de 10000 células foi adotada como referência. As figuras 5.53 a 5.56 apresentam a solução completa do problema para o esquema HLFW com 10000 células.

A Figura 5.57 apresenta resultados para diferentes escolhas da função de poderação do esquema AUSMDV e para diferentes valores de σ (presente no termo de pressão interfacial). Pode-se observar que a adoção de σ=2 apresenta resultados com menos oscilações. Paillère *et al.* (2003) observaram que os valores de σ afetam marcantemente as descontinuidades de contato. Para todos os métodos e funções de ponderação, na região da de descontinuidade de contato existem gradientes de pressão negativos inesperados em x=50 para σ=2, enquanto que para σ=0 os resultados esperados com gradientes positivos foram observados. Portanto, o uso de valores de σ entre 1 e 2 devem ser usados. Valores de 1,2 foram adotados com sucesso e valores superiores a este devem ser considerados com cautela. Isto pode ser comprovado pelas figuras 5.63 a 5.66 onde σ=1,2 foi utilizado e o gradiente de pressão foi o esperado.

A Figura 5.58 mostra os resultados para diferentes escolhas da função de poderação do esquema AUSMDV e MUSCL-AUSMDV usando σ=1,2 em malhas com 1000 e 10000 células. Liou (2000) sugeriu a adoção de $Y = 1/\rho$ e é possível observar que essa opção proporciona resultados similares aos obtidos com $Y = p/\rho$, para o AUSMDV de primeira ordem, mas apenas a sugestão de Evje e Flatten (2003), $Y=\rho/\alpha$, pode representar a configuração com as duas ondas separadas de fração volumétrica. Porém,

esta última opção apresentou algumas oscilações. Estas oscilações são mais acentuadas no MUSCL-AUSMDV. As opções $Y = p/\rho$ e $Y = 1/\rho$ apresentam grande difusão numérica para o esquema AUSMDV. Como se trata de um problema de choque, normalmente, a opção com menor difusão numérica é adotada. Desta maneira, a opção $Y=\rho/\alpha$ parece ser a mais adequada para o AUSMDV apesar das oscilações observadas. Para o esquema MUSCL-AUSMDV a mesma opção produz oscilações inadmissíveis. Sendo assim, apesar da opção $Y=1/\rho$ apresentar maior difusão numérica, esta opção foi adotada para o esquema MUSCL-AUSMDV, sendo capaz de representar as duas ondas de fração volumétrica apenas para malhas de 10000 células. São estas as funções de ponderação que serão usadas nos esquemas AUSMDV e MUSCL-AUSMDV nos resultados mostrados na seqüência.

As figuras 5.59 a 5.66 apresentam os resultados com zoom nas regiões de acentuados gradientes para permitir a melhor comparação dos métodos AUSM+, AUSMDV e HLFW e as extensões via MUSCL dos dois primeiros. Várias observações relevantes, listadas a seguir, podem ser obtidas na comparação dos resultados para estes diferentes métodos.

Comparando-se os resultados, pode-se afirmar que:

(i) Os esquemas AUSMDV apresentaram resultados com maior difusão numérica que os AUSM+ correspondentes, e os esquemas MUSCL-AUSMDV apresentaram o mesmo resultado quando comparados aos esquemas MUSCL-AUSM+ correspondentes com (σ>0) ou sem (σ=0) a correção para a pressão interfacial. Para σ=0, estes métodos apresentaram fortes instabilidades e não puderam ser resolvidos para malhas com 10000 células.

(ii) Nos resultados apresentados por Evje e Flatten (2003) com o Riemann *solver* de Roe, é possível se observar duas ondas de fração volumétrica separadas. Nos resultados deste trabalho pode-se observar que isto só foi obtido com malhas a partir de 1000 células (Figura 5.60 e Figura 5.62), para qualquer valor de σ. No entanto, as duas ondas separadas são acompanhadas de oscilações para todos os esquemas do tipo

AUSM, com alguma vantagem para o AUSMDV. Para o método HLFW oscilações numéricas foram observadas para σ=0 mas não o foram para $\sigma \geq 1{,}2$.

(iii) Apesar de σ=1,2 reduzir as oscilações numéricas tanto para a pressão quanto para a fração volumétrica para todos os métodos, a amplitude das duas ondas separadas de fração volumétrica permanecem ligeiramente superiores às apresentadas por Evje e Flatten (2003) usando o *solver* de Riemann. Além disso, os níveis de pressão entre as duas ondas à esquerda e à direita de x = 50 e sua diferença varia ligeiramente com o valor de σ usado (Figura 5.63 a Figura 5.66).

(iv) A estratégia MUSCL-Hancock apresentou o comportamento esperado, favorecendo a redução da difusão numérica mas também levando ao aparecimento de oscilações numéricas, principalmente para malhas a partir de 200 células. Por esta razão, essa estratégia mostrou-se útil para este problema apenas para malhas não refinadas, sendo o resultado para o AUSMDV válido para a expressão de Y adotada.

(v) Os resultados para este caso indicam que os esquemas MUSCL-AUSMDV e HLFW com σ=1,2 como os mais acurados, com alguma vantagem para o último, pois para a malha de 10000 células o MUSCL-AUSMDV apresentou pequenas oscilações numéricas. Este resultado é particularmente interessante na medida em que o método HLFW foi desvantajoso nas simulações para os sistemas monofásicos em relação ao MUSCL-AUSMDV. Para este caso também é possível concluir que o MUSCL-AUSM+ não é recomendado, pois fortes oscilações foram observadas.

Deve-se destacar que a função de ponderação do esquema AUSMDV com menor difusão numérica ($Y=\rho/\alpha$) foi utilizada com a intenção de se representar o quadro com duas ondas de fração volumétrica. No entanto, o preço pago foi o de se obter soluções oscilatórias. As outras funções não foram exaustivamente reproduzidas aqui, pois o objetivo de comparação foi atingido na medida em que o método HLFW já apresentou soluções com menos difusão e oscilações numéricas. O uso das outras funções pode reduzir as oscilações dos esquemas AUSMDV mas apresenta ainda maior desvantagem em relação ao esquema HLFW quanto à difusão numérica.

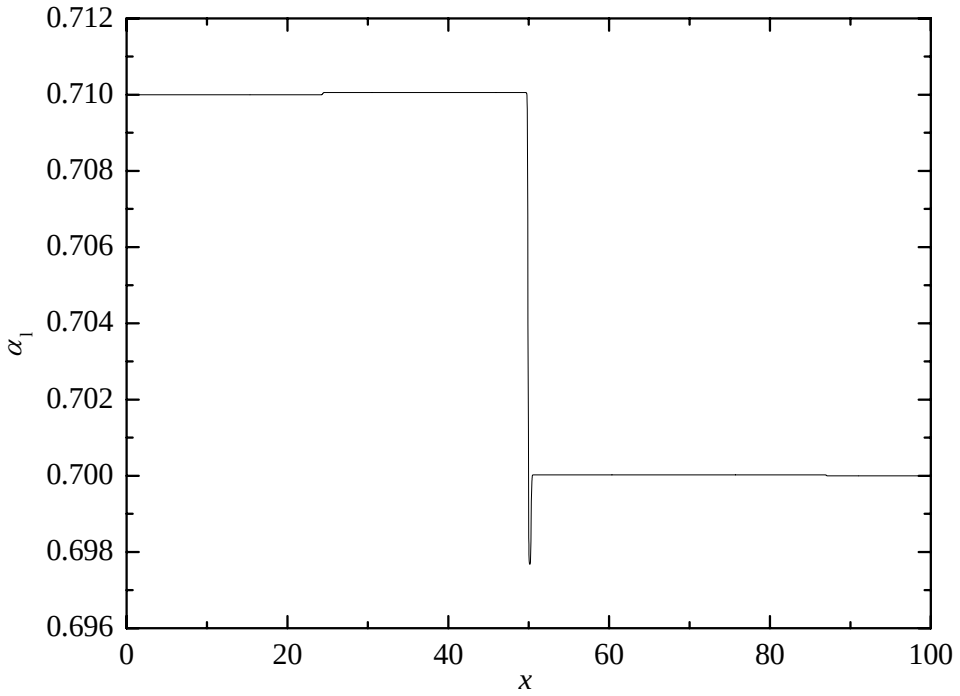


Figura 5.53 – Perfil de fração volumétrica de líquido para o problema de choque. Resultados para o HLFW para malha de 10000 células com σ=1,2 (t = 0,1 s).

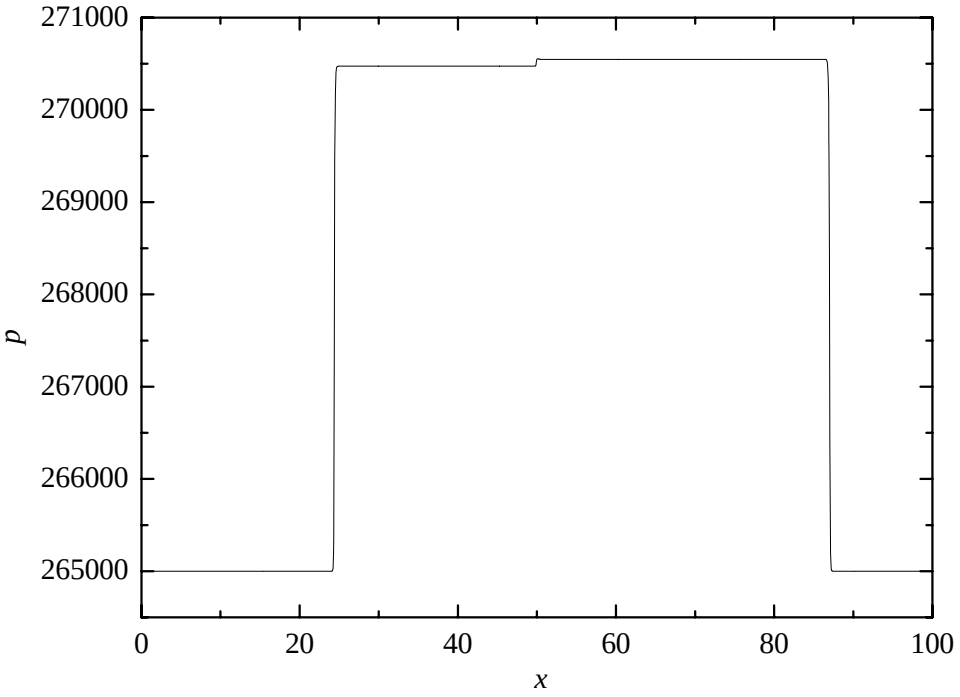


Figura 5.54 – Perfil de pressão para o problema de choque. Resultados para o HLFW para malha de 10000 células com σ=1,2 (t = 0,1 s).

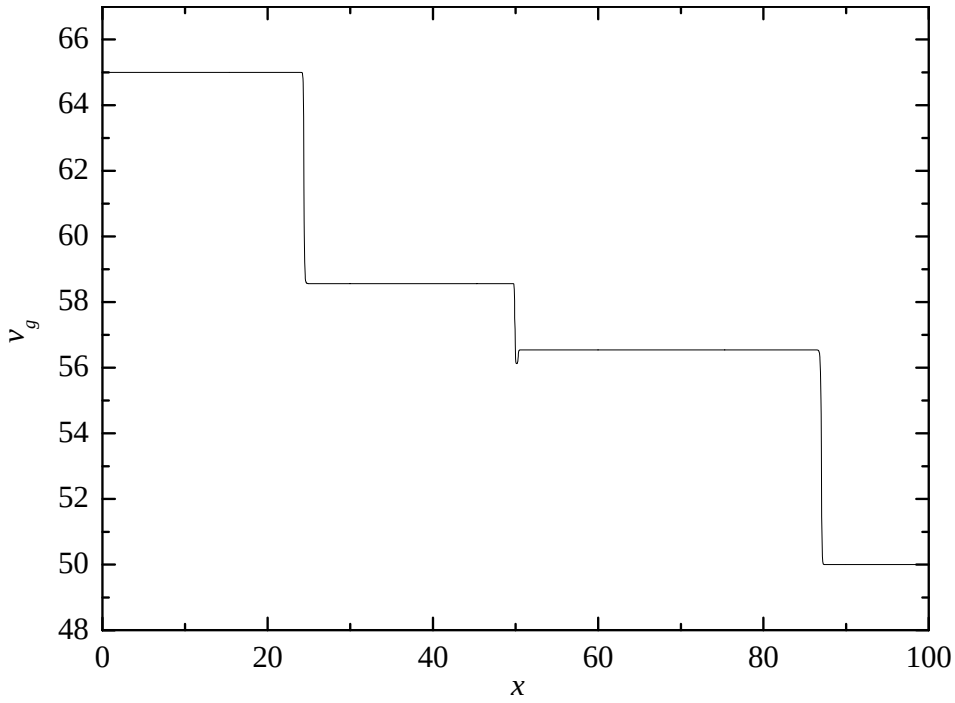


Figura 5.55 – Perfil de velocidade do gás para o problema de choque. Resultados para o HLFW para malha de 10000 células com σ=1,2 (t = 0,1s).

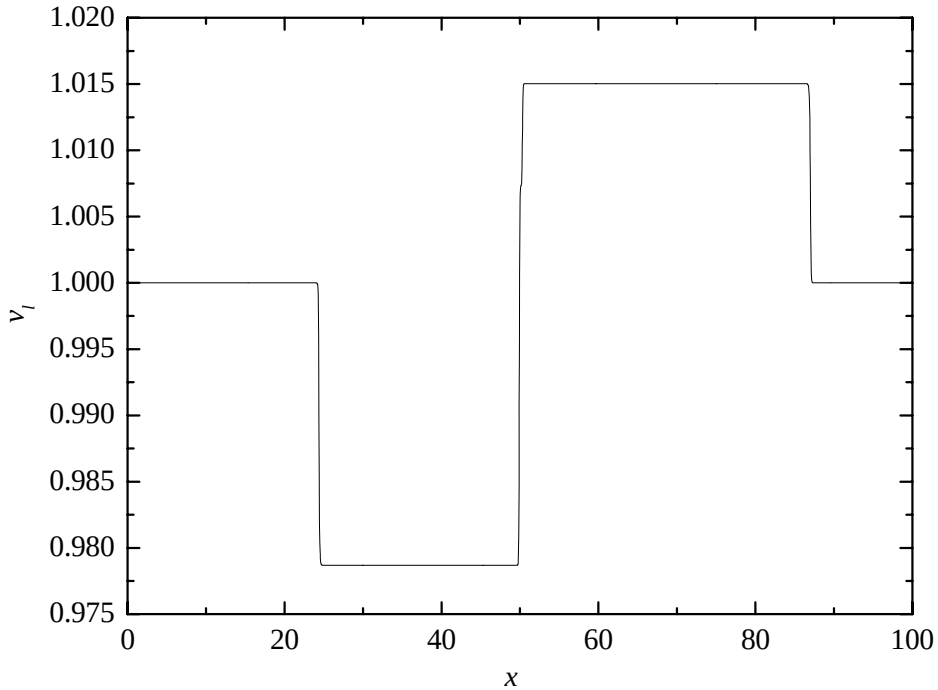
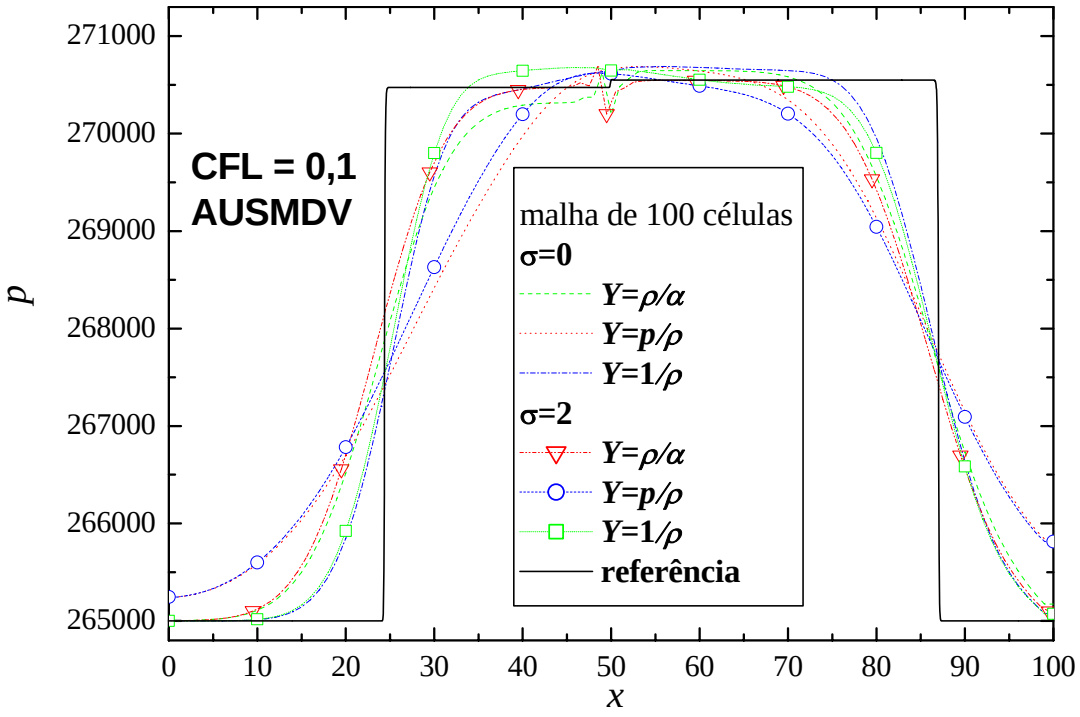
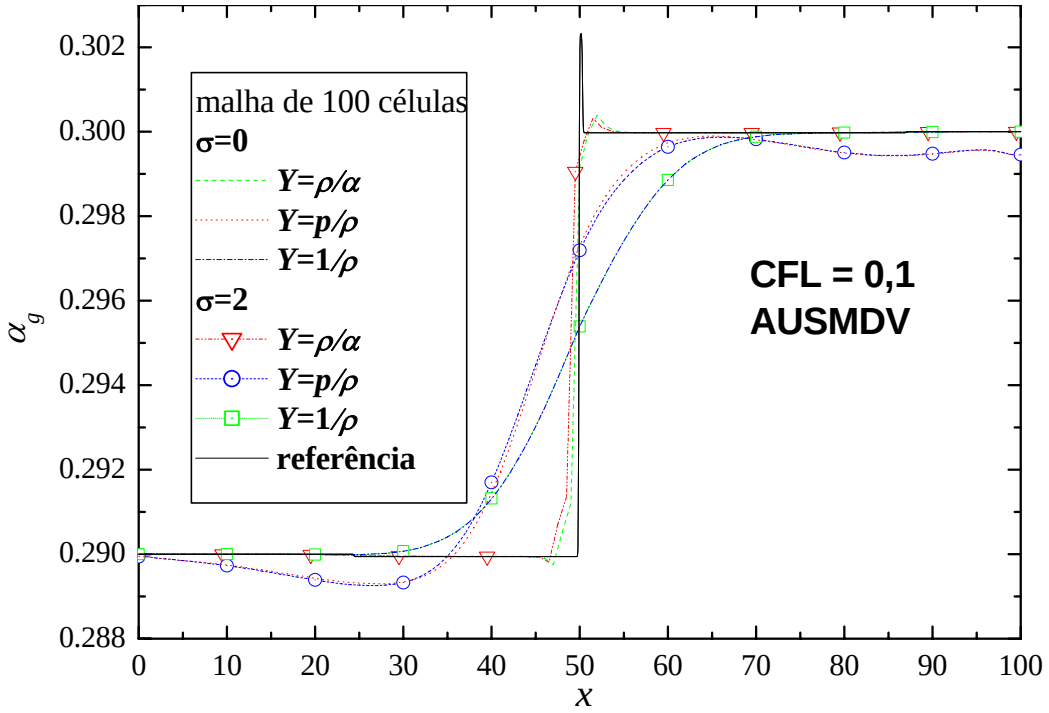


Figura 5.56 – Perfil de velocidade do líquido para o problema de choque. Resultados para o HLFW para malha de 10000 células com σ=1,2 (t = 0,1s).

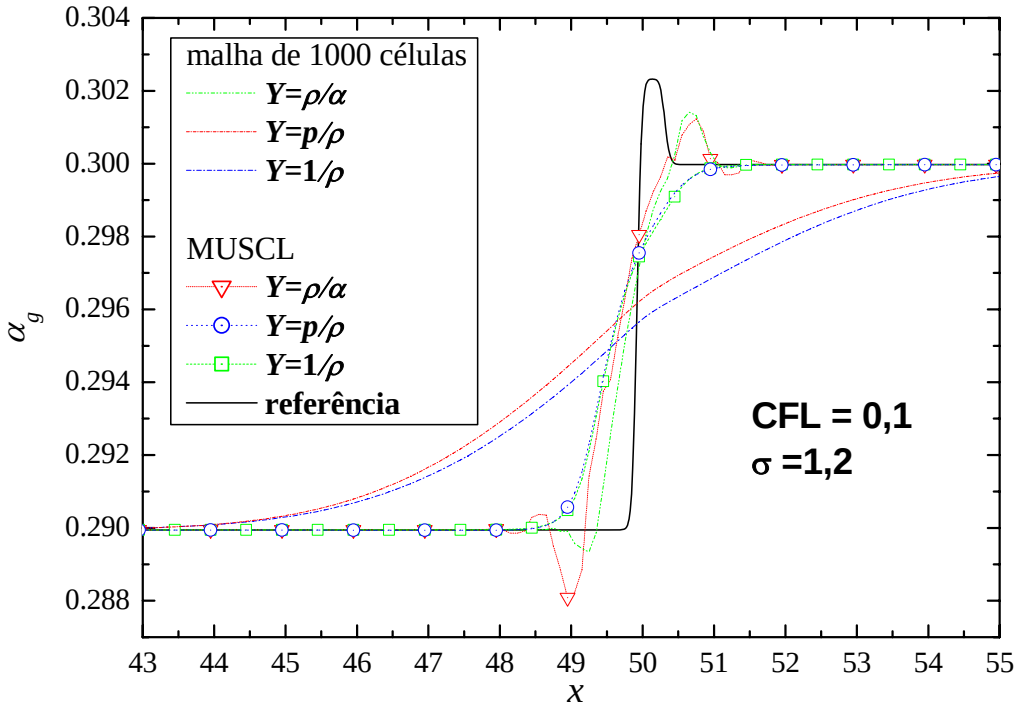


(a)

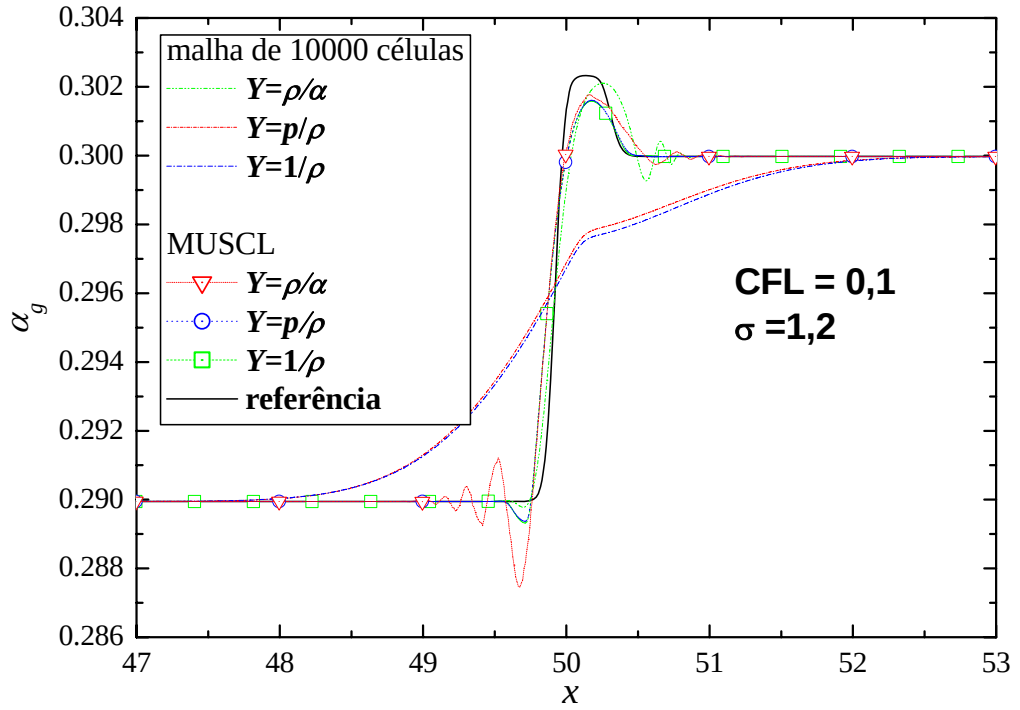


(b)

Figura 5.57 – Comparação para o problema de choque em tubo entre os resultados do AUSMDV com diferentes funções de ponderação e valores de σ para uma malha de 100 células: (a) pressão e (b) fração volumétrica.

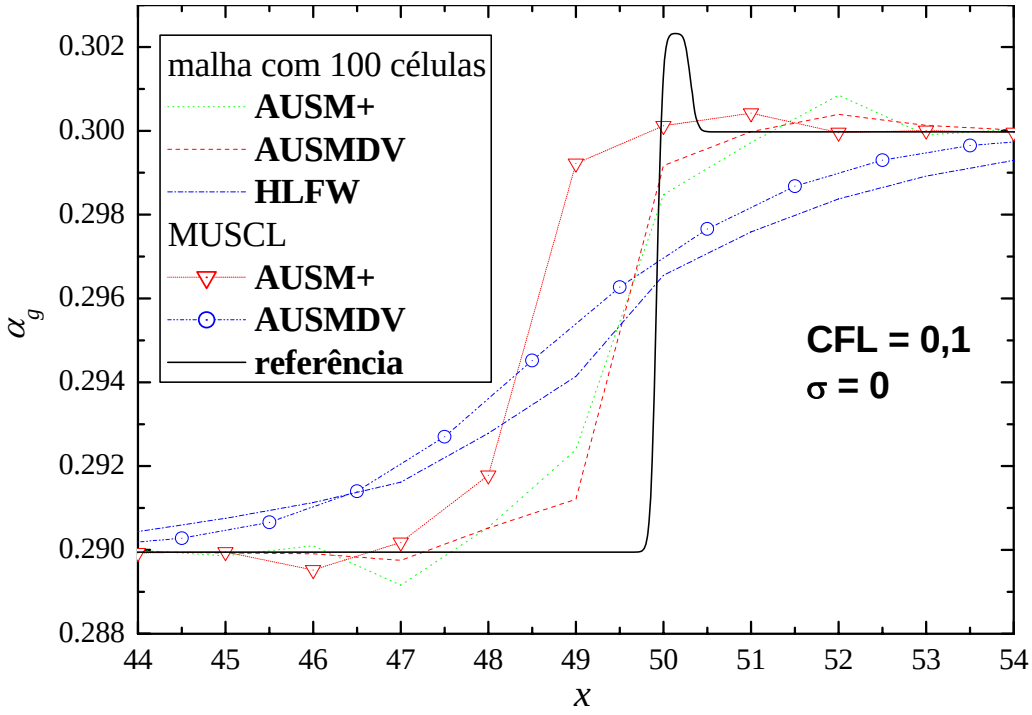


(a)

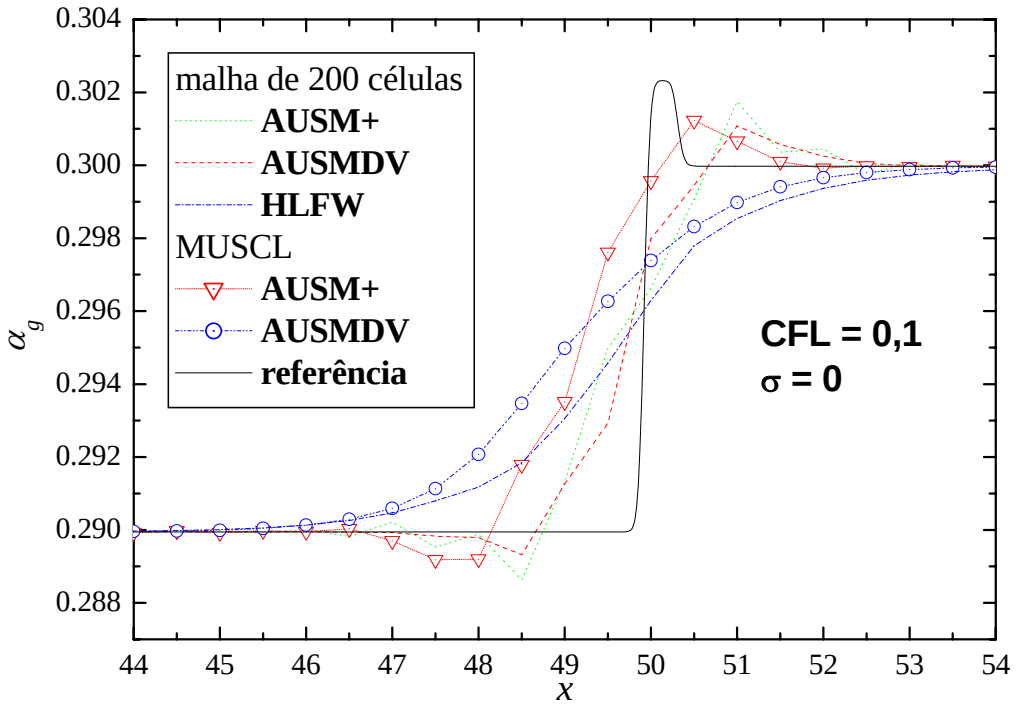


(b)

Figura 5.58 – Comparação para o problema de choque em tubo entre os resultados do AUSMDV e MUSCL-AUSMDV para $\sigma = 1,2$ para diferentes tamanhos de malha com diferentes funções de ponderação (t = 0,1 s): (a) 1000 células (b) 10000 células. Valores de referência do HLFW com 10000 células.



(a)



(b)

Figura 5.59 –Comparação para a fração volumétrica de gás para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malhas de 100 (a) e 200(b) células sem correção de pressão interfacial (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.

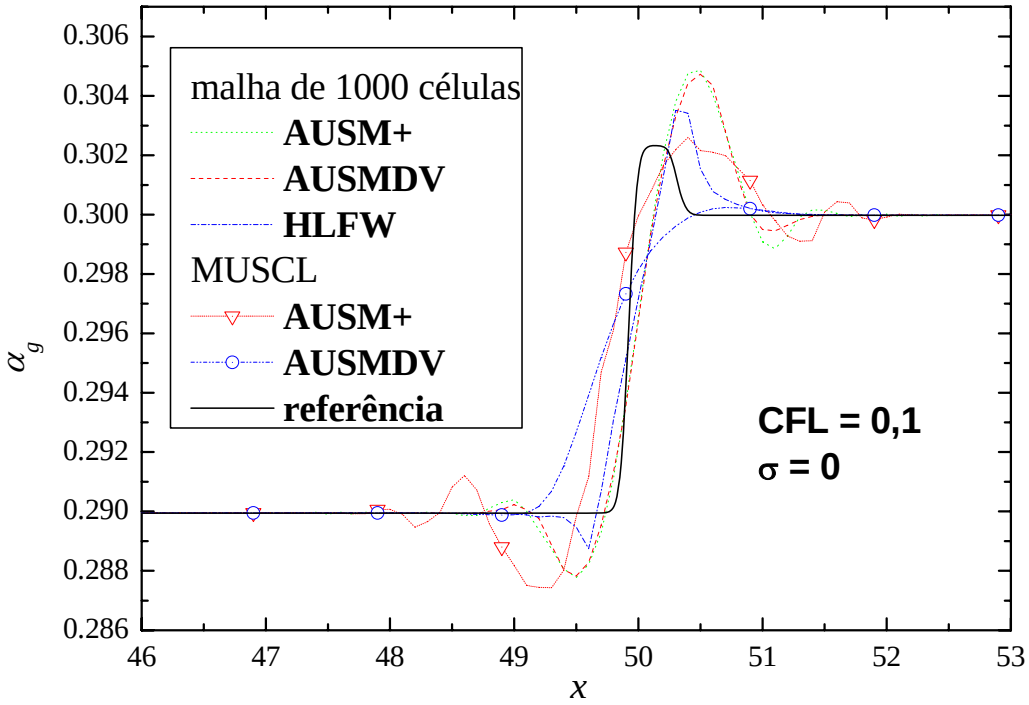
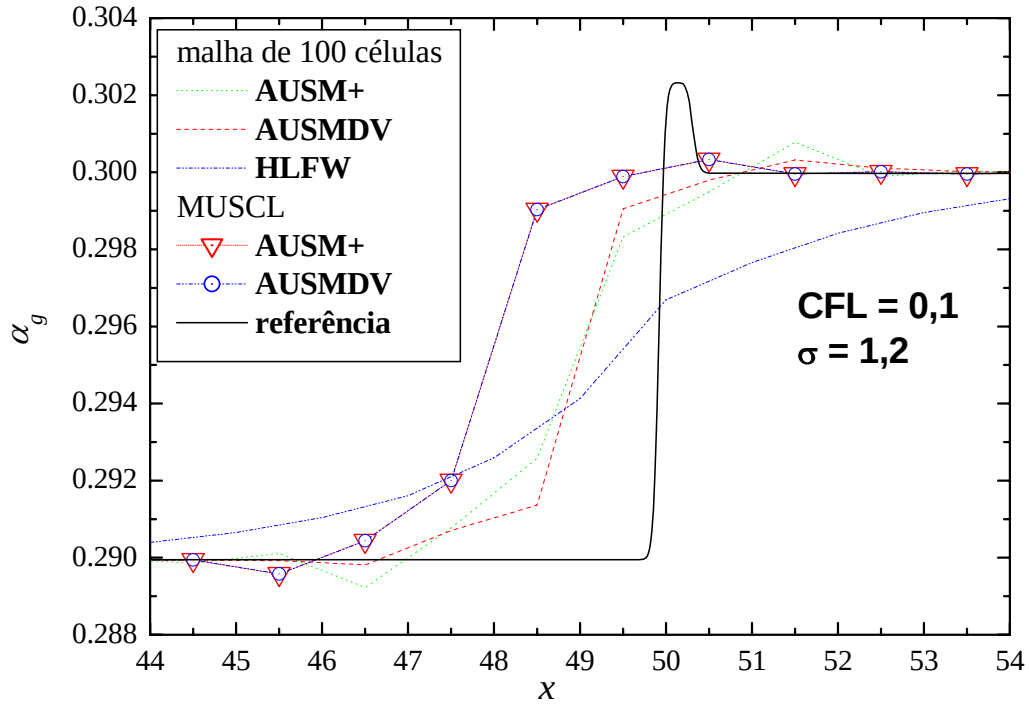
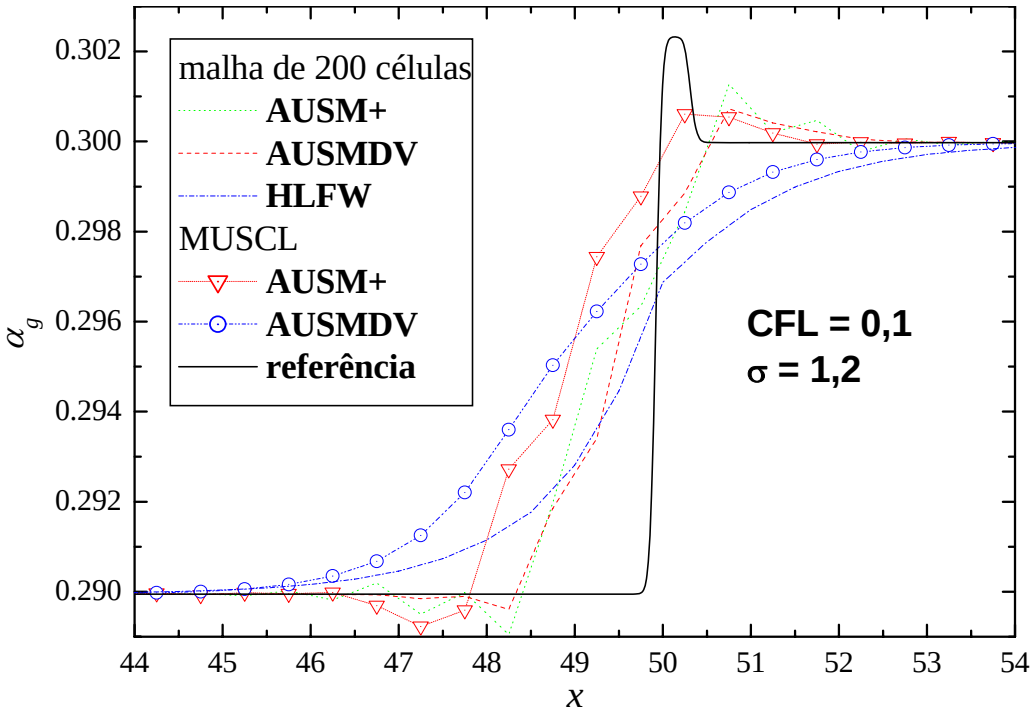


Figura 5.60 –Comparação para a fração volumétrica de gás para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malha de 1000 células sem correção de pressão interfacial (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.



(a)



(b)

Figura 5.61 – Comparação para a fração volumétrica de gás para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malhas de 100 (a) e 200(b) células e com σ=1,2 (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.

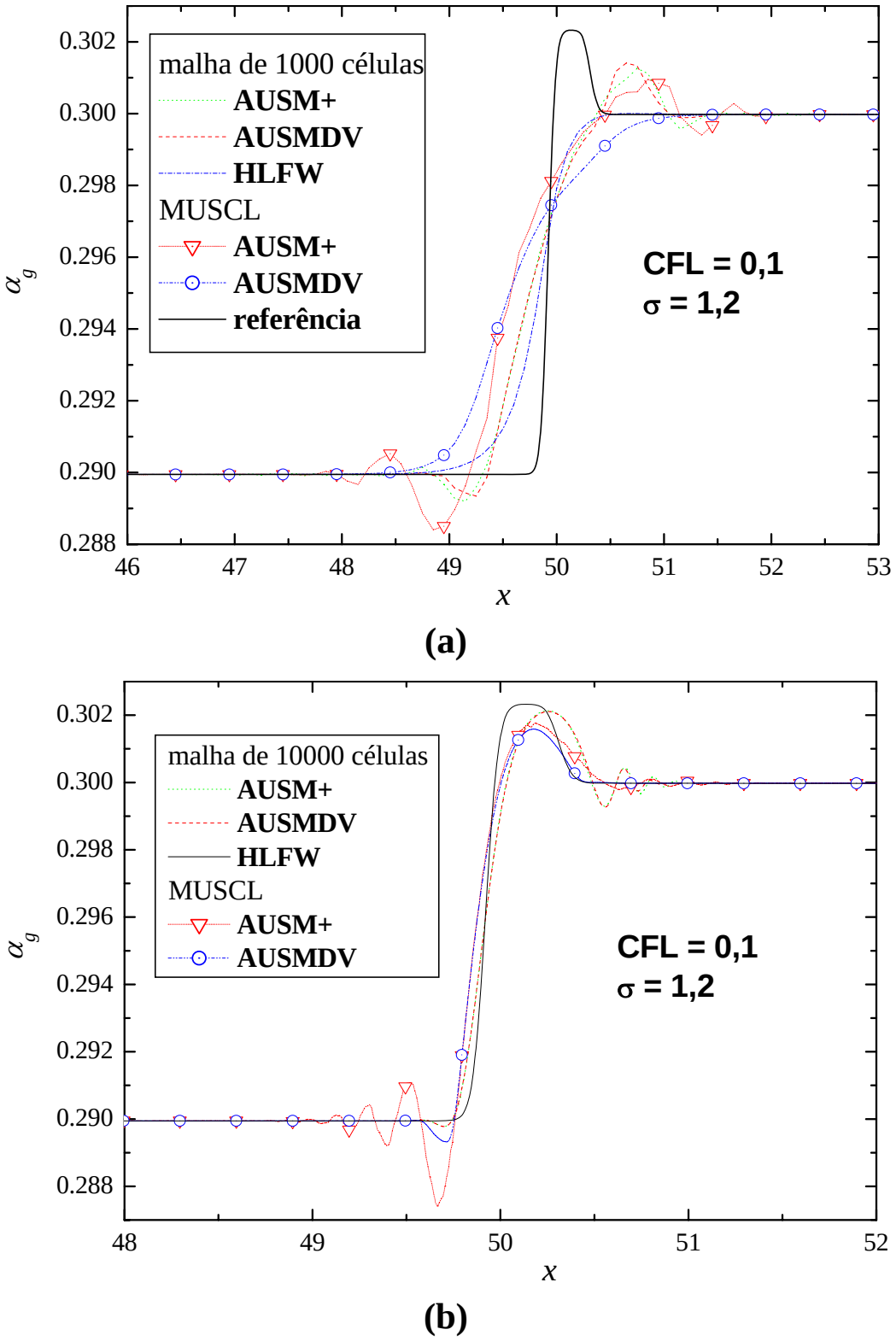
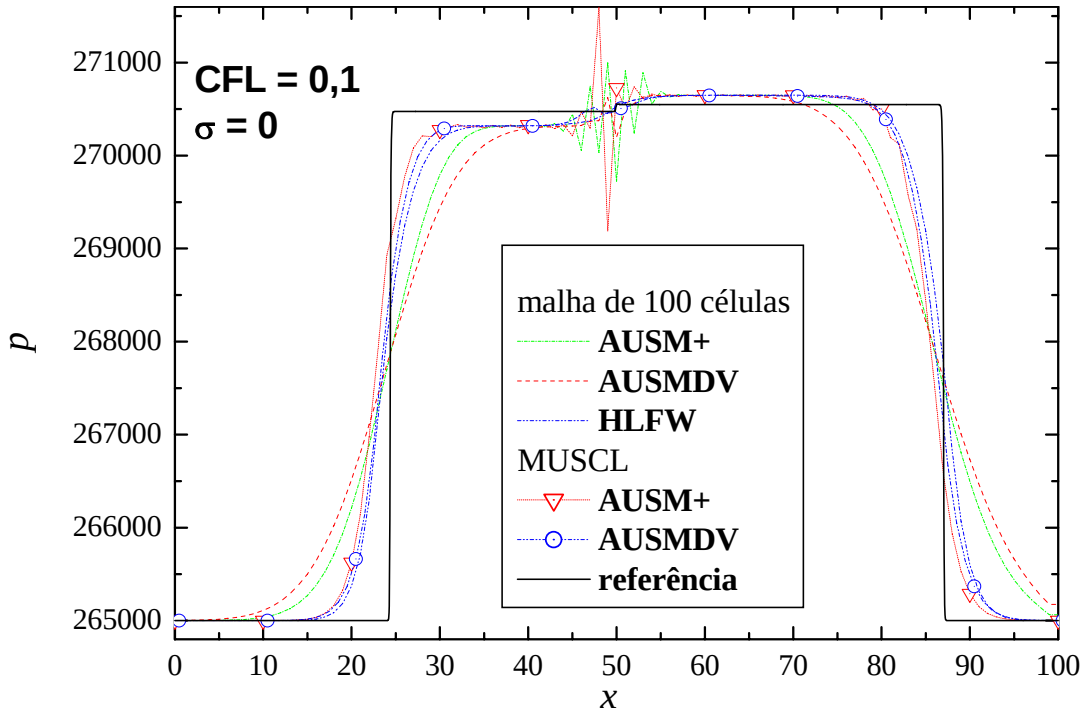
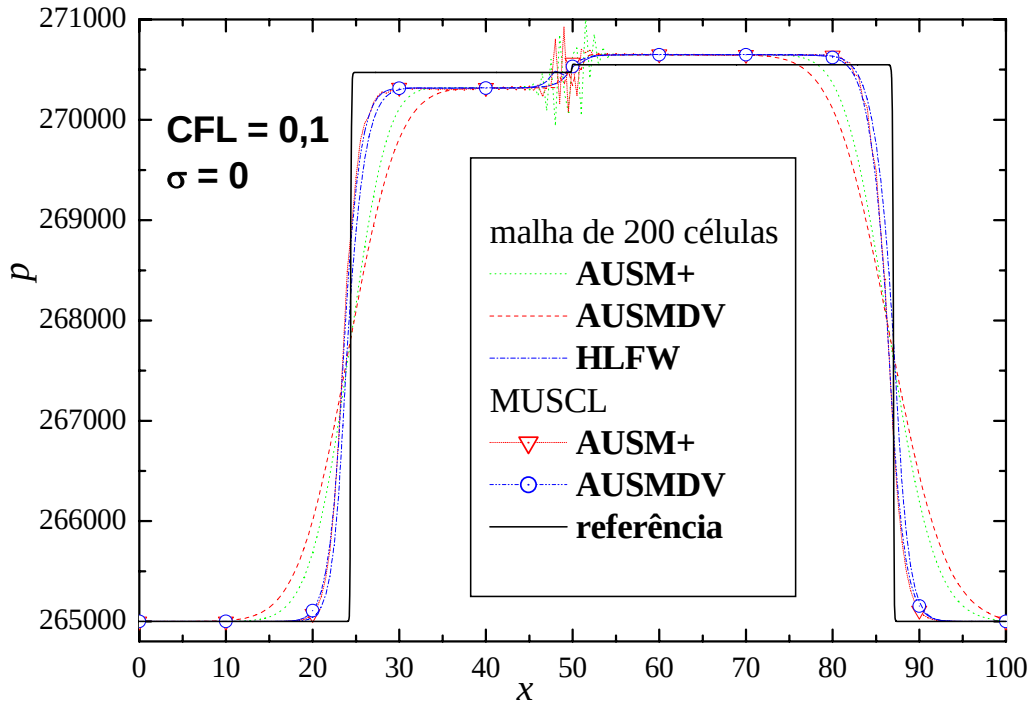


Figura 5.62 – Comparação para a fração volumétrica de gás para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malhas de 1000(a) e 10000 (b) células e com σ=1,2 (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.



(a)



(b)

Figura 5.63 - Comparação para a pressão para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malhas de 100 (a) e 200(b) células sem correção de pressão interfacial (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.

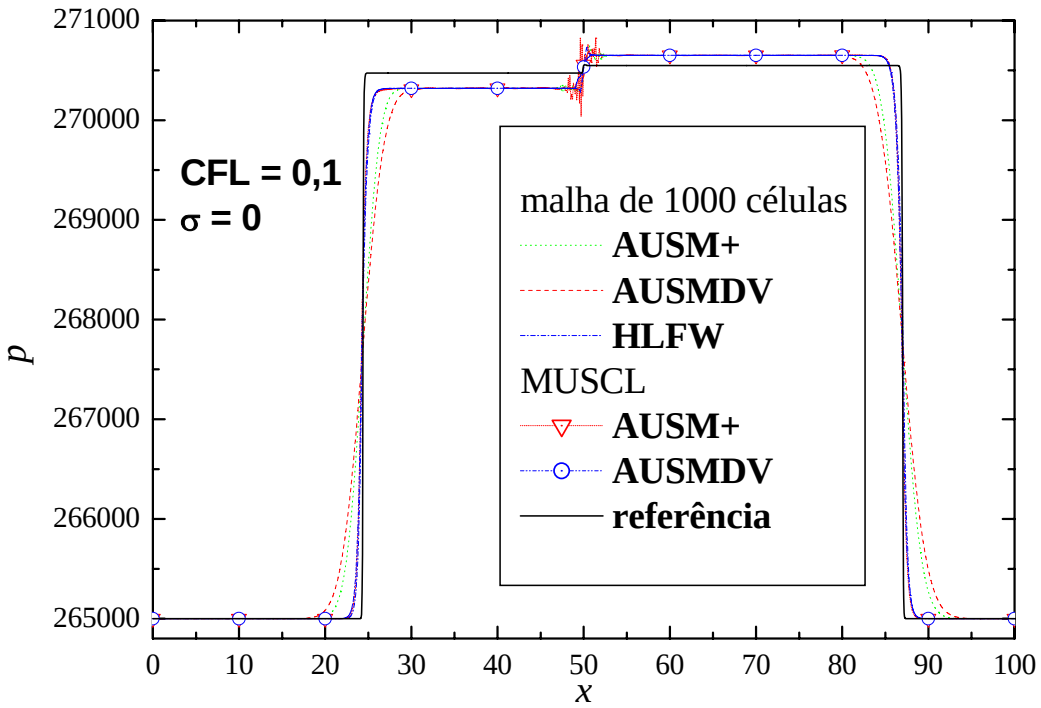
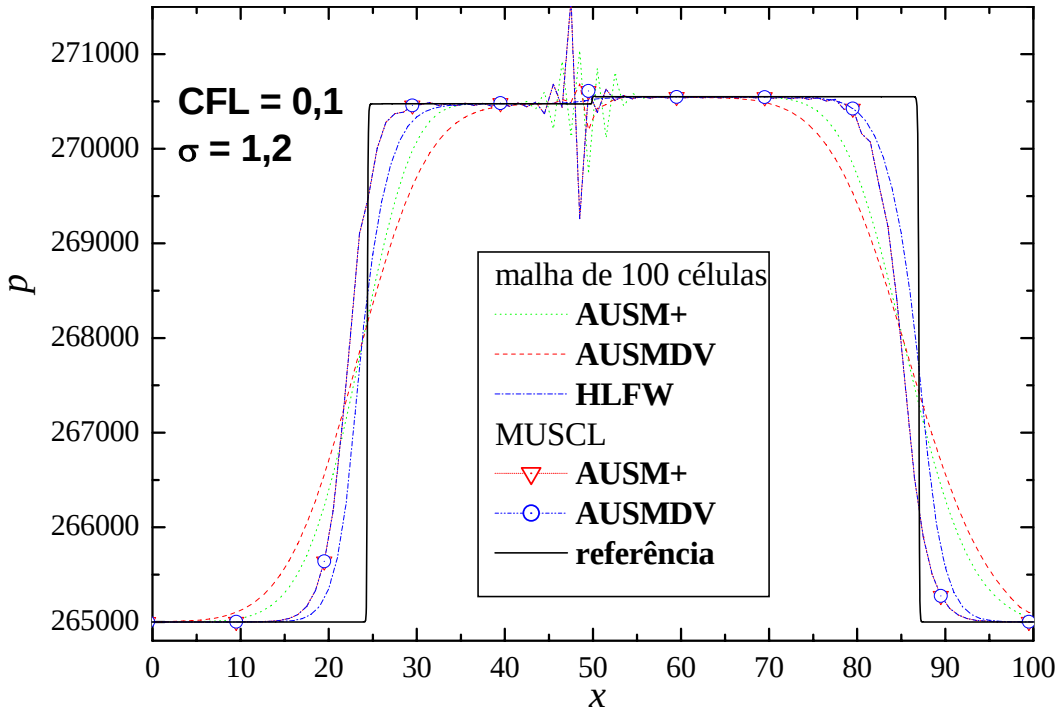
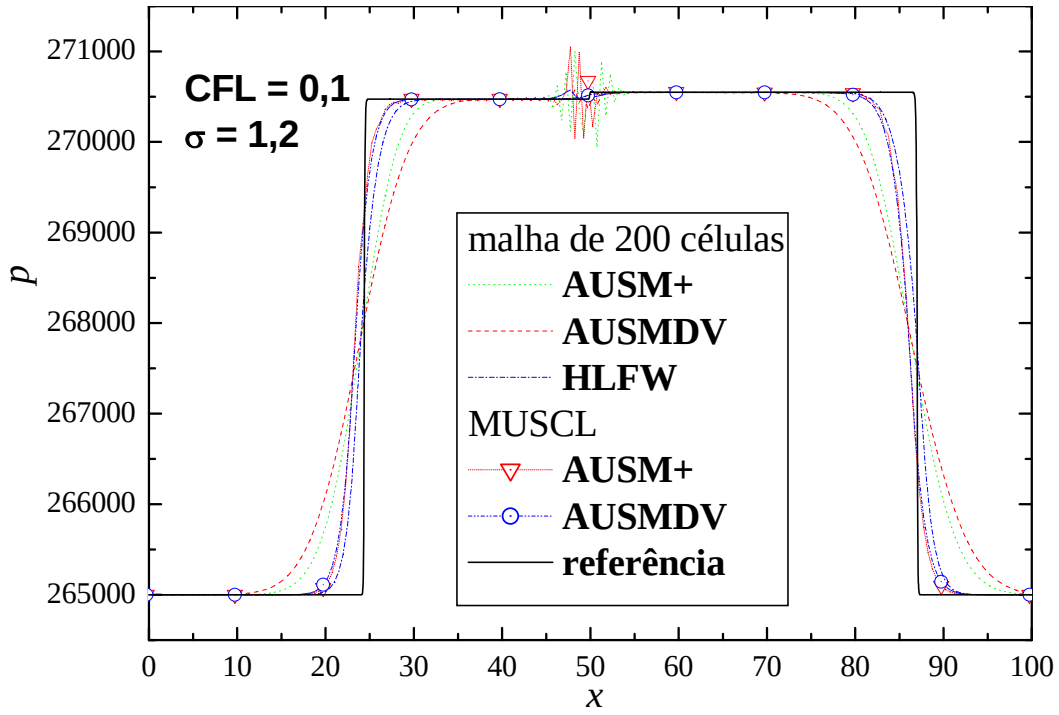


Figura 5.64 - Comparação para a pressão para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malha de 1000 células sem correção de pressão interfacial (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.

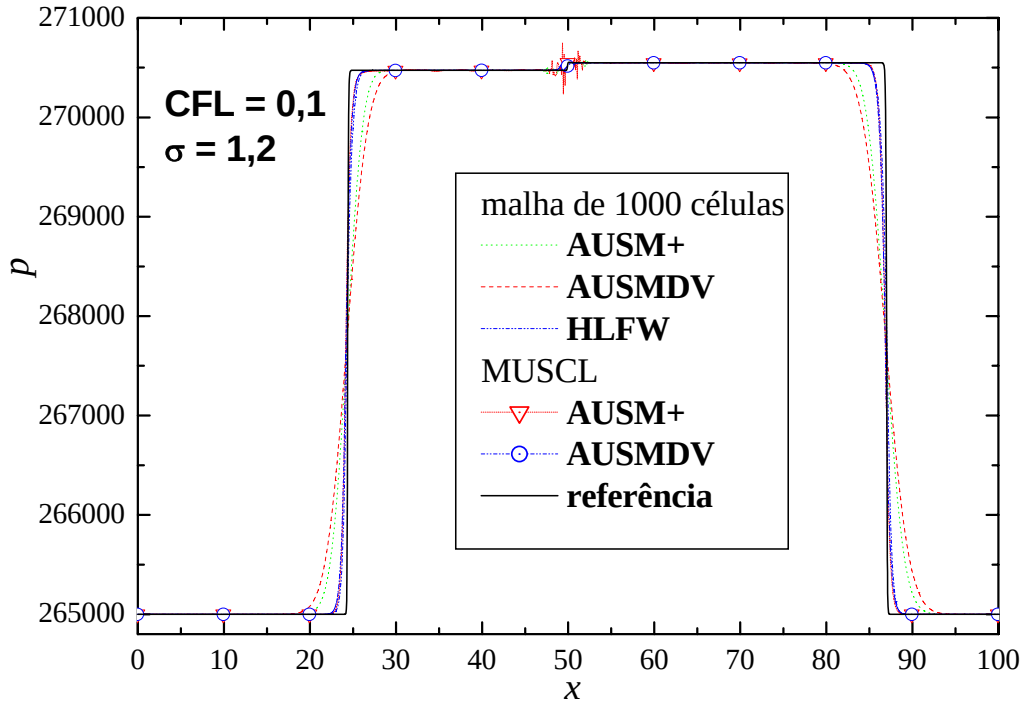


(a)

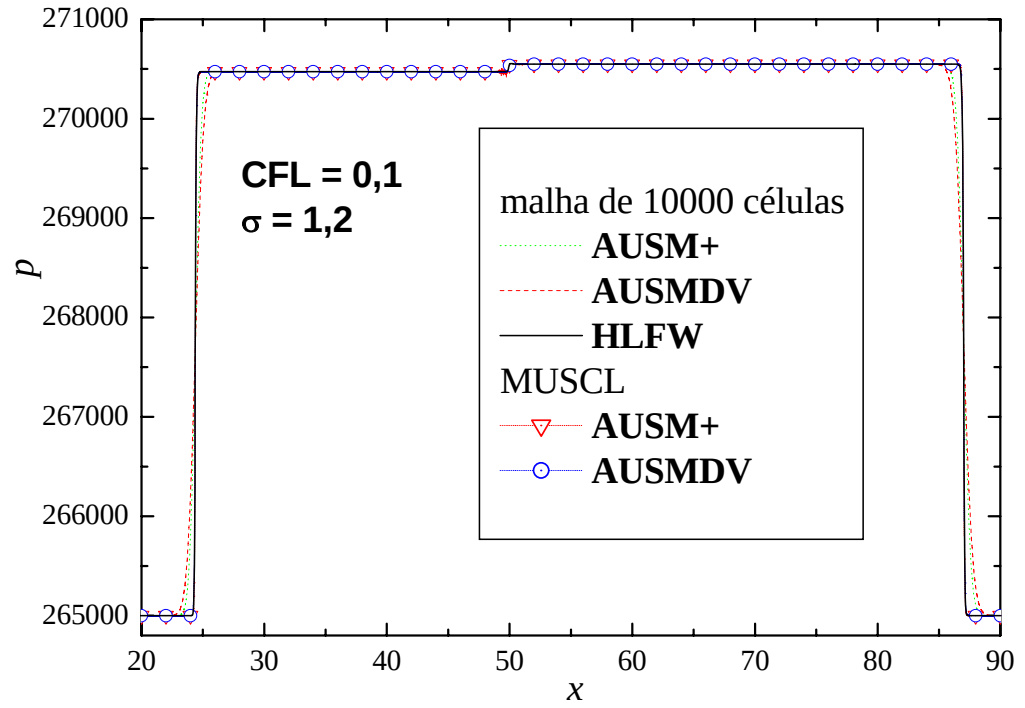


(b)

Figura 5.65 – Comparação para a pressão para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malhas de 100 (a) e 200(b) células com σ=1,2 (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.



(a)



(b)

Figura 5.66 – Comparação para a pressão para o problema de choque. Resultados para o AUSM+, AUSMDV, MUSCL AUSM+, MUSCL AUSMDV e HLFW para malhas de 1000(a) e 10000 (b) células com σ=1,2 (t = 0,1 s). Valores referenciais do HLFW com 10000 células.

5.4.2.2 Jato d'água (*Water Faucet*)

Outro problema padrão no teste de algoritmos numéricos para sistemas multifásicos é o da ação da gravidade sobre um jato de água vertical, proposto por Ransom (1987) e estudado por Toumi e Kumbaro (1996), Coquel *et al.* (1997), Evje e Flatten (2003), Paillère at al. (2003) e De Vuyst (2004), entre outros. Considera-se um duto vertical de 12 m de comprimento que, inicialmente, está uniformemente preenchido com uma mistura de água-ar onde a água tem fração volumétrica de água de 80% e velocidade de 10 m/s e o gás, a 20% em volume e à pressão assumida igual a $1{,}0 \times 10^5$ Pa, está estagnado. A pressão na saída é mantida igual à pressão atmosférica, enquanto que as demais variáveis têm seus valores mantidos constantes na entrada (v_g=0m/s, v_l=10m/s e α_g=0,2). A Figura 5.67 apresenta um esquema do problema.

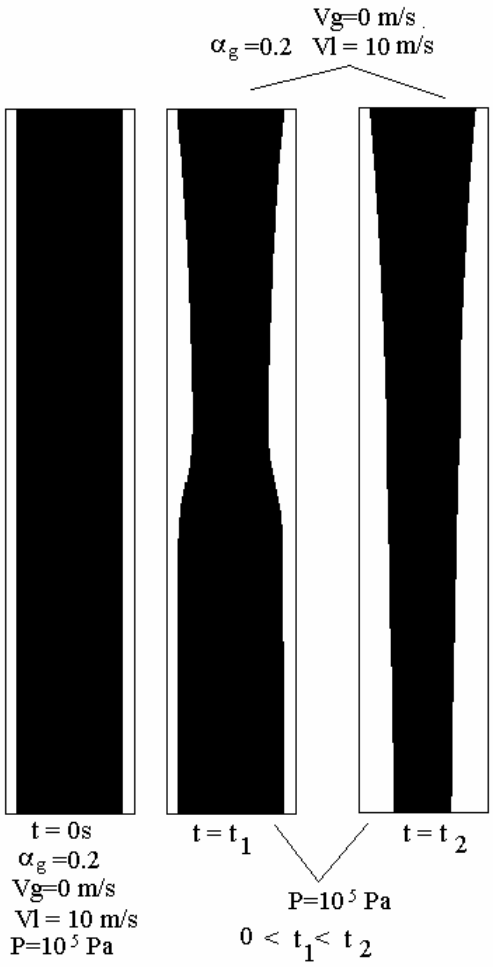


Figura 5.67 – Esquema do problema de jato d'água.

Este problema apresenta a seguinte solução analítica:

$$\alpha_g = \begin{cases} 1 - \dfrac{\alpha_{l0} v_{l0}}{\sqrt{v_{l0}^2 + 2gx}}, & \text{if } x < gt^2/2 + v_{l0}t \\ \alpha_{g0}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

As figuras 5.68 a 5.70 apresentam a solução completa do problema para o esquema HLFW com malha de 1280 células. A Figura 5.71 apresenta uma comparação entre os campos de pressão obtidos com o modelo hiperbólico e o não hiperbólico. Pode-se observar que o campo de pressão é extremamente afetado pelo valor de σ. Essa observação reforça aquela feita para o caso do choque em duto. Esse efeito é pouco sensível ao número de células utilizado.

O problema foi resolvido para diferentes funções de ponderação, *Y*, do esquema AUSMDV. Os resultados são apresentados na Figura 5.76. A adoção de $Y=\alpha/\rho$ ao invés de $Y=p/\rho$ ou $Y=1/\rho$ não trouxe qualquer melhoria para o AUSMDV ou para o MUSCL AUSMDV quando comparado a $Y= 1/\rho$. Liou (2000) observou que $Y= 1/\rho$ elimina o efeito de *carbuncle* mas isso não é importante em problemas unidimensionais. Nos resultados deste trabalho, nenhuma diferença considerável foi observada entre $Y= 1/\rho$ e $Y=p/\rho$ para o esquema AUSMDV para o problema de jato d'água. No entanto, $Y=p/\rho$ apresentou resultados instáveis para o esquema MUSCL AUSMDV e o uso de $Y= 1/\rho$ apresentou resultados sem grandes oscilações e com acurácia próxima àquela apresentada pelo método HLFW. Isto se deve ao caráter mais difusivo desta última função de ponderação que é proibitivo para o caso do problema de choque em duto. Portanto, $Y=p/\rho$ e $Y= 1/\rho$ foram consideradas as melhores opções para o problema em questão para os esquemas AUSMDV e MUSCL AUSMDV, respectivamente.

A Figura 5.72 e a Figura 5.73 apresentam uma comparação entre as soluções obtidas para o problema de jato d'água para malhas com 320, 640 e 1280 células. Esses números de células foram escolhidos para fins de comparação com os resultados de

Paillère *et al.* (2003). Os resultados do modelo de dois fluidos sem a correção de pressão interfacial (σ=0) são comparados para os esquemas AUSMDV ($Y=p/\rho$), AUSM+, as extensões a segunda ordem via MUSCL destes esquemas ($Y= 1/\rho$) e o HLFW. A Figura 5.74 e a Figura 5.75 apresentam os mesmos resultados mas com σ = 1,2. As seguintes observações podem ser feitas a partir das figuras apresentadas.

(i) O método AUSMDV apresentou maior difusão numérica que o esquema AUSM+ correspondente, e o MUSCL AUSMDV apresentou o mesmo comportamento em relação ao MUSCL AUSM+ correspondente para os dois valores de σ.

(ii) Análise dos resultados para σ = 0. Como os métodos não são TVD, para σ=0 (Figura 5.72 e Figura 5.73), as oscilações tendem a crescer quando a malha é refinada ou quando a ordem é estendida para segunda ordem. Isto foi confirmado tanto para o uso do esquema MUSCL quanto para o HLFW. O AUSM+ apresentou oscilações já na malha de 320 células, cuja amplitude aumentou quando a malha foi refinada. O AUSMDV apresentou difusão numérica acentuada, mas ausência de oscilações. Os esquemas MUSCL apresentaram oscilações, principalmente o MUSCL AUSM+, na malha de 320 células, enquanto que o HLFW apresentou pequena oscilação para a mesma malha. Para uma malha de 640 células, os métodos HLFW e MUSCL AUSMDV apresentaram soluções oscilatórias enquanto que o MUSCL AUSM+ gerou fortes oscilações a ponto de ser instável, quando não foi possível a obtenção da solução com qualquer malha. Todos os esquemas foram instáveis na malha de 1280 células e a solução não foi possível.

(iii) Análise dos resultados para σ = 1,2. O uso do modelo hiperbólico estabilizou os métodos AUSMDV, MUSCL AUSMDV e HLFW. O método AUSM+ e MUSCL AUSM+ continuam a apresentar oscilações que crescem com o aumento da malha. Assim como no caso σ = 0, o esquema MUSCL AUSMDV reduziu a difusão numérica em relação ao AUSMDV, porém, sem as pequenas oscilações observadas na Figura 5.73. As oscilações observadas para σ = 0 para o método HLFW também foram estabilizadas para σ = 1,2.

Com base nas figuras apresentadas as seguintes observações gerais podem der feitas:

(i) a correção de pressão interfacial aumentou a acurácia de todas as soluções, tornando possíveis as soluções pelos esquemas MUSCL na malha refinada (Figura 5.74 e Figura 5.75).

(ii) Como observado no problema de choque em duto, a solução pelo HLFW foi a mais acurada seguida de perto pelo esquema MUSCL AUSMDV.

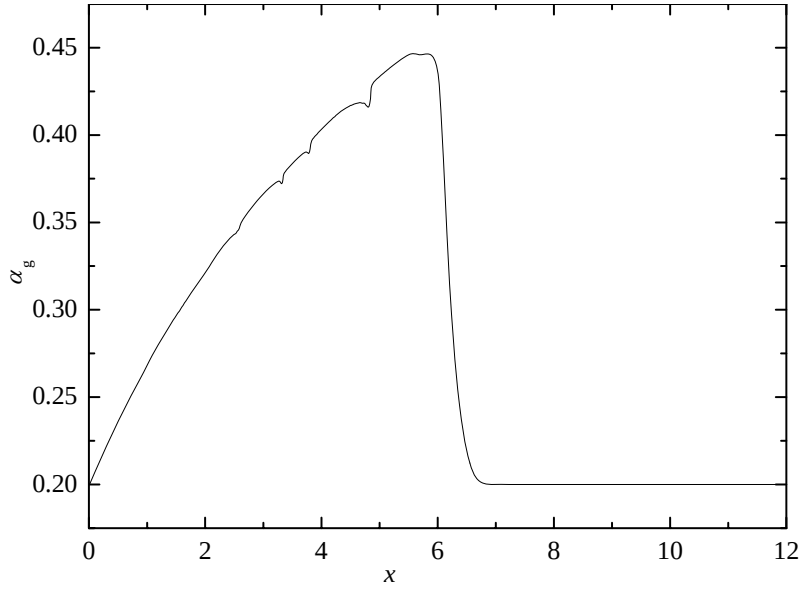


Figura 5.68 – fração volumétrica de gás para o esquema HLFW com 10000 células e σ=1,2 (at t = 0,5 s).

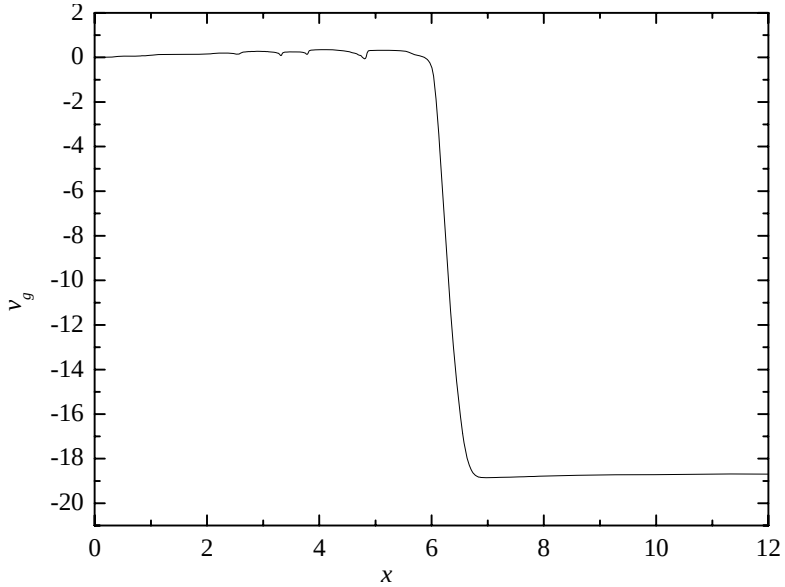


Figura 5.69 – velocidade do gás para o esquema HLFW com 10000 células e σ=1,2 (at t = 0,5 s).

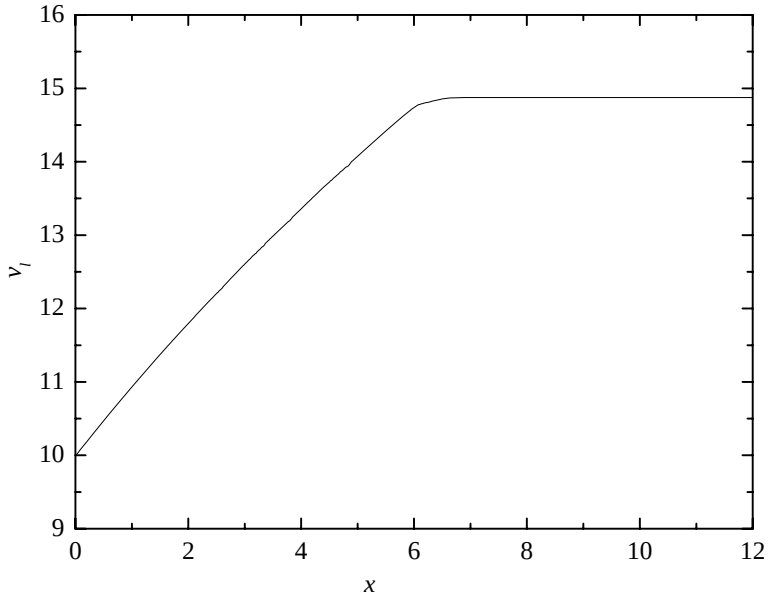


Figura 5.70 – velocidade do líquido para o esquema HLFW com 10000 células e σ=1,2 (at t = 0,5 s).

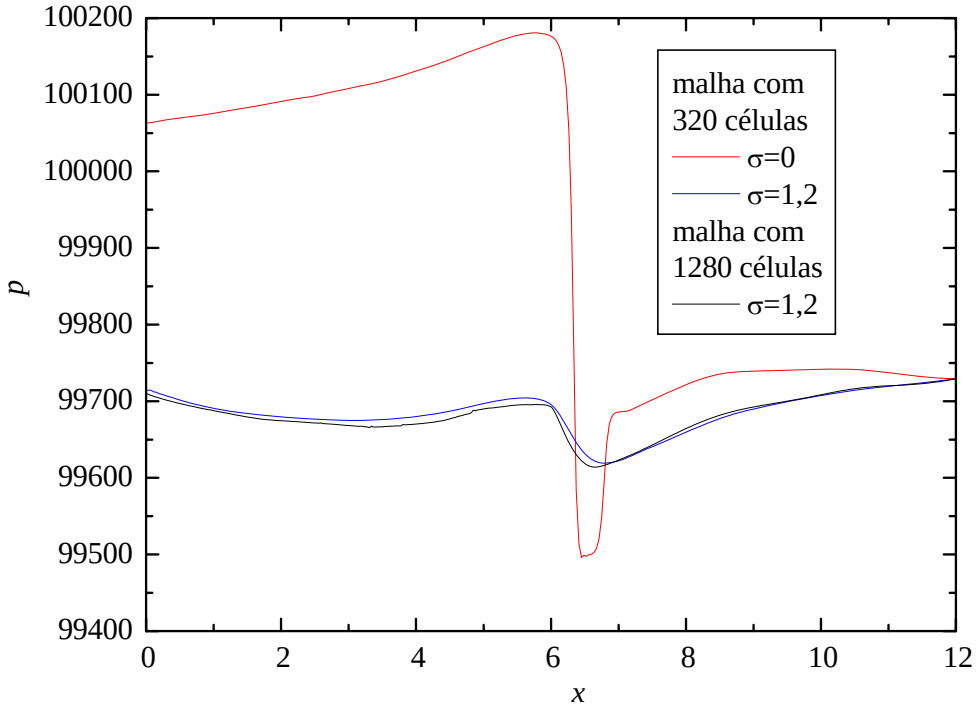
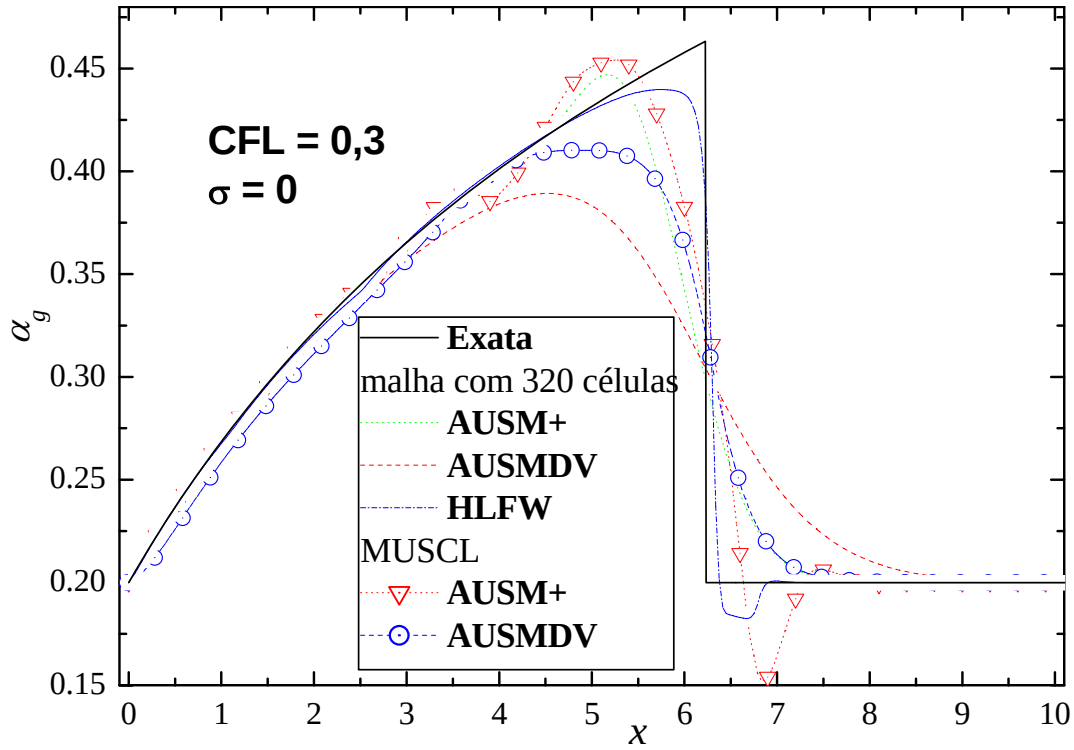
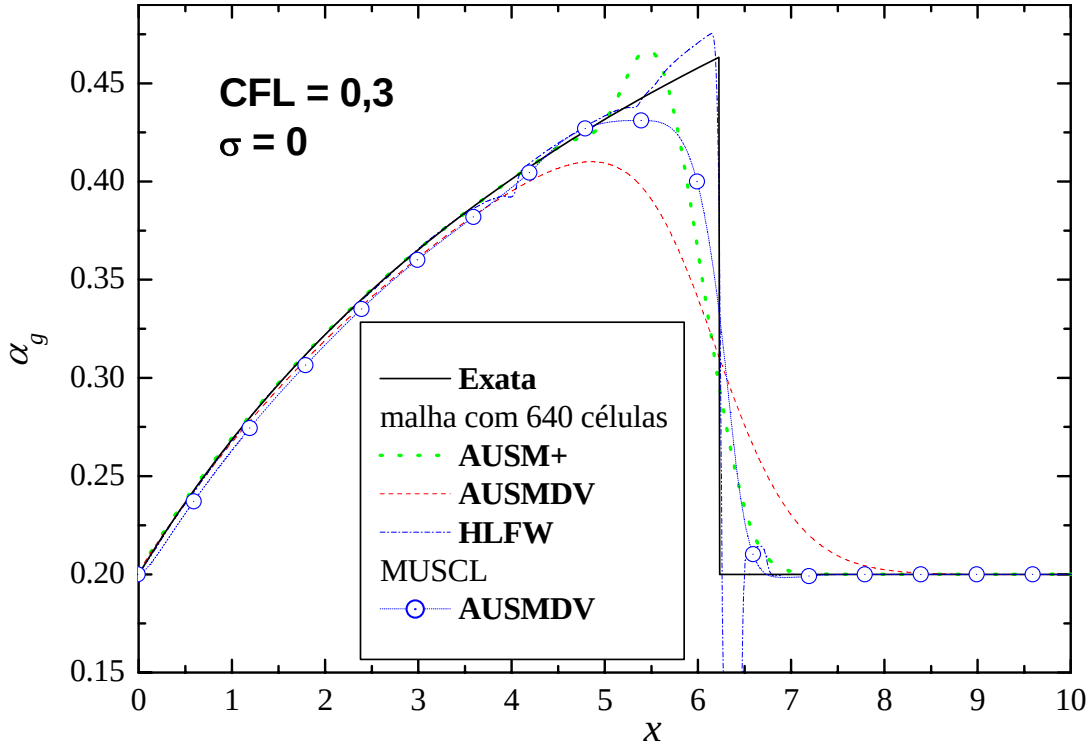


Figura 5.71 – Pressão para o esquema HLFW, efeito do valor de σ=1,2 sobre o campo de pressão (at t = 0,5 s).



(a)



(b)

Figura 5.72 -Comparação das frações volumétricas de gás para o problema de jato d'água. Resultados de ASUM+, AUSMDV, MUSCL AUSMDV e AUSM+ e HLFW para malhas de 320 (a) e 640 (b) células sem correção de pressão interfacial (t = 0,5 s).

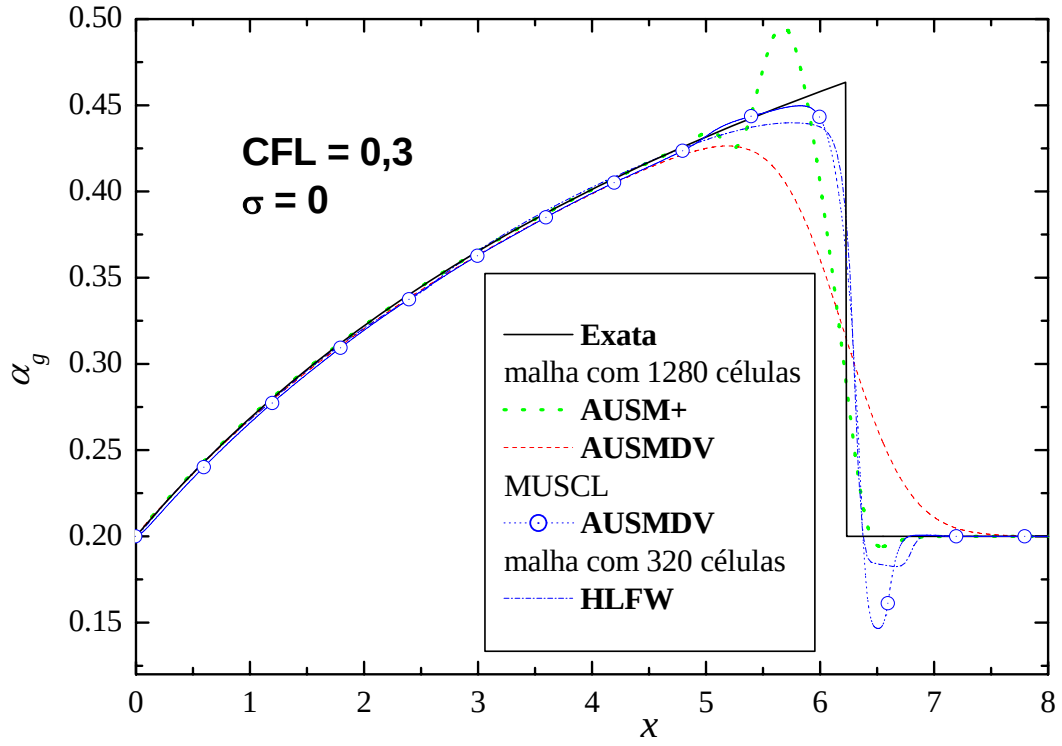
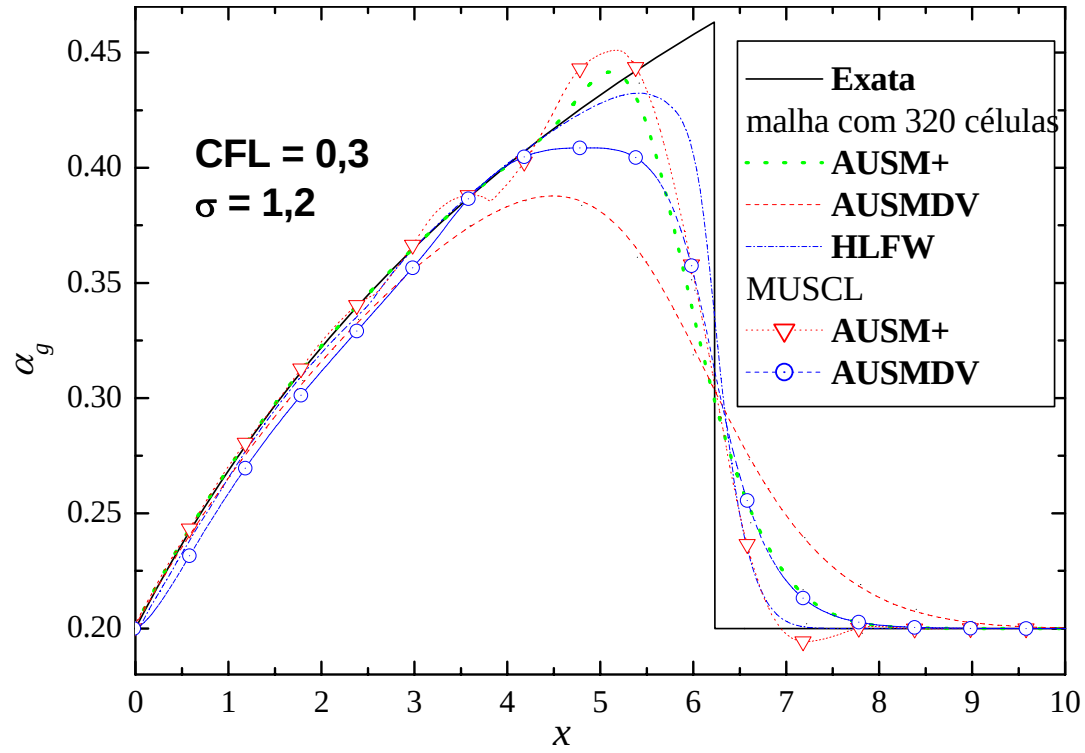
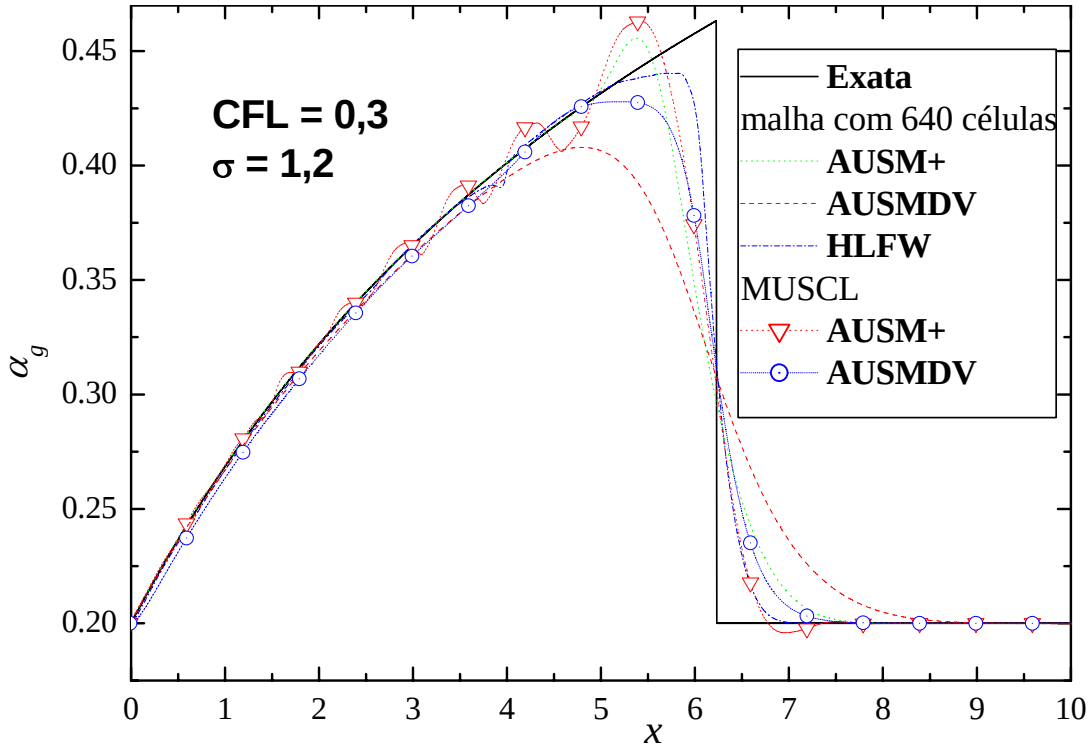


Figura 5.73 -Comparação das frações volumétricas de gás para o problema de jato d'água. Resultados de ASUM+, AUSMDV, MUSCL AUSMDV e AUSM+ e HLFW para malha de 1280 células sem correção de pressão interfacial (t = 0,5 s).



(a)



(b)

Figura 5.74 - Comparação das frações volumétricas de gás para o problema de jato d'água. Resultados de ASUM+, AUSMDV, MUSCL AUSMDV e AUSM+ e HLFW para malhas de 320 (a) e 640 (b) células com σ=1,2 (t = 0,5 s).

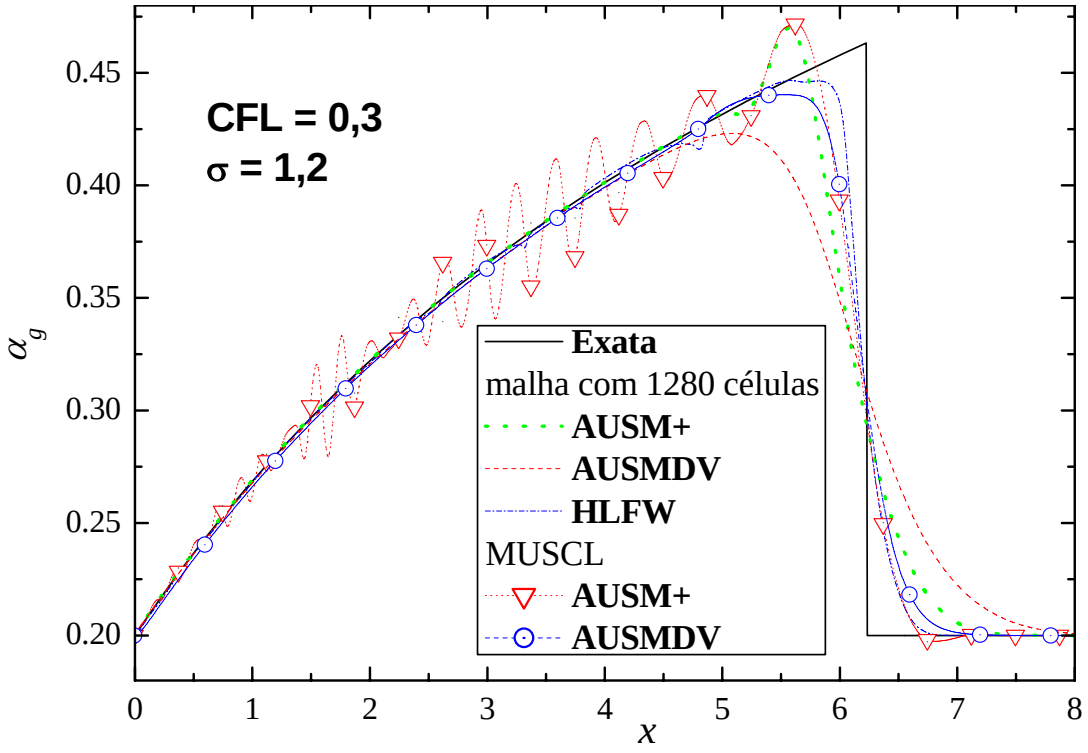


Figura 5.75 - Comparação das frações volumétricas de gás para o problema de jato d'água. Resultados de ASUM+, AUSMDV, MUSCL AUSMDV e AUSM+ e HLFW para malha de 1280 células com σ=1,2 (t = 0,5 s).

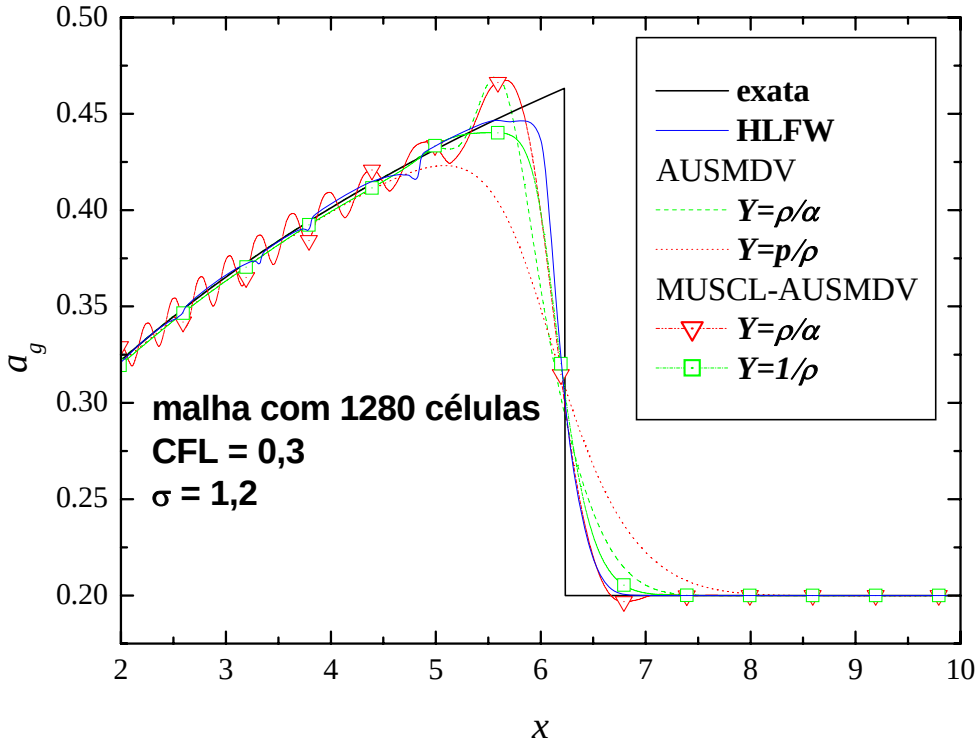


Figura 5.76 – Comparação dos resultados do AUSMDV para diferentes funções de ponderação (at t = 0.5 s).

5.4.2.3 Choque em duto com o modelo de mistura

Faille e Heintzé (1999) apresentaram um problema de choque resolvido com o modelo de mistura. Este problema será usado para validação do mesmo modelo no Titãs. Seja o problema de Riemann com os estados (α_g, v_g, p) à direita e à esquerda dados respectivamente por (0,55; 29,6 m/s; 523204,07 Pa) e (0,55; 2,511 m/s; 804299,96 Pa). A descontinuidade está inicialmente localizada em x=45m. O comprimento total é de 90 m. A solução é composta por duas ondas de choque e uma descontinuidade de contato. As figuras 5.77 a 5.79 apresentam os perfis de velocidade superficial de gás e do líquido, de fração volumétrica de gás e de pressão no instante t=0,6s, obtidos com o método HLFW . Observando-se os resultados na referência supra-citada, não é possível notar nenhuma diferença entre seus resultados e os do presente trabalho.

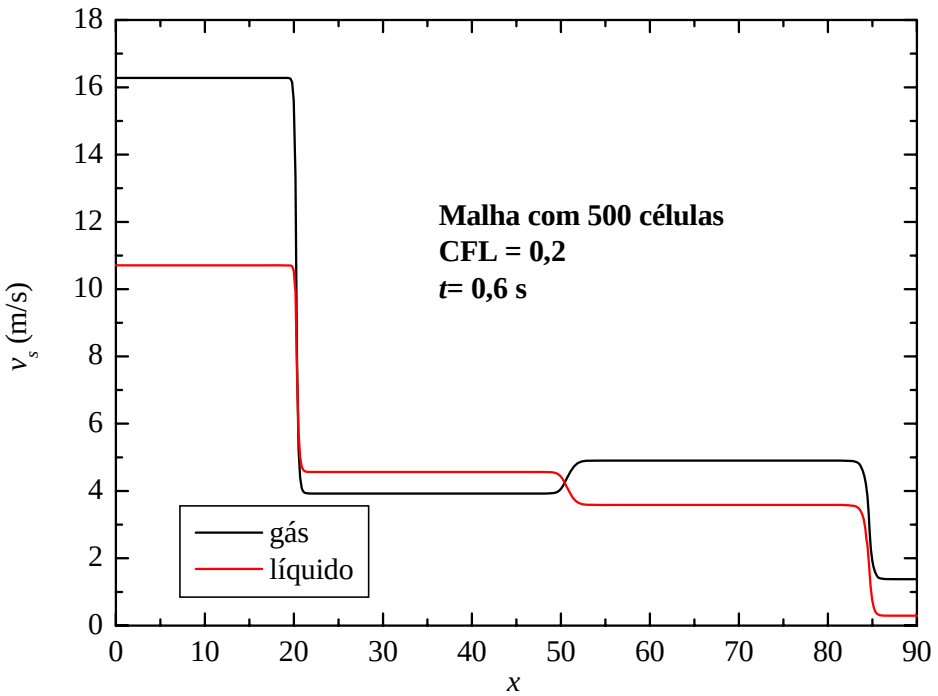


Figura 5.77 – Perfis de velocidades superficiais de gás e líquido (t = 0.6 s).

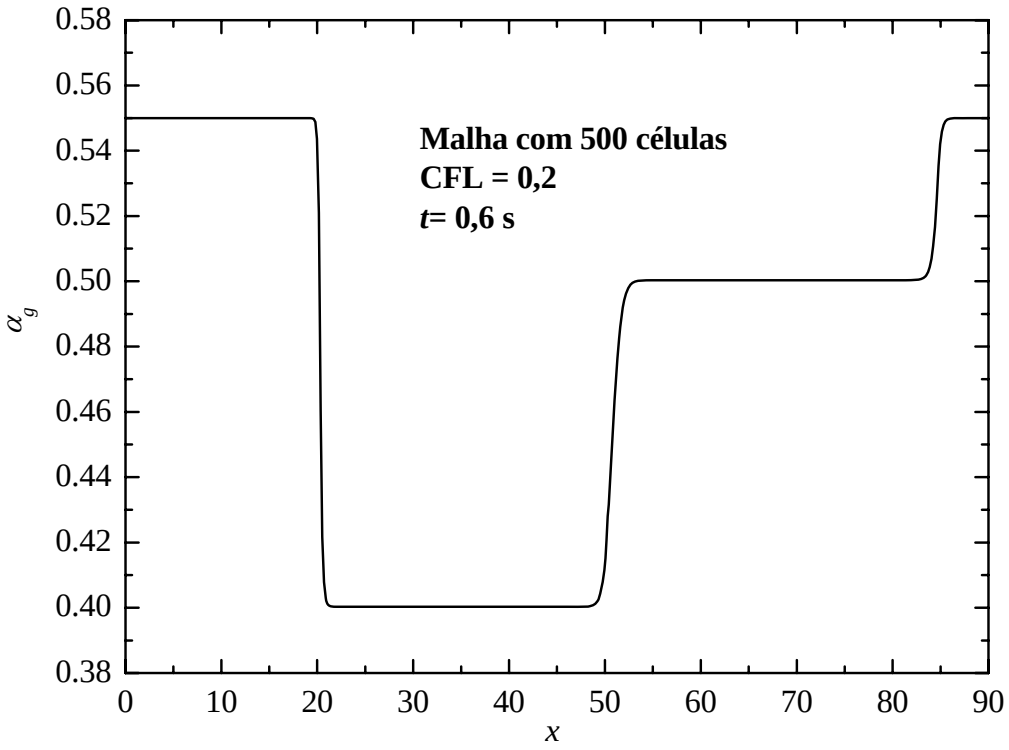


Figura 5.78 – Perfil de fração volumétrica de gás (t = 0,6 s).

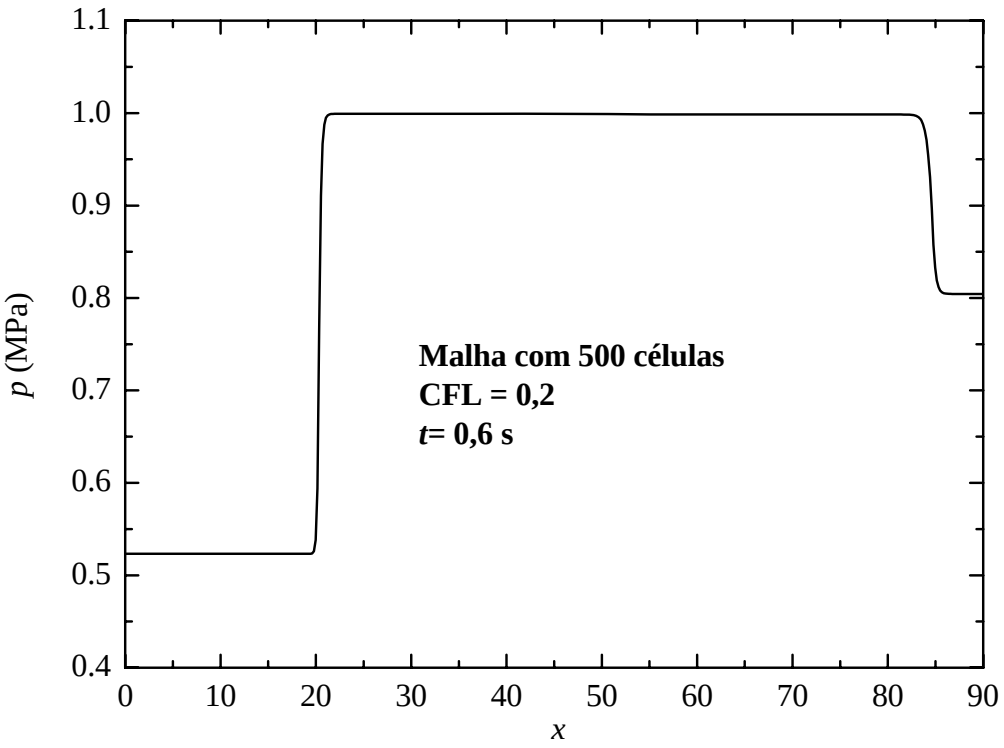


Figura 5.79 – Perfil de pressão (t = 0,6 s).

5.4.2.4 Transiente em dutos horizontais

Um problema de grande interesse envolvendo sistemas multifásicos é o de simulação de transientes em dutos. Tipicamente, em oleodutos o escoamento será multifásico devido à despressurização do óleo, já que algum gás se forma mesmo que o óleo seja morto, ou seja, algum processo de separação já tenha retirado as frações mais leves. Além disso, nos sistemas de produção, as linhas submarinas podem ter desde óleo puro até óleos com cerca de 99% de gás. Em qualquer um desses casos, freqüentemente, variações de vazão poderão ocorrer. Para os exemplos a seguir, apenas o método HLFW foi utilizado visto que foi o que apresentou os melhores resultados para os casos de escoamentos bifásicos anteriores. O algoritmo de previsão do padrão de escoamento é o mesmo utilizado por Taitel e Barnea (1997) para o modelo de quase-equilíbrio e é apresentado no Apêndice A. As simulações com o modelo de dois fluidos foram realizadas assumindo que o termo de arraste é dado por:

$$\tau_i = \frac{\rho_l C_D (v_g - v_l) | v_g - v_l | S_i}{2A} \tag{5.16}$$

onde A é a área da seção transversal do duto e Si é o perímetro da interface gás-líquido.

Seja um duto de 10000 m de comprimento, diâmetro de 0,146 m, rugosidade 1,5 x 10^{-4} m, operando com uma pressão de descarga de 1,0 x 10^6 Pa. Os fluidos são dados pela EdE eq. 4.52 com γ_g=1,0; Π_g=0 e A_g=99856; γ_l=1,0; Π_l=9,999x10^8 e A_l=1,0x10^6. As viscosidades do gás e do líquido são iguais a 7,6x10^{-5} kg.m/s e 1,0x10^{-3} kg.m/s, respectivamente, e a tensão superficial é de 0,073 N/m^2, e com C_D constante igual a 0,146. Nesta simulação, o duto encontra-se inicialmente com 50% de líquido e 50% de gás estagnados. As vazões mássicas de gás e de líquido na entrada são instantaneamente aumentadas para 0,2 kg/s e 20,0 kg/s, respectivamente. O problema é rodado até que a variação das variáveis seja muito pequena (próximo a 0,01%). A partir do estado estacionário obtido, a vazão de gás é dobrada em 10s. As figuras 5.80 a 5.82 mostram o perfil de fração volumétrica, pressão na entrada do duto e vazão de líquido na saída do duto. O indicador de padrão de escoamento não foi incluído porque, em todo o duto e

para todos os instantes de tempo apresentados, o padrão de escoamento previsto foi o intermitente.

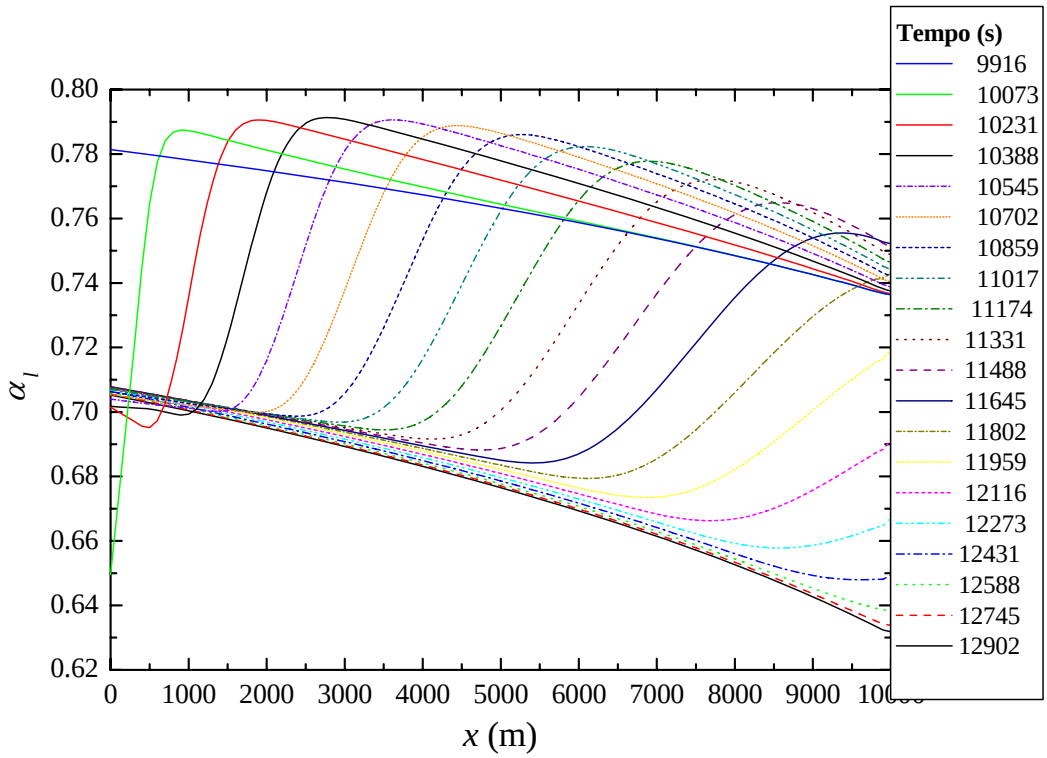


Figura 5.80 – Perfil de fração volumétrica devido ao aumento da vazão de gás, C_D = 0,146 fixo.

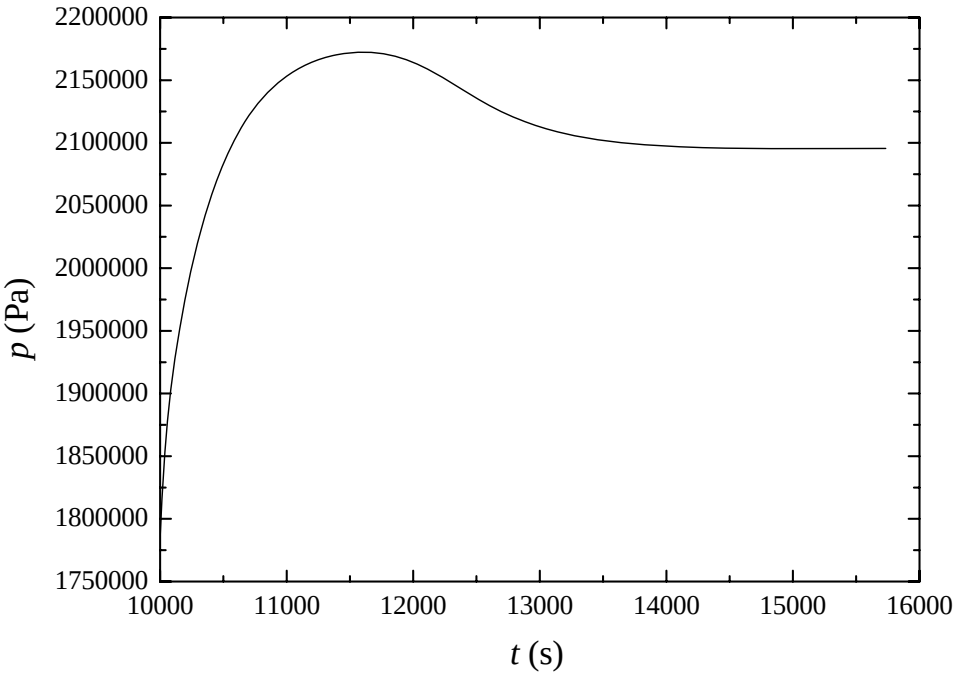


Figura 5.81 – Histórico da pressão de entrada devido ao aumento da vazão de gás, C_D = 0,146 fixo.

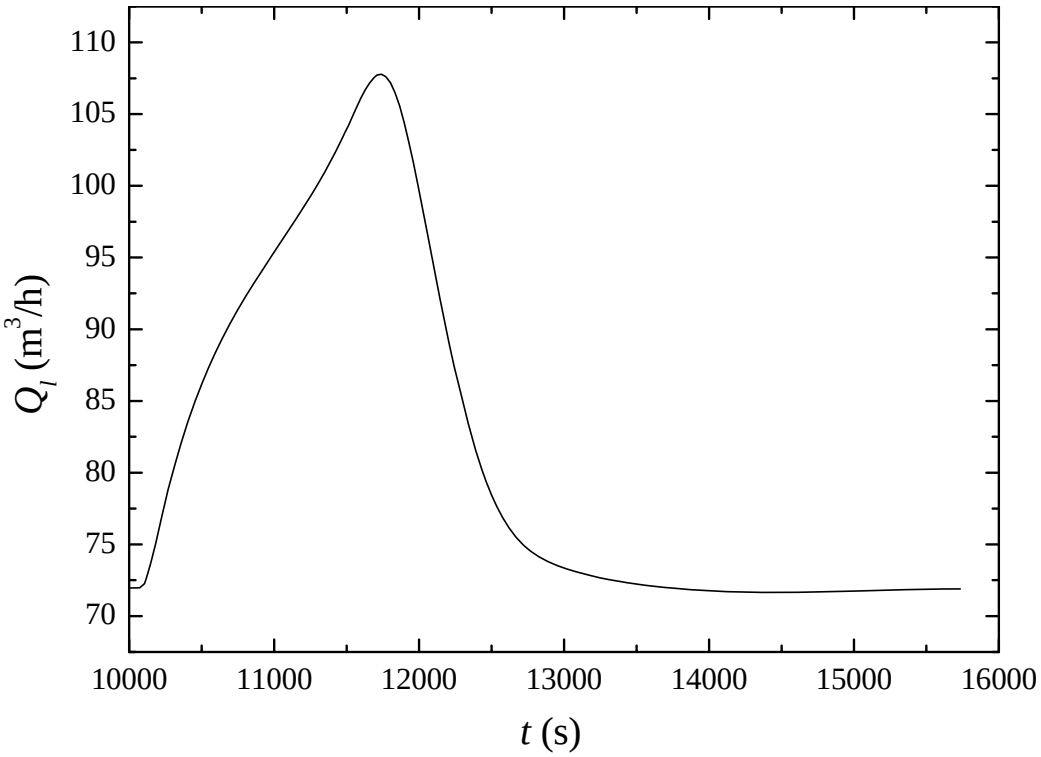


Figura 5.82 – Histórico da vazão volumétrica de líquido na descarga devido ao aumento da vazão de gás, C_D = 0,146 fixo.

O mesmo problema foi também simulado com o valor de C_D artificialmente aumentado em dez vezes (C_D = 1,46), independentemente do padrão de escoamento para avaliar a robustez do método. As figuras 5.83 e 5.84 mostram os históricos de pressão na entrada e de vazão volumétrica de líquido na saída, respectivamente, durante a fase de aumento da vazão de gás. Pode-se perceber que a velocidade do líquido aproxima-se logo da velocidade do gás gerando um pico um pouco menor na saída. No entanto, a pressão necessária para impor esta condição de vazão mássica é maior. O método se mostrou estável para ambos valores de C_D empregados. Este exemplo é importante para mostrar a origem dos efeitos observados no caso a seguir.

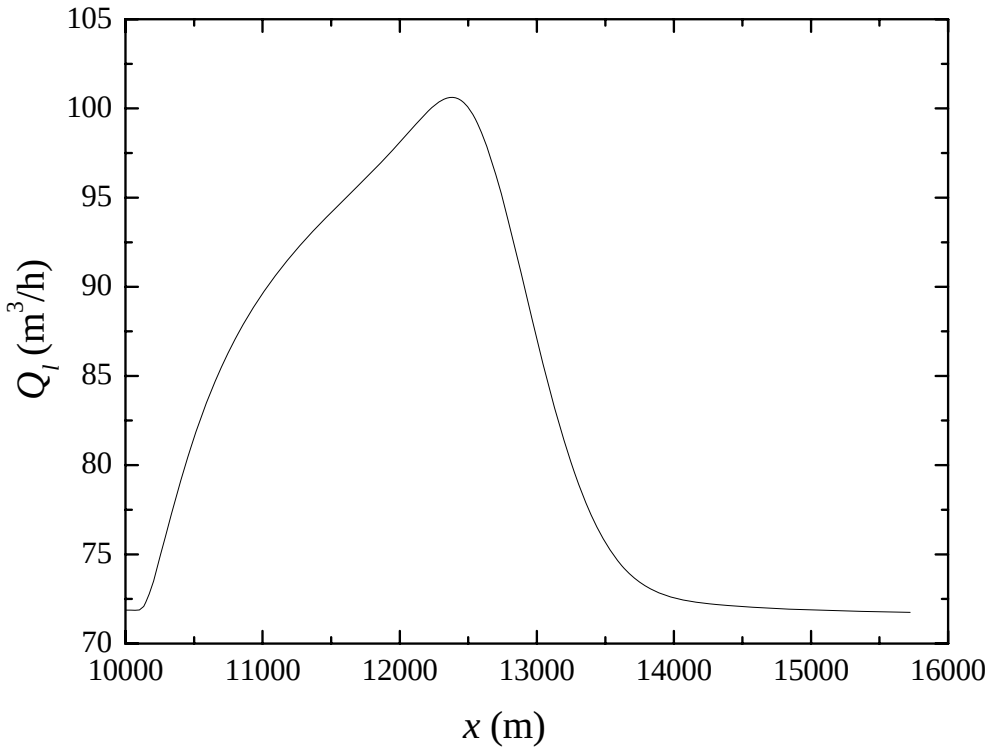


Figura 5.83 – Histórico da vazão volumétrica de líquido na descarga devido ao aumento da vazão de gás, C_D = 1,46 fixo.

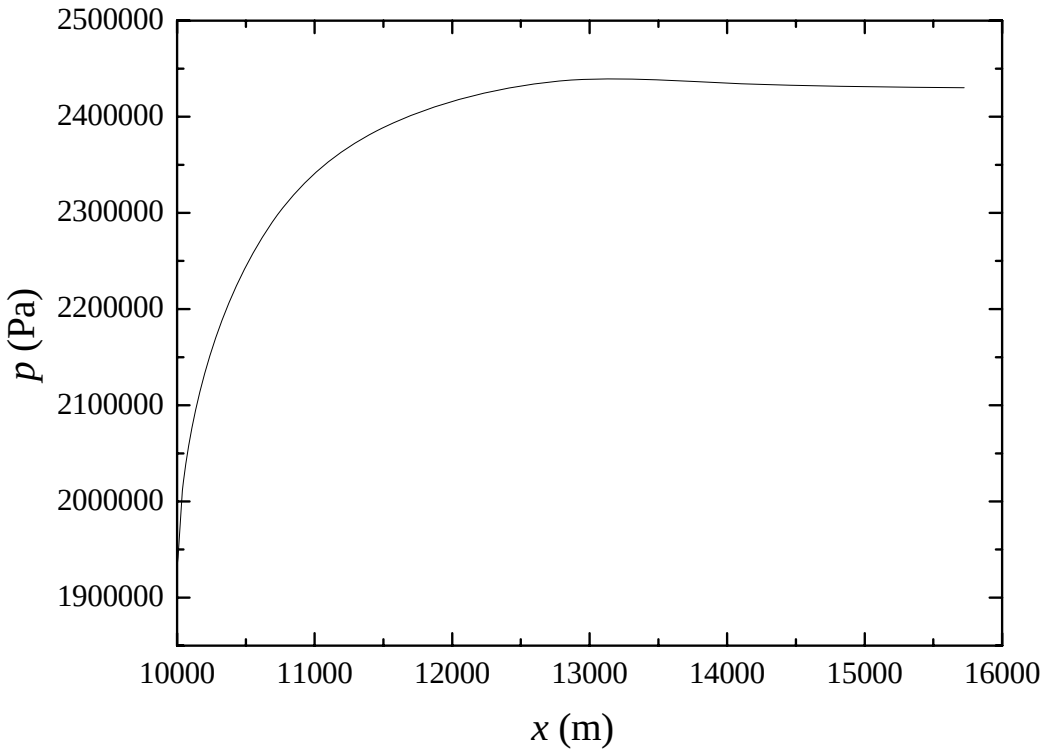


Figura 5.84 – Histórico da pressão na entrada devido ao aumento da vazão de gás, C_D = 1,46 fixo.

O primeiro caso é simulado novamente, porém, artificialmente, o C_D é aumentado em dez vezes **apenas** quando o padrão de escoamento é intermitente. As figuras 5.85 e 5.90 mostram os perfis de fração volumétrica de líquido e de pressão durante a partida da linha (líquido e de gás inicialmente estagnados) para diferentes frações volumétricas iniciais de líquido, a qual é abruptamente submetida às vazões de 0,2kg/s e 20 kg/s para o gás e o líquido, respectivamente. O resultado é apresentado para uma condição inicial na qual o duto tem 20%, 50% e 80% de líquido. Pode-se perceber que, para 20% de líquido, é necessário um tempo maior para que a onda de fração volumétrica atinja a saída, porém, a amplitude da mesma onda é muito superior. Neste caso, ter-se-ia um grande aumento instantâneo de vazão na saída.

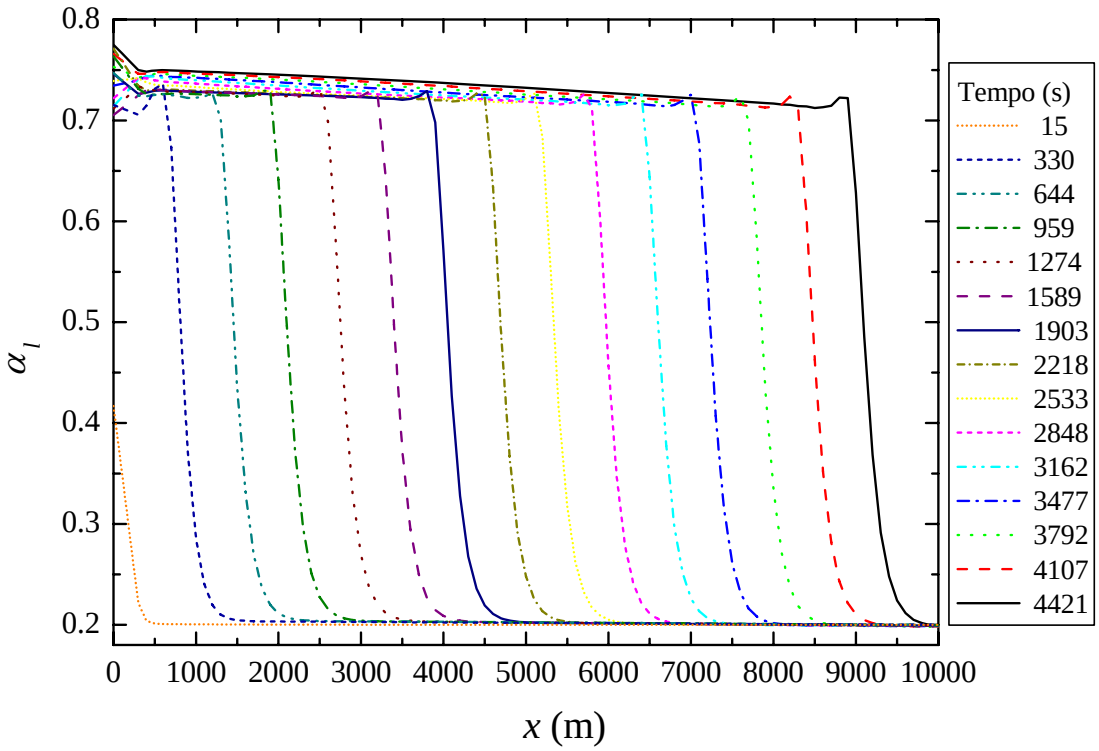


Figura 5.85 – Perfil de fração volumétrica devido ao aumento da vazão de gás, C_D variando com o padrão de escoamento. 20% de líquido.

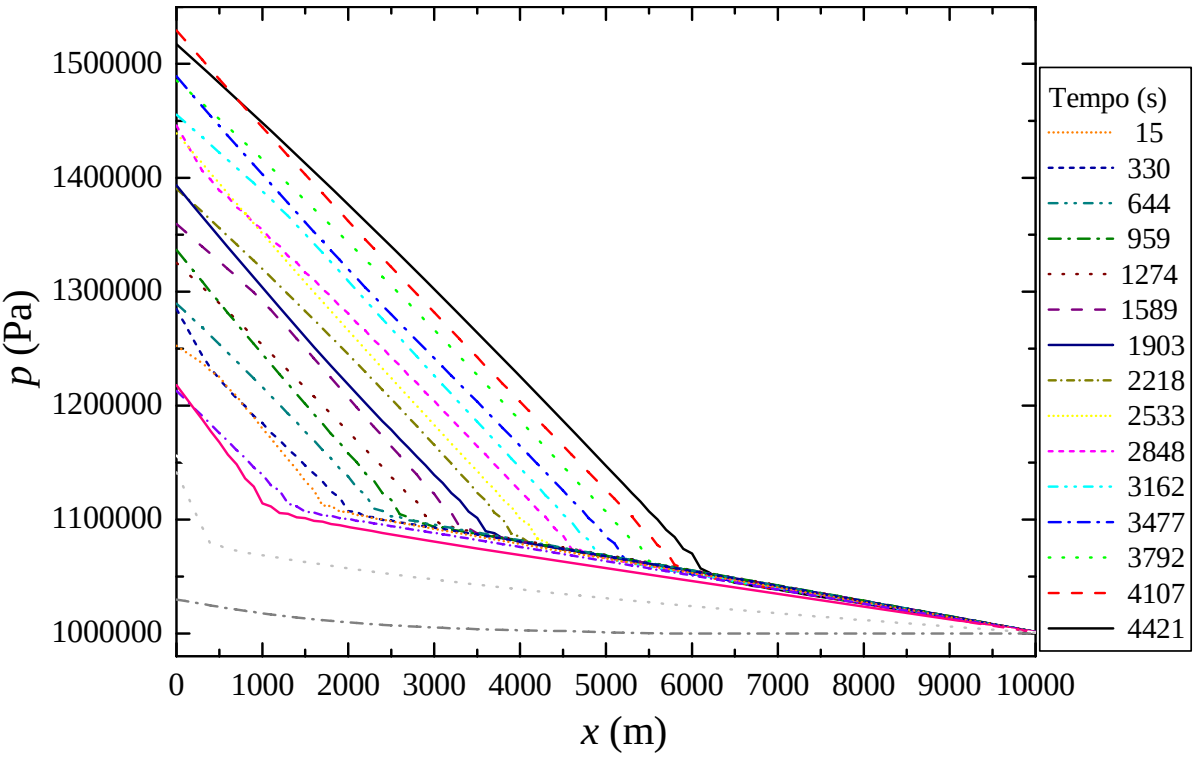


Figura 5.86 – Perfil de pressão devido ao aumento da vazão de gás, C_D variando com o padrão de escoamento. 20% de líquido.

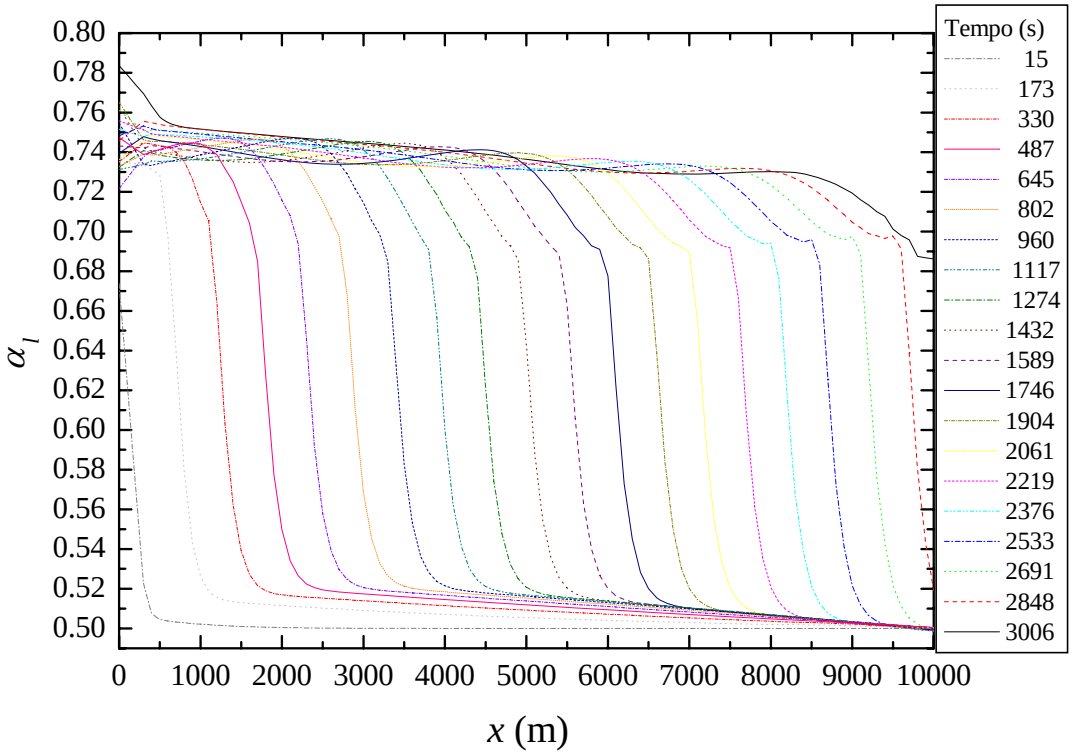


Figura 5.87 – Perfil de fração volumétrica devido ao aumento da vazão de gás, C_D variando com o padrão de escoamento. 50% de líquido.

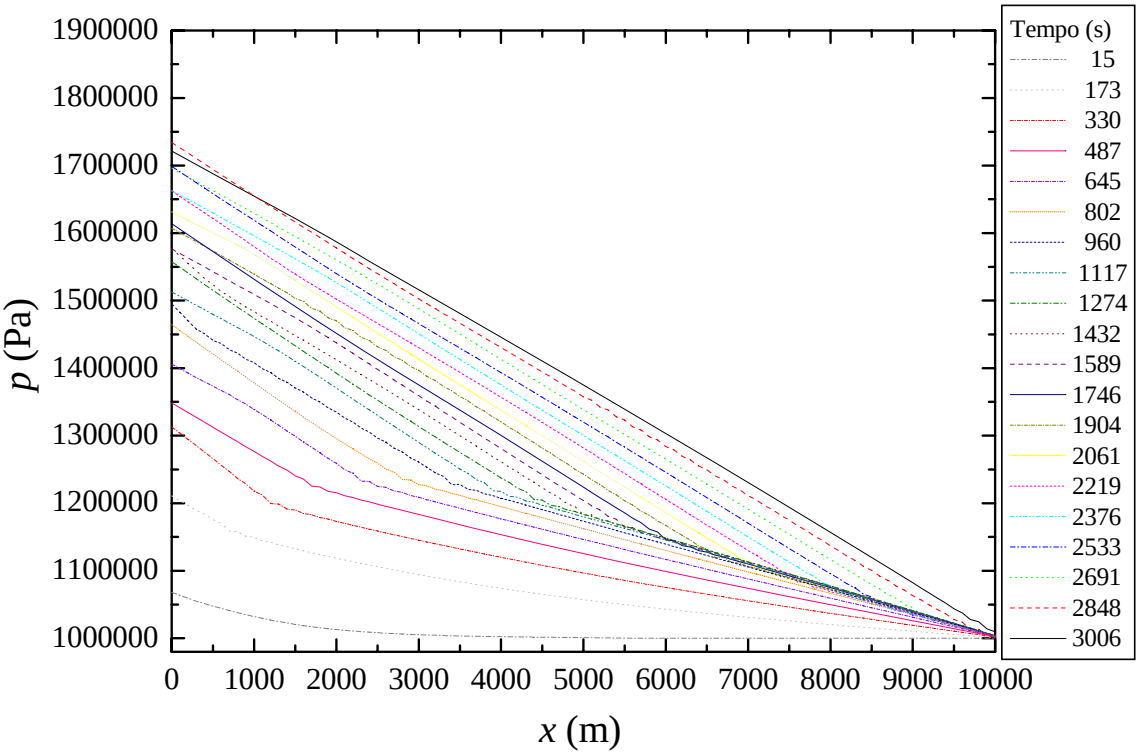


Figura 5.88 – Perfil de pressão devido ao aumento da vazão de gás, C_D variando com o padrão de escoamento. 50% de líquido.

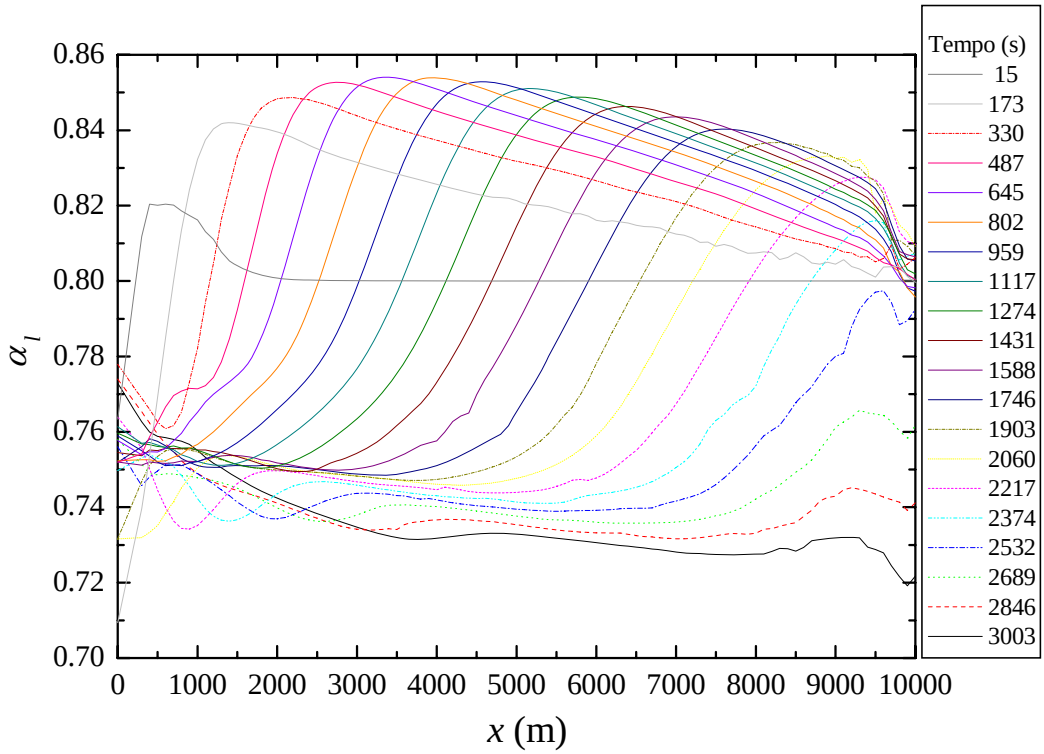


Figura 5.89 – Perfil de fração volumétrica devido ao aumento da vazão de gás, C_D variando com o padrão de escoamento. 80% de líquido.

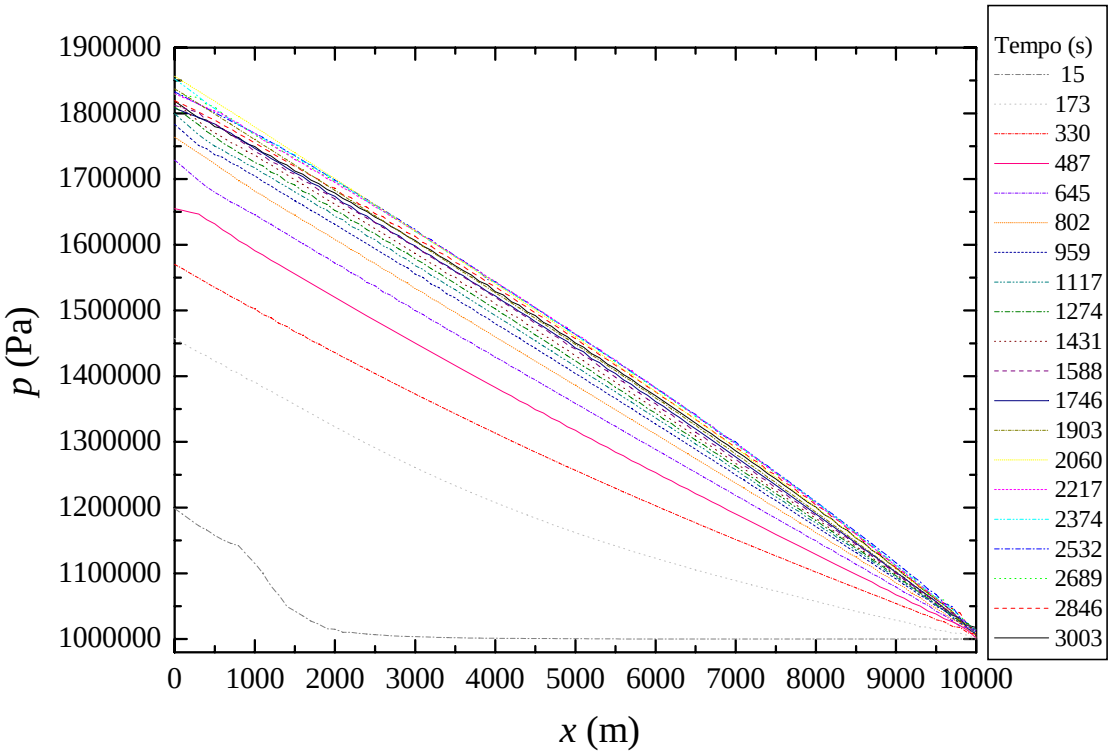


Figura 5.90 – Perfil de pressão devido ao aumento da vazão de gás, C_D variando com o padrão de escoamento. 80% de líquido.

Observando-se agora os históricos de pressão na entrada e vazão volumétrica de líquido na descarga, pode-se perceber os efeitos oscilatórios devido ao modelo empregado, e não devido ao método numérico, provocados pela mudança de regime de escoamento. Isso pode ser comprovado a partir dos resultados anteriores nos quais usando-se C_D=0,146 ou C_D=1,46 fixos, obtém-se resultados estáveis e sem oscilação.

O primeiro aspecto importante é que, para as várias condições iniciais, os comportamentos transientes de variáveis relevantes apresentam-se diferentes e oscilatórios. Entretanto, independentemente da fração de líquido inicial, estas variáveis atingem comportamentos médios similares após um determinado tempo. Os comportamentos transientes mencionados para a vazão na saída do duto e para a pressão na sua entrada são apresentados na Figura 5.91e na Figura 5.92.

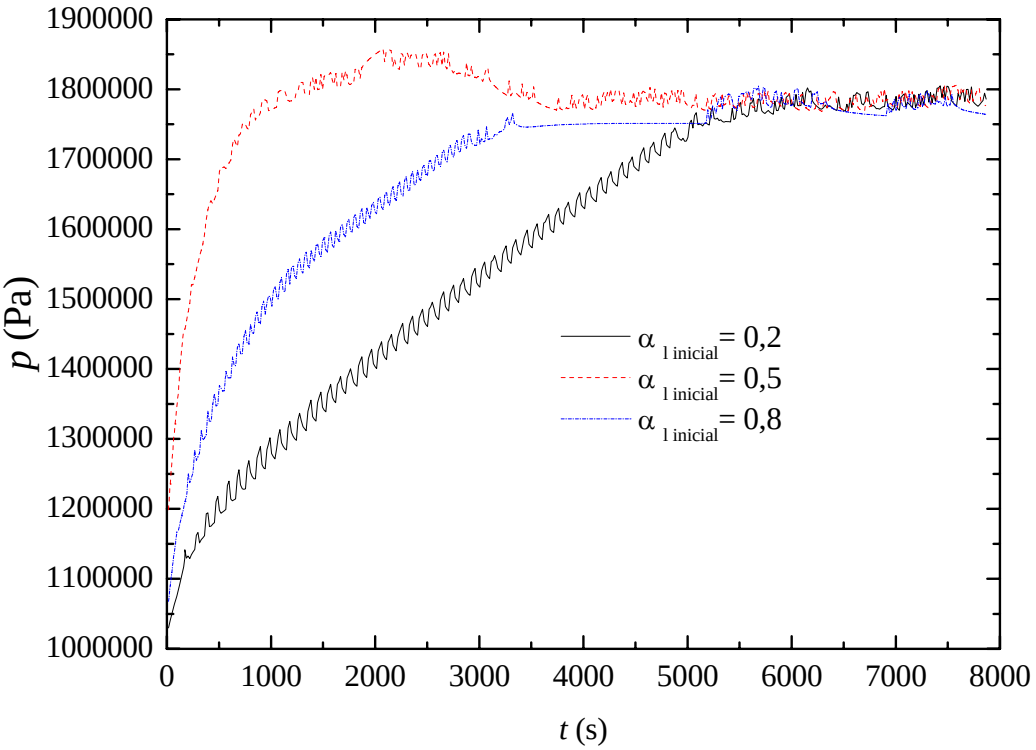


Figura 5.91 – Histórico da pressão de entrada devido à partida do duto, C_D variando com o padrão de escoamento.

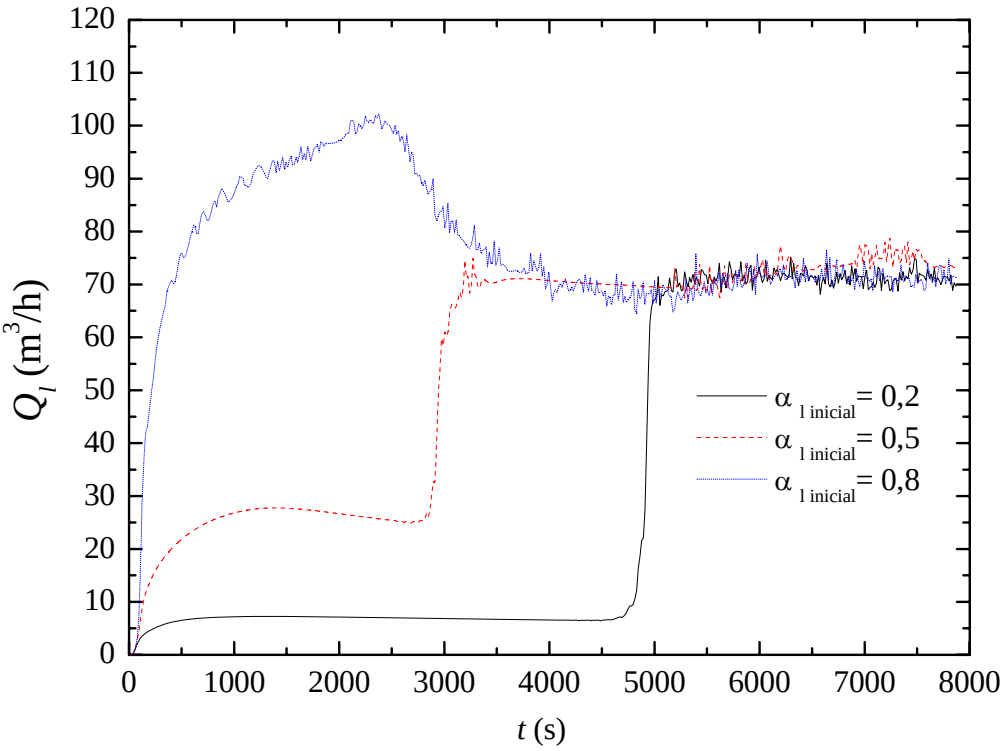


Figura 5.92 – Histórico da vazão volumétrica de líquido na descarga devido à partida do duto, C_D variando com o padrão de escoamento.

As figuras 5.93 a 5.96 mostram, respectivamente, o perfil de fração volumétrica, o comportamento transiente do indicador de padrão de escoamento (1- Estratificado e 3- intermitente) em alguns pontos, e os históricos de pressão na entrada e vazão volumétrica de líquido na saída durante o aumento da vazão de gás passando de 0,2 kg/s para 0,4 kg/s. Particularmente, o padrão de escoamento mostra que a aceleração do escoamento promove a mudança de regime de escoamento pela formação de *slugs*. Isto acarreta no aumento do coeficiente de arraste que promove uma desaleceração do escoamento, que volta a ser estratificado. Pode-se observar que para todas as posições, um *slug* passa pela linha seguido de um padrão de escoamento estratificado. É possível observar que o sistema não atinge um estado estacionário real, apresentando um valor periódico após longo tempo de simulação, com média próxima à obtida para a simulação sem a variação do C_D com o padrão de escoamento.

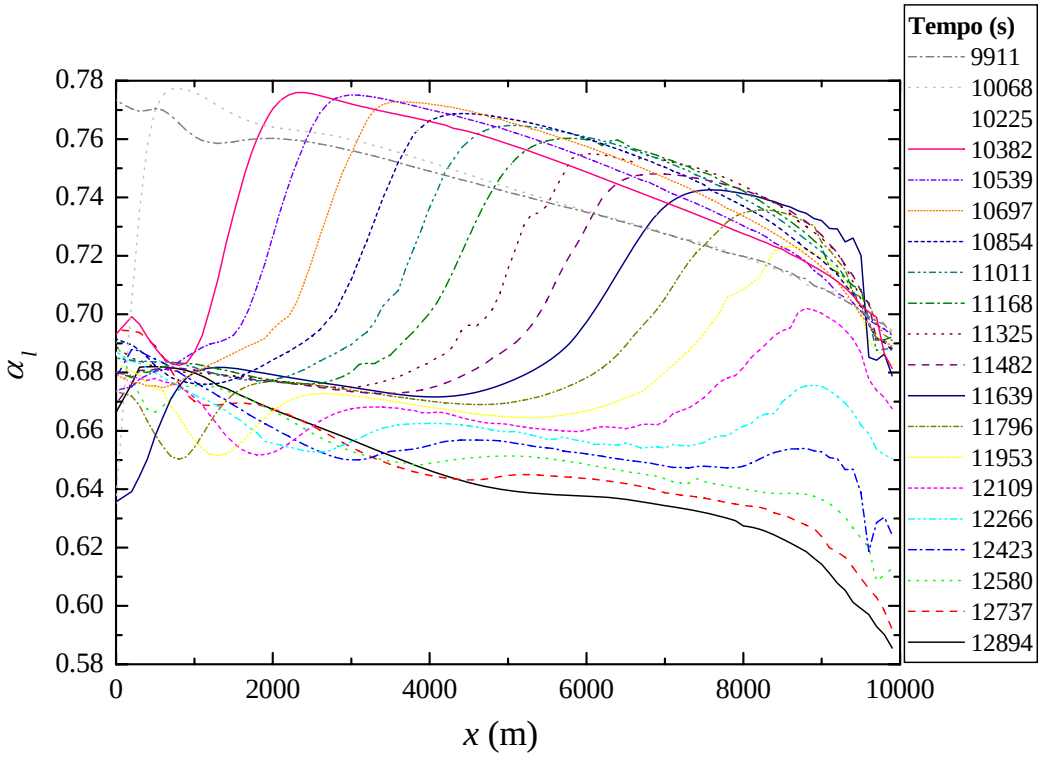


Figura 5.93 – Perfil de fração volumétrica devido ao aumento da vazão de gás, C_D variável.

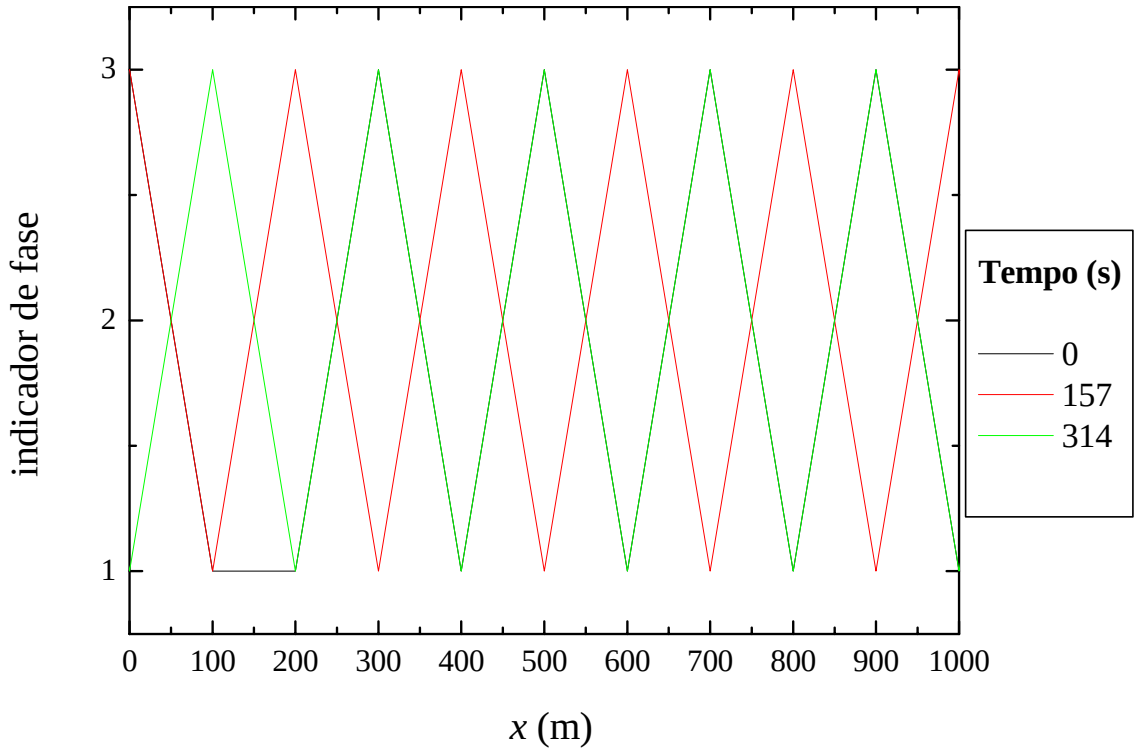


Figura 5.94 – Histórico de padrão de escoamento para instantes selecionados devido ao aumento da vazão de gás, C_D variável. 1- Estratificado; 3-intermitente.

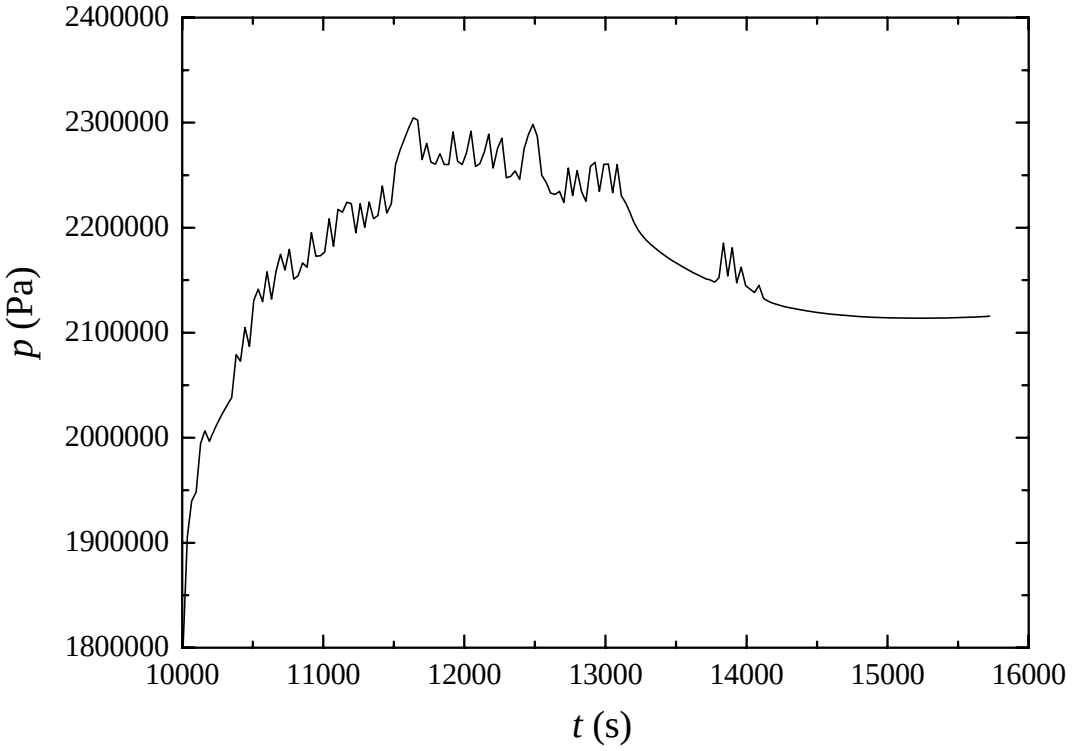


Figura 5.95 – Histórico da pressão de entrada devido ao aumento da vazão de gás, C_D variável.

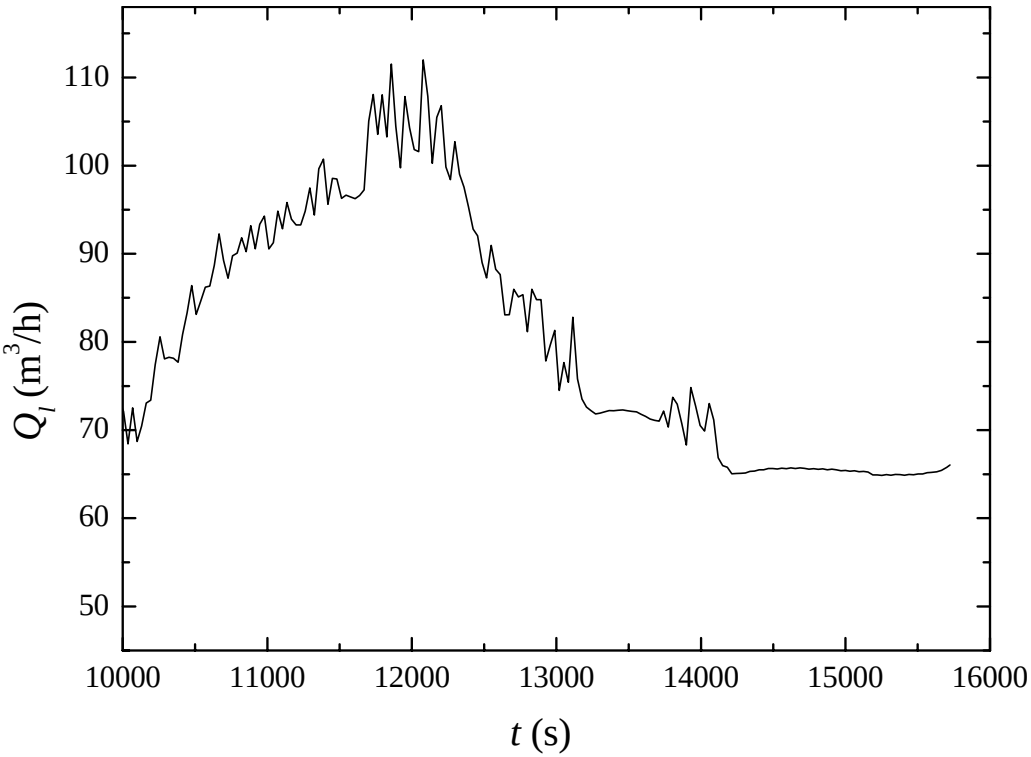


Figura 5.96 – Histórico da vazão volumétrica de líquido na descarga devido ao aumento da vazão de gás, C_D variável.

O mesmo tipo de simulação foi realizado com o objetivo de comparar os resultados do modelo de mistura com o modelo de dois fluidos. No modelo de mistura, foi utilizada uma relação na mesma forma proposta por Bendiksen (1984), a saber, $v_g=C_0(\alpha_g v_g+\alpha_l v_l)+C_1$. Os valores das constantes adotados foram ajustados a partir dos resultados de velocidade de líquido e gás e fração volumétrica de líquido com o modelo de dois fluidos para o caso com C_D fixo apresentado anteriormente, porém com C_D=14,6. Esse valor foi obtido por tentativa e erro para tentar aproximar-se dos valores obtidos por Lezeau e Thompson (*internet*). O gráfico a seguir mostra os valores de v_g x ($\alpha_g v_g+\alpha_l v_l$) obtidos pelo modelo de dois fluidos e a curva ajustada.

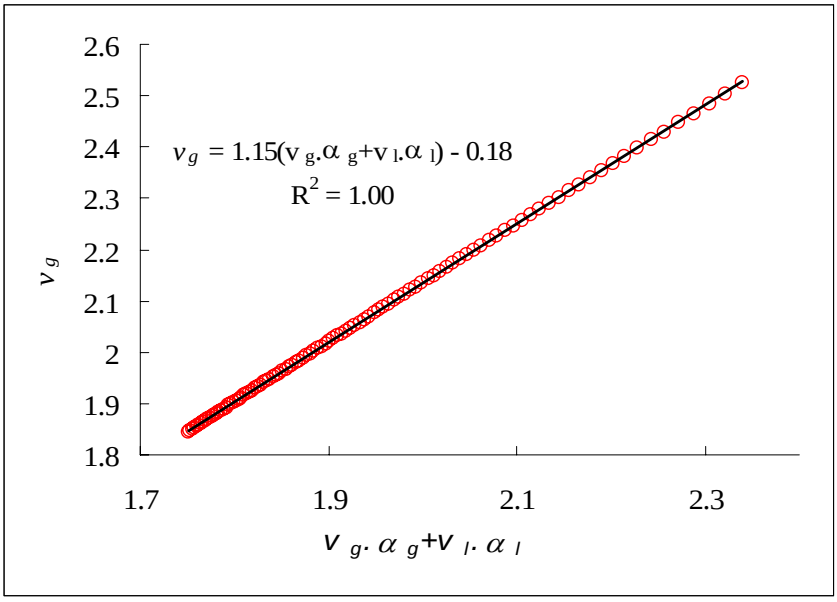


Figura 5.97 – Ajuste dos parâmetros do modelo de mistura para reprodução dos resultados do modelo de dois fluidos.

As figuras 5.98 e 5.99 apresentam os perfis de fração volumétrica e pressão para os modelos de dois fluidos e de mistura. Os resultados concordam satisfatoriamente, mostrando a consistência dos modelos implementados e do código.

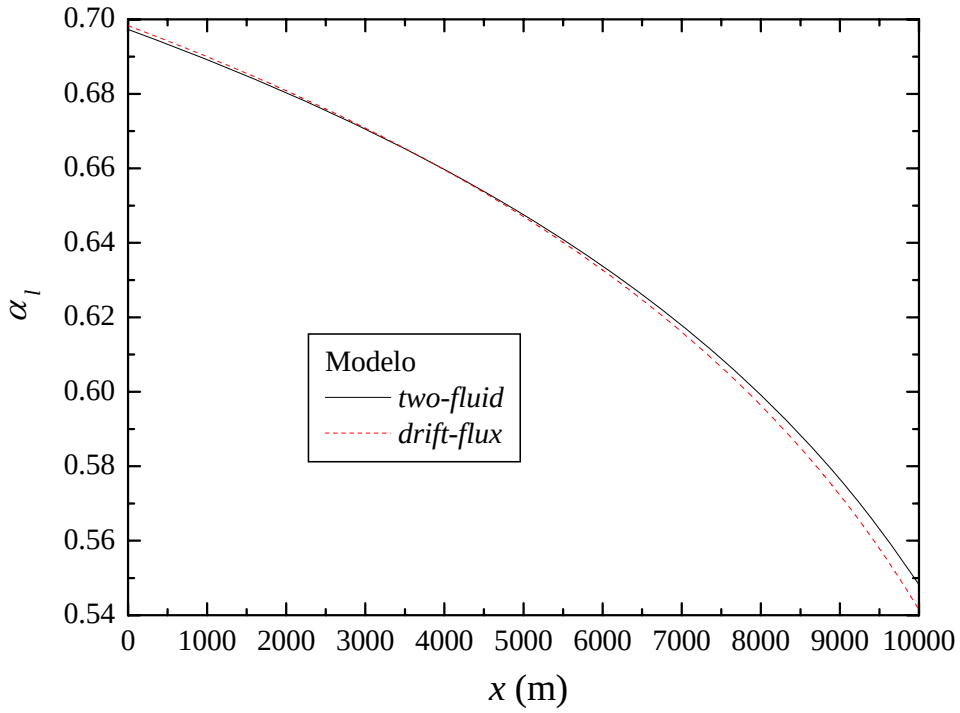


Figura 5.98 – Perfil de fração volumétrica de líquido no estado estacionário – Comparação dos modelos de dois fluidos e de mistura.

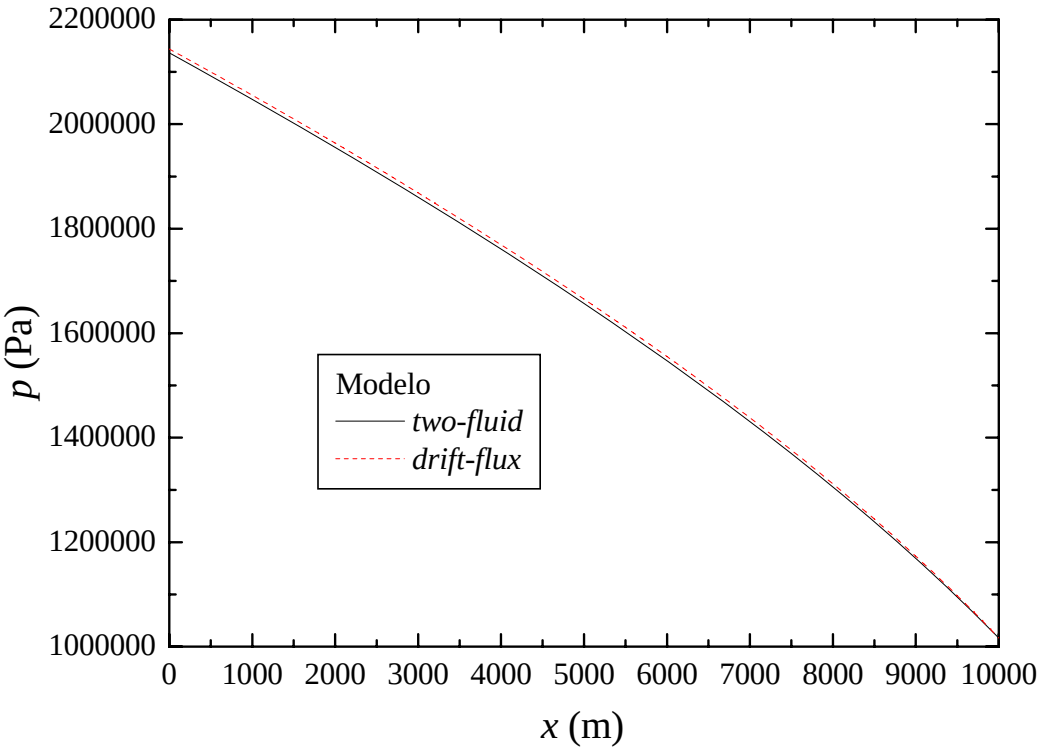


Figura 5.99 – Perfil de pressão no estado estacionário – Comparação dos modelos de dois fluidos e de mistura.

Finalmente, o processo de duplicação da vazão de gás em 10s após o estado estacionário é novamente realizado com o modelo de mistura. As figuras 5.100 e 5.101 apresentam os perfis de vazão mássica e fração volumétrica de líquido, respectivamente, e as figuras 5.102 e 5.103 apresentam históricos de vazão volumétrica na saída e pressão na entrada, respectivamente, para os modelos de mistura e de dois fluidos. Os resultados mostram que o pico de vazão volumétrica e de pressão previstos pelo modelo de mistura são um pouco menores que o previsto pelo modelo de dois fluidos.

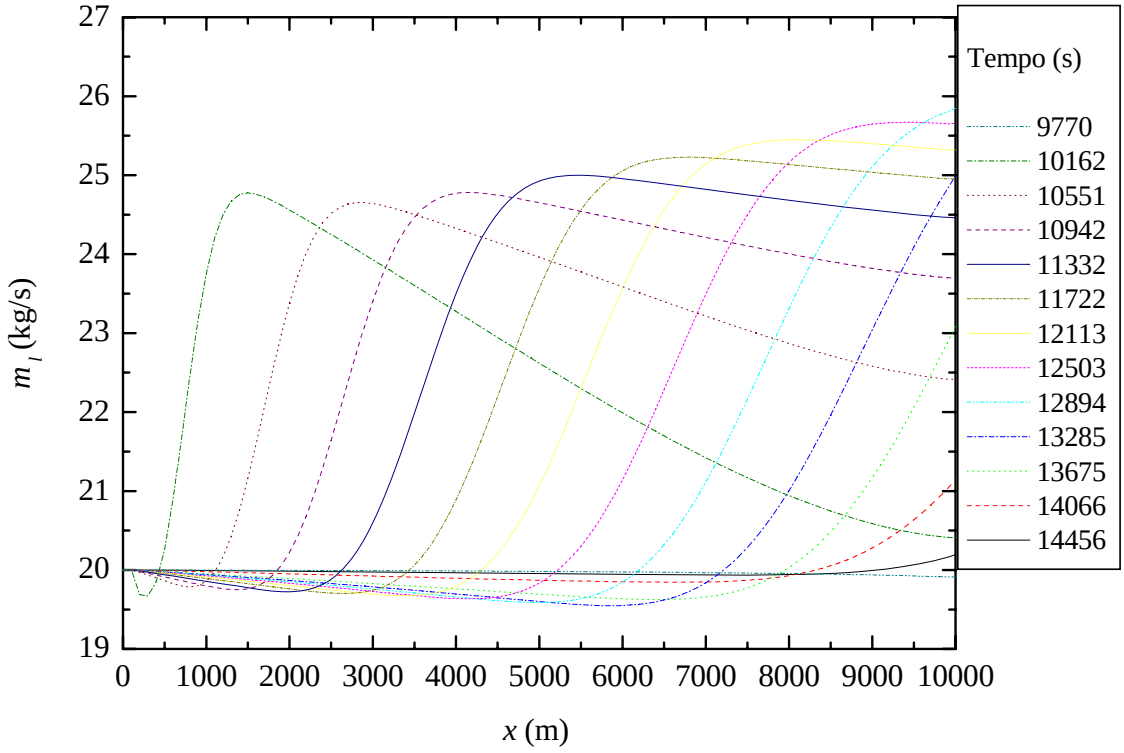


Figura 5.100 – Perfil de vazão mássica de líquido devido ao aumento da vazão de gás - Modelo de mistura.

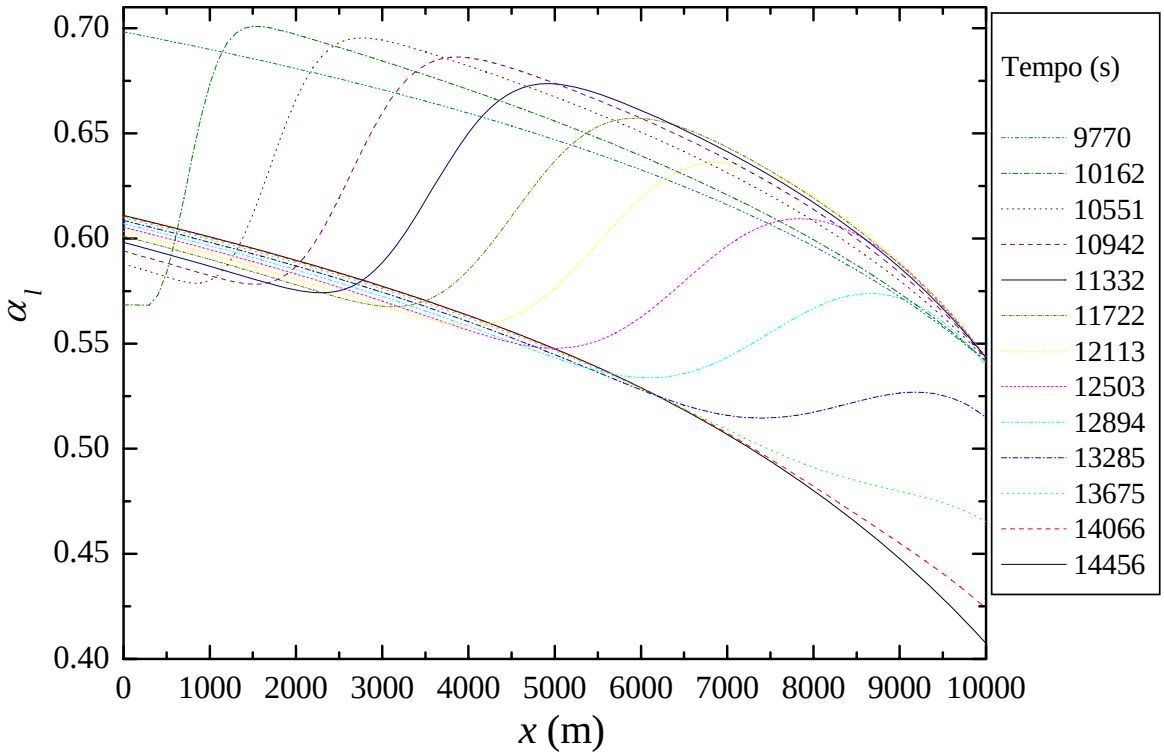


Figura 5.101 – Perfil de fração volumétrica de líquido devido ao aumento da vazão de gás - Modelo de mistura.

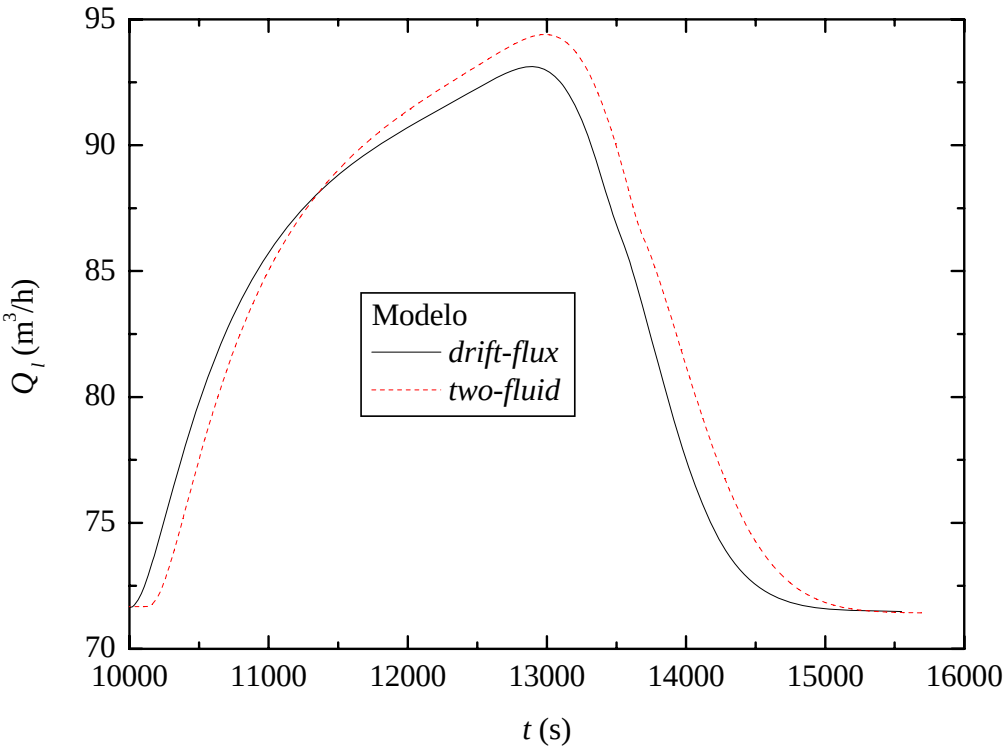


Figura 5.102 – Histórico da vazão volumétrica de líquido na descarga ao aumento da vazão de gás -Modelos de mistura e de dois fluidos.

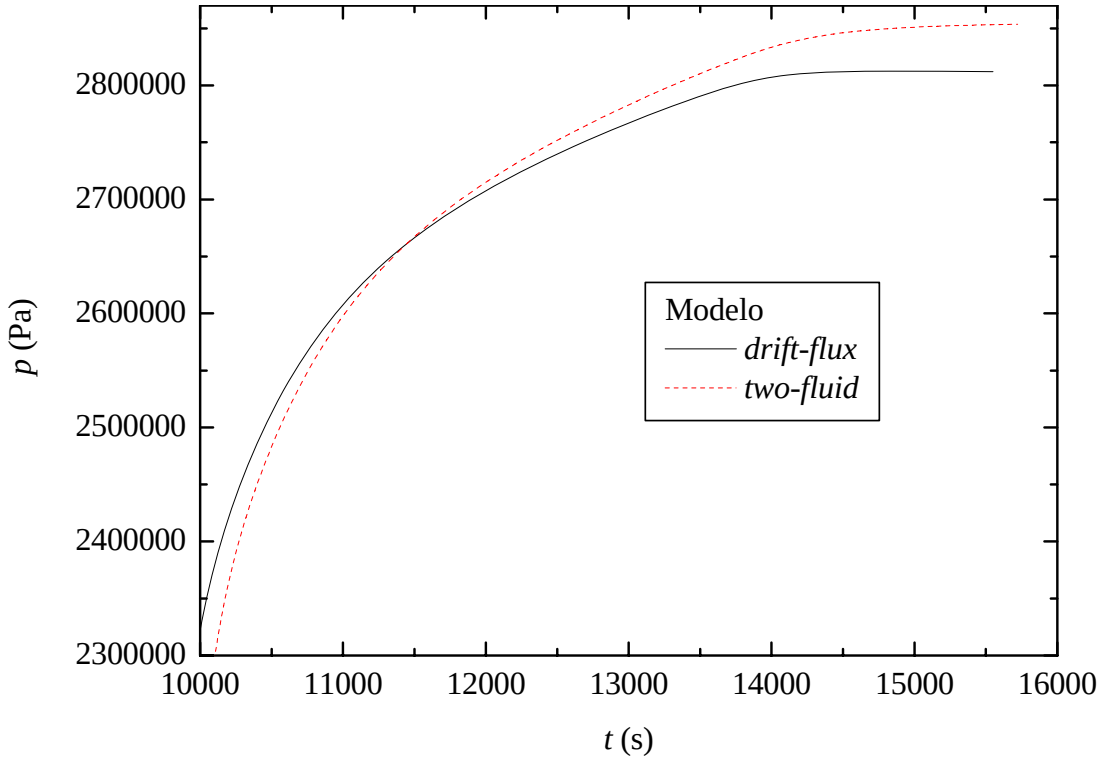


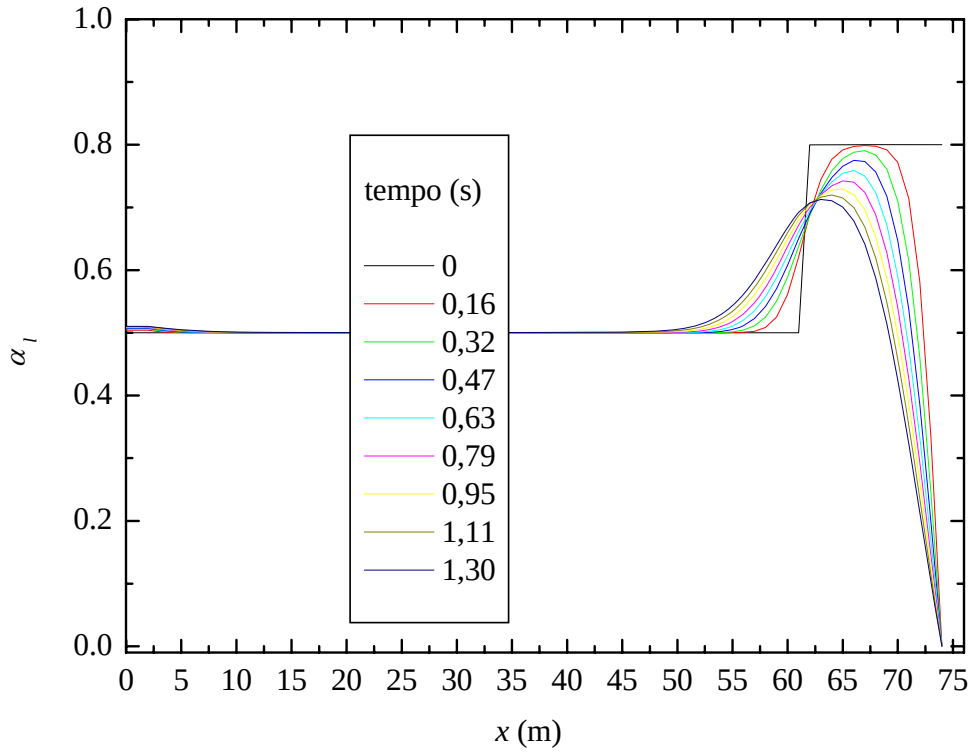
Figura 5.103 – Histórico da pressão na entrada devido ao aumento da vazão de gás - Modelos de mistura e de dois fluidos.

5.4.2.5 Intermitência promovida pelo terreno

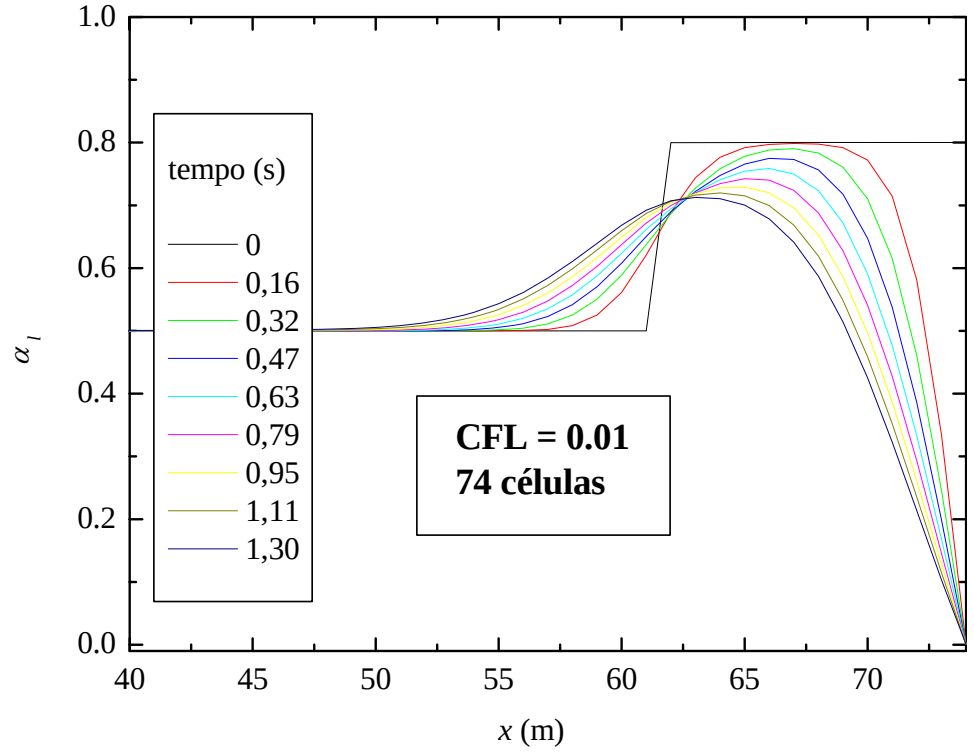
A intermitência promovida pelo terreno é um dos problemas de interesse deste trabalho devido à sua importância em sistemas de produção e transporte de petróleo e gás natural. Tipicamente, variações no perfil do duto acarretam em acúmulo de líquido em certos pontos. Dependendo do ângulo entre o duto e a horizontal, o acúmulo de líquido será mais ou menos severo. O ciclo observado é formado por um período no qual o ponto de conexão da linha apresenta um acúmulo de liquido que cresce até o bloqueio da passagem do gás. Neste momento a pressão na linha aumenta para manter as vazões de gás e líquido na entrada do sistema. O líquido acumula até um certo ponto no qual a pressão é suficiente para "empurrar" o líquido na direção da saída. Devido às dificuldades em simular este caso, resultados detalhados serão apresentados a seguir.

Fall-Back – modelo de dois fluidos

Seja um sistema formado de uma linha com 60m de comprimento, horizontal, e outra com 14m de comprimento com 90º de ângulo de inclinação. Inicialmente, a linha vertical é preenchida com 80% de líquido e a horizontal com 50% de líquido. O perfil de pressão é suposto constante na parte horizontal, pois as velocidades são nulas, e suposto igual ao perfil hidrostático na parte vertical no instante inicial. As vazões mássicas de líquido e de gás na entrada são de $7{,}854 \times 10^{-2}$ e $1{,}96 \times 10^{-4}$ kg/s, respectivamente, de acordo com Masella *et al.* (1998). As propriedades físicas são correspondentes ao sistema água-ar. O interesse é simular a vazão de líquido no topo da seção vertical, que é, inicialmente, para fora do sistema mas que, posteriormente, reverte, devido ao refluxo de líquido. No entanto, os métodos não conseguiram reproduzir o comportamento oscilatório esperado. A etapa de fall-back, ou seja, a etapa na qual o líquido escoa na parte vertical no sentido de cima para baixo é de suma importância e requer robustez dos métodos. Desta forma, apenas a simulação desta etapa é apresentada para o modelo de dois fluidos. O método HLFW e uma malha de 74 células foram utilizados. A Figura 5.104, a seguir, mostra o transiente do perfil de fração volumétrica de líquido no duto com um zoom (Figura 5.104b) na região do duto vertical.



(a)



(b)

Figura 5.104 – Histórico do perfil de fração volumétrica de líquido – *fall-back* – inclinação de 90º - método HLFW.

Pode-se observar que o método utilizado, HLFW, foi capaz de simular de forma estável o processo de *fall-back*.

Intermitência com baixa inclinação

O caso com inclinação de 90º é extremamente rigoroso visto que a severidade das flutuações das variáveis de escoamento é proporcional a esta inclinação. Seja o mesmo sistema com as mesmas condições iniciais e de contorno, mas com uma inclinação de apenas 10º na segunda seção. O objetivo foi avaliar se os métodos de 1ª ordem são capazes de simular casos com menores inclinações. O método AUSM+ foi utilizado para a simulação. As figuras 5.105 a 5.107 apresentam, respectivamente, as pressões na entrada e no ponto de conexão da linha, as frações volumétricas de líquido no ponto de conexão e na saída, e a vazão volumétrica na saída do sistema. A vazão volumétrica foi mostrada para um período maior apenas para mostrar que o comportamento cíclico permanece.

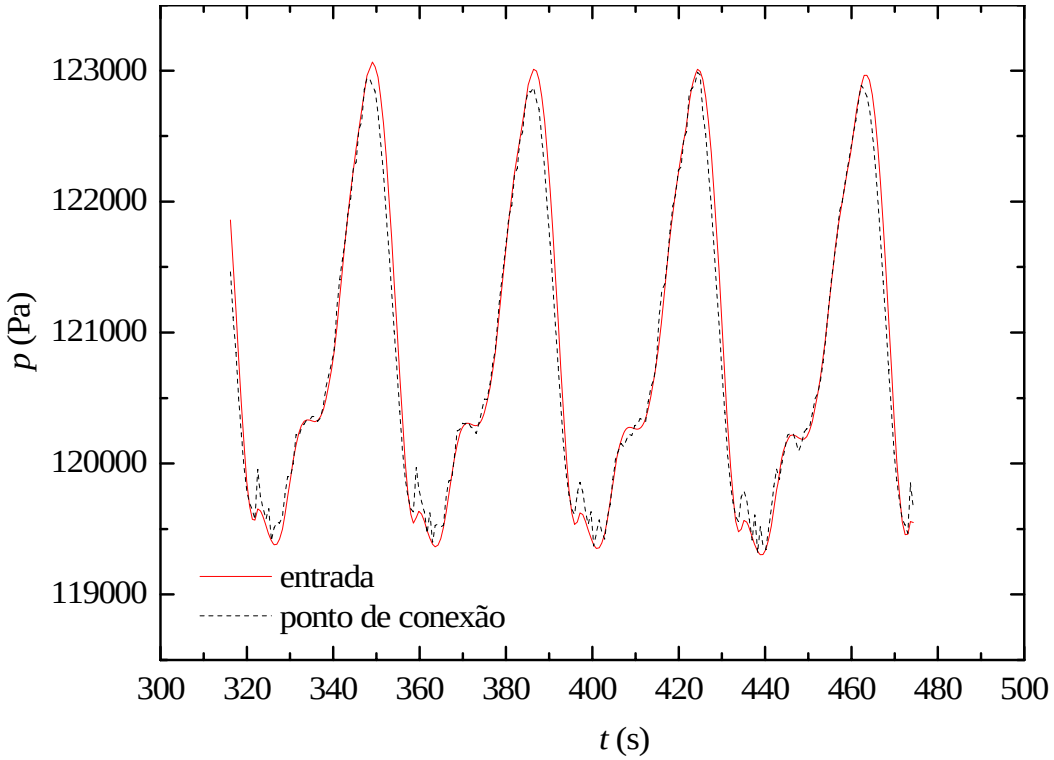


Figura 5.105 – Históricos das pressões na entrada e no ponto de conexão - intermitência promovida pelo terreno – inclinação de 10º - método AUSM+.

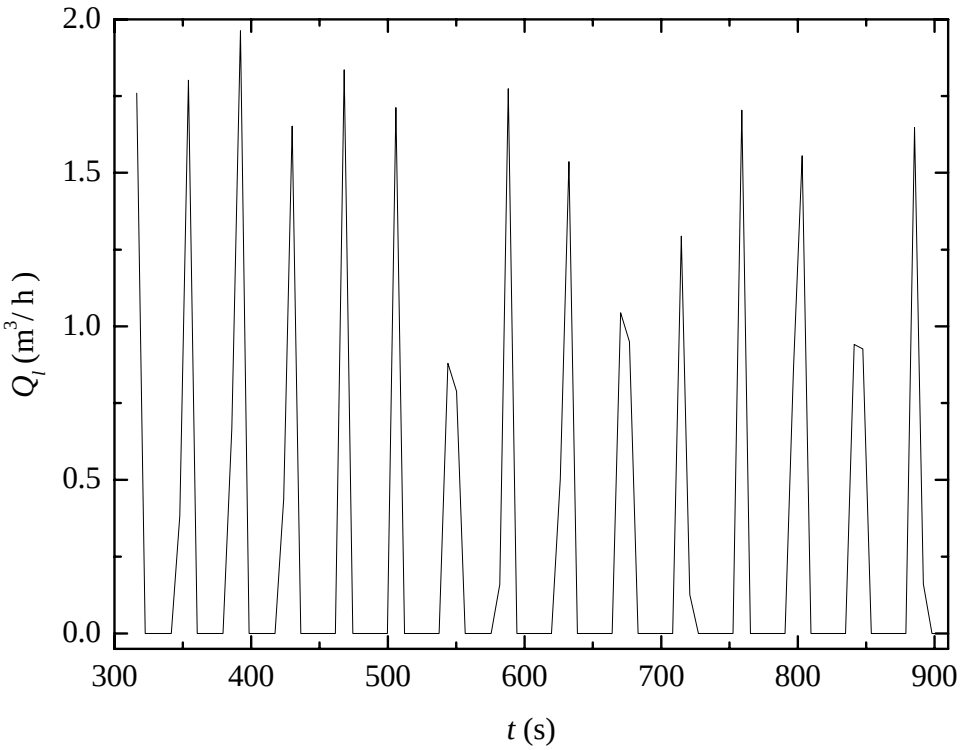


Figura 5.106 – Histórico da vazão volumétrica na saída - intermitência promovida pelo terreno – inclinação de 10º - método AUSM+.

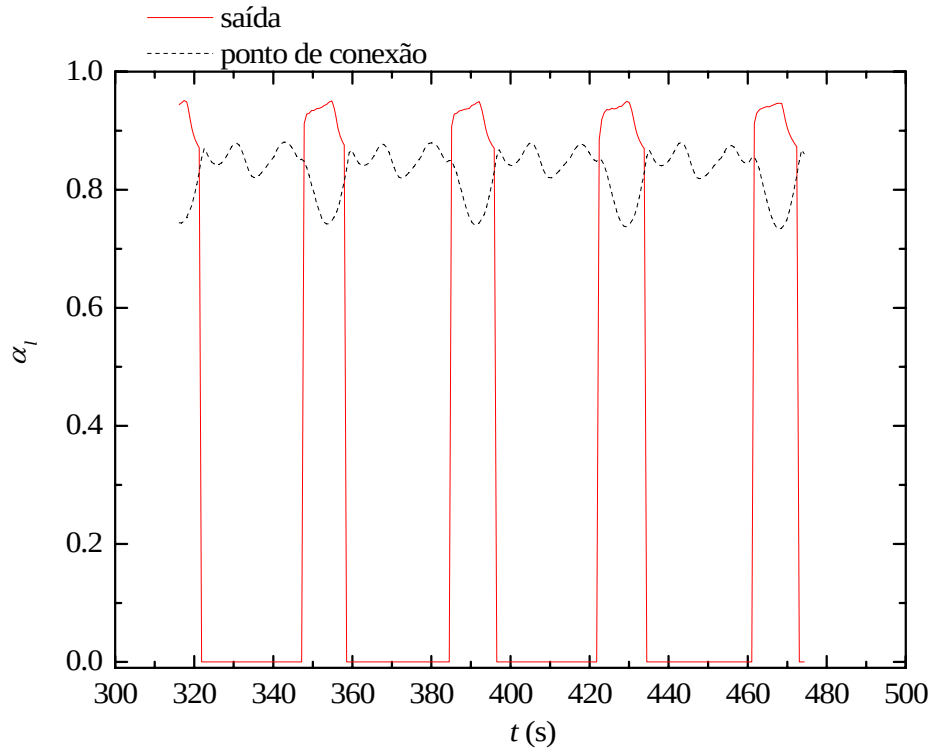


Figura 5.107 – Histórico das frações volumétricas no ponto de conexão e na saída - intermitência promovida pelo terreno – inclinação de 10º - método AUSM+.

Deve-se observar cuidadosamente o comportamento dinâmico desse sistema. Durante um certo período, nenhum líquido consegue sair do sistema levando à vazão nula e fração volumétrica próxima de zero e a pressão no sistema começa a aumentar. Posteriormente, a pressão atinge um valor suficiente para “empurrar” o líquido em direção à saída. Neste momento, a fração volumétrica de líquido atinge valores maiores que 90 % e o líquido consegue sair do sistema. Em seguida a pressão é aliviada e o líquido começa o processo de acúmulo novamente. O ciclo se repete indefinidamente.

A maioria dos métodos implementados no Titãs não pode simular o mesmo problema com inclinações de 10º e nenhum deles com inclinações superiores a 20º. Os fatos que poderiam ser responsáveis pelas dificuldades observadas são listados a seguir.

(i) Uso de integração explícita para o termo fonte. A integração do termo fonte de forma explícita pode estar levando às dificuldades observadas. Neste caso, outras formas de integração devem ser implementadas. As referências sobre simulação de intermitência severa também utilizam integração implícita para as ondas acústicas, e explícita para ondas de fração volumétrica. Provavelmente, esta opção permitiria o aumento do CFL mas não deve ser a responsável pelos problemas encontrados visto que nos problemas anteriores, o cálculo do fluxo explicitamente não acarretou em maiores dificuldades.

(ii) Uso de métodos que não são TVD. Os métodos utilizados não são TVD embora apresentem grande acurácia para a maioria dos problemas encontrados na literatura. Nenhum deles foi utilizado anteriormente para simulação da intermitência severa.

(iii) Nas referências mostrando a simulação deste sistema com 90º de inclinação (Masella *et al.*, 1998; Faille e Heintzé, 1999) sempre um estado estacionário teórico, visto que não existe estado estacionário, é simulado. A partir deste estado estacionário é que as simulações de intermitência severa se iniciam. Em algumas simulações realizadas com o OLGA, é possível perceber que, após algum tempo, as oscilações desaparecem. Isto nos leva a perguntar se a

capacidade de simular este tipo de problema não é dependente das condições iniciais.

(iv) Uso relações constitutivas inadequadas. O modelo de De Henau e Raithby (1995b) só foi aplicado a sistemas com pequenas inclinações. Os autores usaram um método implícito. Como relações simples foram adotadas por Masella *et al.* (1998) e Faille e Heintzé (1999), isto nos leva a suspeitar de que este não seja o motivo para a instabilidade, embora, certamente, poderia levar a resultados incorretos. Bendiksen *et al.* (1991) afirmou que, para pequenos dutos, uma relação simples é utilizada. No entanto, para dutos de larga escala dados experimentais são usados. Não há detalhes de como exatamente esses dados são usados.

Há a necessidade de pesquisas adicionais para avaliar como cada um desses fatores interferem nos resultados

Intermitência severa com inclinação de 90º e modelo de mistura

O caso com inclinação de 90º é extremamente rigoroso visto que o nível das oscilações observadas é proporcional à mesma. Apenas o método AUSM+ pode simular o caso com 90º de inclinação com o modelo de mistura. Para isso, foi utilizada a relação de *slip* recomendada por Faille (2006), apresentada no Capítulo 2 (eqs. (2.20) e (2.23)). Os dados são os mesmos do exemplo anterior, apenas reduzindo-se a vazão de líquido para 2,85 x 10^{-2} kg/s, e aumentando-se a inclinação para 90º. As figuras 5.108 a 5.110 apresentam os transientes das pressões na entrada e no ponto de conexão, da vazão volumétrica na saída e das frações volumétricas de líquido na entrada, no ponto de conexão e na saída, respectivamente.

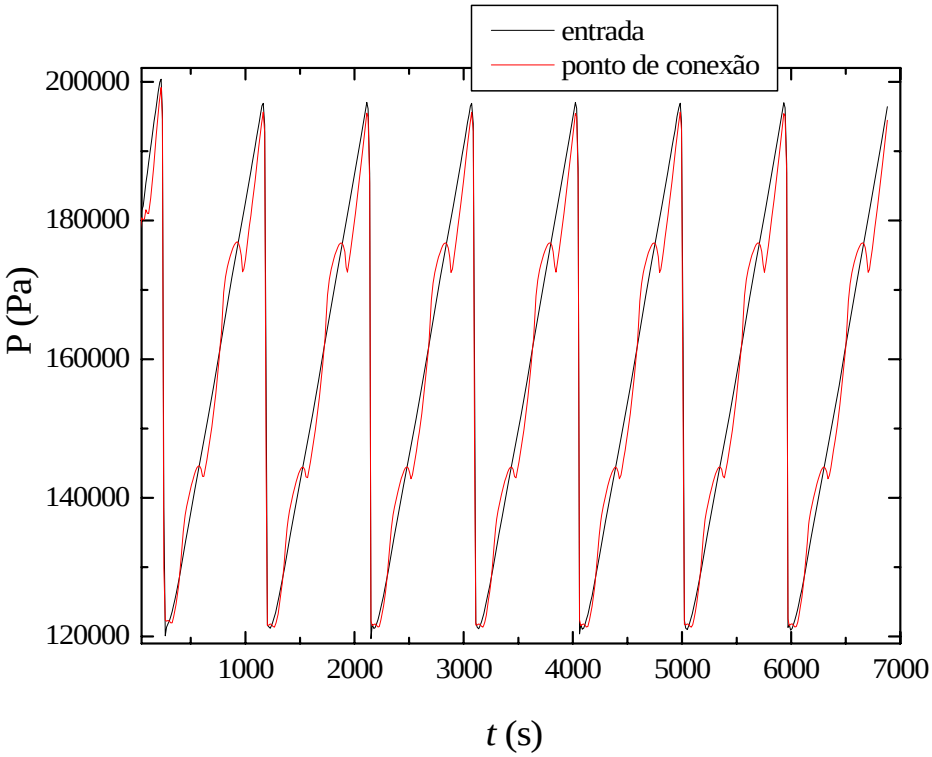


Figura 5.108 – Históricos das pressões na entrada e no ponto de conexão - intermitência promovida pelo terreno – inclinação de 90º - método AUSM+.

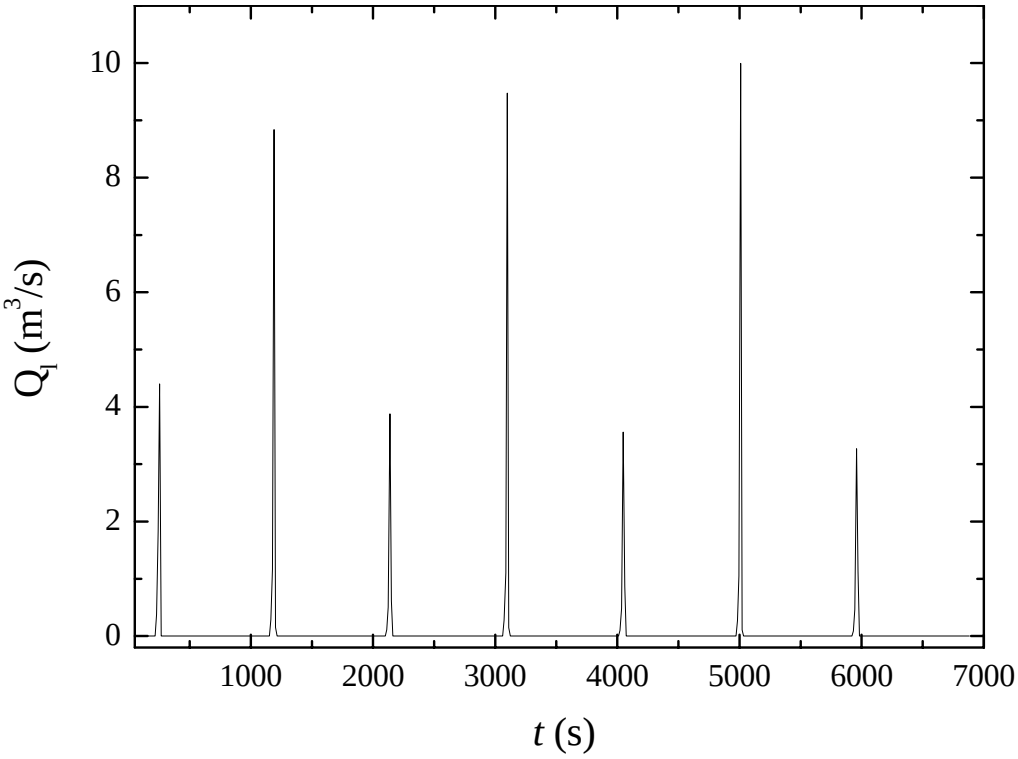


Figura 5.109 – Histórico da vazão volumétrica na saída - intermitência promovida pelo terreno – inclinação de 90º - método AUSM+.

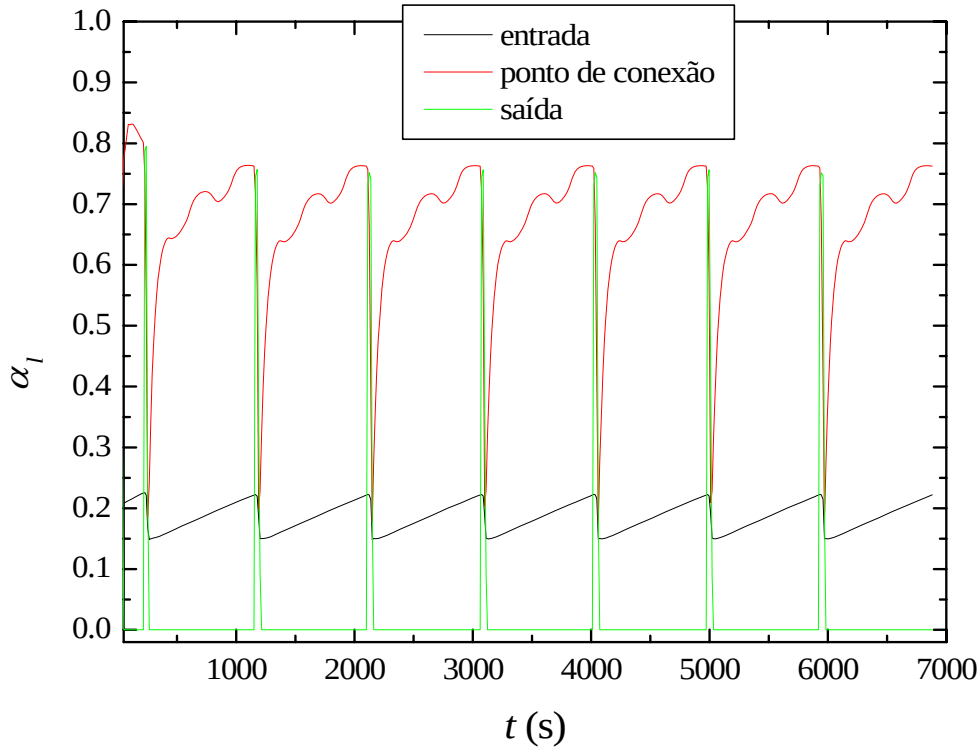


Figura 5.110 – Histórico das frações volumétricas de líquido na entrada, no ponto de conexão e na saída - intermitência promovida pelo terreno – inclinação de 90º - método AUSM+.

Pode-se observar o mesmo comportamento anterior, porém com maiores flutuações de pressão e vazão na saída. Pode-se perceber que a fração volumétrica de líquido no ponto de conexão apresenta oscilações muito superiores no caso com inclinação de 90º. No caso com 10º esta variável fica próxima a 0,8 sem grandes variações, enquanto que com 90º de inclinação, esta mesma variável chega a atingir o valor 0,2. Além disso, o período aumentou acentuadamente, precisando de maior tempo para acúmulo do líquido e aumento da pressão no ponto de conexão para empurrar o líquido no duto vertical.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Esta tese de doutorado teve como objetivo analisar e comparar diversos métodos numéricos para solução de sistemas hiperbólicos que descrevem as equações de conservação dos escoamentos de gases e de gases e líquidos em dutos com advecção predominante, com especial interesse na simulação do regime de intermitência severa em escoamentos bifásicos. Durante esta análise, foram realizadas aplicações inéditas de alguns destes métodos a problemas envolvendo equações de estado aplicáveis a materiais reais ou a modelos para os quais estes métodos não haviam sido aplicados anteriormente.

As extensões dos métodos em questão (Roe, AUSM, AUSMDV e AUSM+) à 2ª ordem no espaço também foram apresentadas. A extensão no espaço segue a clássica técnica de MUSCL-Hancock. Os termos fontes foram discretizados explicitamente e com 4ª ordem de aproximação através do método Runge-Kutta.

Os métodos baseados no problema de Riemann: Roe-Pike e suas extensões à segunda ordem, MUSCL-Roe-Pike MINMOD e MUSCL-Roe-Pike SUPERBEE, foram comparados ao método de segunda ordem de Harten para solução de problemas de choque em tubos com escoamentos não-isotérmicos de gás ideal. Para este problema, a solução exata do problema de Riemann pode ser obtida por métodos iterativos, e foi utilizada para a avaliação da acurácia dos métodos. Os métodos também foram comparados para a solução do problema de partida de gasodutos. Neste caso, a acurácia dos métodos foi comparada para o fluxo mássico tanto no momento da propagação inicial das ondas promovidas pela partida quanto no estado estacionário. Esta comparação mostrou que a extensão à 2ª ordem do método de Roe leva a uma redução de cerca de 4 vezes no número de células necessárias para uma dada acurácia em relação ao método de 1ª ordem correspondente. Os métodos foram comparados também em termos de eficiência computacional. O problema de partida de gasoduto foi resolvido e as malhas para cada método foram refinadas para atingir uma dada acurácia

no estado estacionário. Expressões analíticas para o número de operações de pontos flutuantes e indexações indiretas para cada método foram obtidas e aplicadas ao problema em questão. Esta comparação mostrou que o método de 2ª ordem MUSCL-Roe MINMOD apresentou um desempenho computacional muito superior ao esperado. Assim, para o problema em questão, embora a malha do método de segunda ordem tenha sido quatro vezes menos refinada para obter a solução com uma dada acurácia, seu tempo de CPU foi cerca de cem vezes menor do que o de primeira ordem correspondente, ou seja, que atinge acurácia semelhante. Isto se deve ao fato de que a malha menos refinada permite um passo de tempo maior o que acarreta em redução acentuada do tempo de CPU. Além disso, perfis transientes para o problema de partida de gasoduto, propagação de onda de choque e propagação de duas ondas de choques explosivas (*blast waves*) são apresentados com a finalidade de mostrar a robustez dos métodos e das condições de contorno adotadas e, conseqüentemente, do simulador Titãs.

Uma comparação foi realizada entre diversos métodos para solução de três problemas de choque em dutos de gás de Van der Waals encontrados na literatura. Para isso, foram utilizados os métodos híbridos que não são baseados na solução do problema de Riemann, Lax-Friedrichs-Lax-Wendroff (HLFW) e a extensão à 2ª ordem do método AUSM+ (MUSCL-AUSM+), e a extensão à 2ª ordem do método baseado na solução do problema de Riemann VFRoe (MUSCL-VFRoe). A mesma comparação entre as eficiências computacionais dos métodos anteriores foi realizada para estes métodos tomando-se como base um dos problemas de choque em dutos. Os resultados mostraram que o método MUSCL-AUSM+ apresenta acurácia equivalente ao método MUSCL-VFRoe, porém com um tempo de CPU acentuadamente menor. Finalmente, estes métodos foram aplicados a um problema de choque, utilizando-se as equações de estado de Van der Waals e Redlich-Kwong, mostrando que a diferença dos resultados é acentuada tanto entre os resultados das duas equações de estado quanto entre os resultados para os métodos MUSCL-AUSM+ e HLFW. Estes métodos não haviam sido aplicados à equação de estado de Redlich-Kwong anteriormente. Este tipo de observação não é comum na literatura, pois freqüentemente a equação de estado de gás ideal é usada. O tempo computacional do método HLFW foi mais elevado do que dos

outros métodos para os sistemas monofásicos. No entanto, a etapa que exige o maior tempo de CPU é a determinação do parâmetro de ponderação, que exige um processo iterativo. O algoritmo implementado é bastante ineficiente e novos algoritmos podem reduzir acentuadamente o tempo de CPU desta etapa.

Para a simulação de escoamentos bifásicos, dois modelos foram implementados, o de dois fluidos e o de mistura. O modelo de dois fluidos pode perder o caráter hiperbólico quando um campo de pressão único é usado para ambas as fases. Algumas soluções foram propostas anteriormente, sendo adotado nesta tese o uso de um termo de correção de pressão interfacial. Sendo assim, o modelo de dois fluidos adotado tem o caráter hiperbólico controlado por um parâmetro que pode ser modificado de acordo com o sistema. Este parâmetro foi, porém, usado indiscriminadamente na literatura e os resultados desta tese mostram que isto pode acarretar em efeitos indesejados sobre as descontinuidades de contato.

De acordo com os resultados anteriores, o método VFRoe apresenta elevado custo computacional. Desta forma, os métodos não baseados na solução do problema de Riemann associado, HLFW, AUSM+, AUSMDV e suas extensões à 2ª ordem, MUSCL-AUSM+ e MUSCL-AUSMDV, foram comparados na solução de dois problemas de referência (*benchmark*) de escoamentos bifásicos. Os métodos foram comparados de acordo com: (i) a ordem de grandeza do termo de correção de pressão interfacial, responsável pelo caráter hiperbólico do sistema; (ii) funções de ponderação usadas no método AUSMDV; (iii) diversos tamanhos de malha. Neste caso, o tamanho de malha é importante visto que os métodos em questão não apresentam a propriedade TVD (*total variation diminishing*) e podem levar a soluções oscilatórias e instáveis quando usados em malhas refinadas. Isto foi comprovado pelos resultados nos quais os métodos foram instáveis quando um modelo não hiperbólico foi usado, ou seja, sem correção de pressão interfacial. Por outro lado, a correção de pressão interfacial promove a difusão numérica e interfere acentuadamente nas descontinuidades de contato. Portanto, a correção de pressão interfacial deve ser adotada com cuidado. As funções de ponderação do método AUSMDV apresentam maior ou menor difusão

numérica e, portanto, a função adotada deverá ser escolhida caso a caso de acordo com o objetivo desejado. Todos os métodos apresentaram caráter oscilatório quando a malha é aumentada.

O método AUSM+ e sua extensão MUSCL-AUSM+ apresentaram tendência oscilatória marcante para todos os casos simulados. Embora apresente elevada difusão numérica, o método AUSMDV apresentou bons resultados quando esta difusão é compensada com a extensão à 2ª ordem, MUSCL-AUSMDV. Estes resultados foram próximos aos obtidos pelo método HLFW que, diferentemente do caso monofásico, pode ser considerado aquele que apresentou os melhores resultados. Isto se deve, provavelmente, ao caráter generalista da ponderação utilizada pelo método, pois os métodos do tipo AUSM foram obtidos para sistemas monofásicos. No entanto, a definição da função de ponderação para o método HLFW também deve ser melhorada e constitui o "segredo" para o seu sucesso. O método HLFW aplicado ao modelo de dois fluidos com correção de pressão interfacial constitui uma inovação desta tese, e apresentou resultados satisfatórios na media em que estabilizou o método em questão. Originalmente, apenas a forma mal-posta do modelo (não hiperbólica) havia sido utilizada pelo trabalho que originou o método e apresentava instabilidade quando malhas refinadas eram utilizadas.

Simulações dos transientes em dutos com o sistema ar-água foram apresentadas. Os problemas de partida e aumento da vazão de gás de dutos foram usados para a observação dos efeitos das relações de fechamento para escoamento estratificado e intermitente. Estas simulações mostraram o caráter oscilatório quando a previsão do regime de escoamento é realizada ao longo da simulação, o que desaparece quando se utiliza um regime pré-definido. Os problemas foram simulados para diferentes condições iniciais e valores do coeficiente de arraste. Além disso, uma relação de escorregamento (*slip*) foi obtida através do ajuste de uma função com os resultados do modelo de dois fluidos. Esta relação foi usada no modelo de mistura e as simulações com os dois modelos foram comparadas, mostrando a consistência dos resultados.

Finalmente, tentativas de simulação do fenômeno de intermitência severa apresentaram dificuldades quanto à estabilidade dos métodos. A escassez de dados e de detalhes de implementação na literatura sobre o assunto indica que este tipo de simulação apresenta grandes dificuldades. Nos casos apresentados na literatura, este tipo de simulação inicia-se com uma simulação de um estado estacionário falso, seguido da simulação transiente propriamente dita. A simulação estacionária foge ao escopo desta tese. Além disso, um fator não encontrado na literatura que foi observado nesta tese é que as condições de contorno na saída do sistema deverão ser impostas sobre o fluxo quando há refluxo na saída, e não deve ser imposto sobre as células fictícias. Isto se deve ao fato de que quando a célula fictícia detecta o refluxo já é tarde demais e valores inconsistentes são obtidos para as células fictícias. Com esta observação, foi possível simular um caso de intermitência severa com inclinação de 10º com o modelo de dois fluidos. Os resultados mostram o comportamento periódico já clássico para as vazões de saída e para as pressões na entrada e no ponto de inflexão da linha. Não foi possível solucionar o caso com inclinação de 90º no segundo segmento da tubulação com o modelo de dois fluidos com nenhuma das formulações explícitas implementadas. Apenas a etapa de *fall-back* foi simulada para um sistema com 90º de inclinação.

O modelo de mistura apresentou o comportamento esperado em acordo com os resultados da literatura quando resolvido com o método AUSM+ e com uma relação de escorregamento (*slip*) recomendada em comunicação pessoal pela pesquisadora Isabelle Faille do Instituto Francês do Petróleo. Os demais métodos (AUSMDV e HLFW) não foram capazes de reproduzir esses resultados.

No **apêndice A** detalhes do código computacional em FORTRAN95 do TITÃS são presentados.

Sugestões de trabalhos futuros:

- Desenvolvimento de novas funções de ponderação para o método HLFW.
- Implementação de algoritmo mais eficiente no cálculo da função de ponderação do método HLFW.

- Novas formulações AUSM obtidas especificamente para sistemas multifásicos.
- Aplicação do novo método AUSM+-up apresentado por Liou (2006) que resolve diversos problemas de oscilação do método AUSM+.
- Estudo aprofundado dos efeitos das condições de contorno para o escoamento multifásico com refluxo.
- Estudo de formulações implícitas para os métodos estudados nesta tese.
- Estudo de diferentes discretizações para os termos fonte.
- Obtenção de dados experimentais e posterior comparação com resultados simulados pelo simulador Titãs.

REFERÊNCIAS

Abgrall, R., ***An extension of Roe's upwind scheme to algebraic equilibrium real gases***, Computers and Fluids, 19, 171-182, 1991.

Akai, M. et al, ***The Prediction of Stratified Two-Phase Flow with a Two-Equation Model of Turbulence***, International Journal of Multiphase Flow, 7, 21-39, 1981.

Almeida, A. R. e Gonçalves, M. de A. L., ***Venturi for severe slug elimination***, 9th. International Conference MULTIPHASE, paper 53, 1999.

Andrade, J. S. Jr., Henrique, E. A. A., Almeida, M. P. e Costa, M. H. A. S., ***Heat transport through rough channels***, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 339, 3-4(339), 296-310, 2004.

Andreussi, P. e Bendiksen, K., ***An investigation of void fraction in liquid slugs for horizontal and inclined gas-liquid pipe flow***, International Journal of Multiphase Flow, 15, 937-946, 1989.

Armand, A. A., ***Resistance to two-phase flow in horizontal tubes***, (em russo) Izv. VTI, 15(1), 16-23, 1946.

Babuska, I., ***Error bounds for finite elements methods***, Numer. Math., 16, 322-333, 1971.

Bai, R. e Joseph, D. D., ***Steady flow interfacial shapes of a highly viscous dispersed phase***, International Journal of Multiphase Flow, 26, 1469-1491, 2000.

Barbuto, F. A. A., ***Escoamentos bifásicos sob intermitência severa na plataforma Pargo-1: Estudo da ocorrência da estabilidade e das características***, Boletim técnico da Petrobras 33(3), 179-188, 1990.

Barbuto, F. A. A., ***Method of eliminating severe Slug in multi-phase flow subsea lines***, Patent, #2 282 399, 1995.

Barnea, D., ***Effect of bubble shape on pressure drop calculations in vertical slug flow***, International Journal of Multiphase Flow, 16, 79-89, 1990.

Barnea, D., ***Transition from annular flow and from dispersed bubble flow-unified models for the whole range of pipe inclinations***, International Journal of Multiphase Flow, 12, 733-744, 1986.

Barnea, D. e Brauner, N., ***Hold-up of the liquid slug in two phase intermittent flow***, International Journal of Multiphase Flow, 11, 43-49, 1985.

Barnea, D., Shoham, O. e Taitel, Y. e Dukler, A. E., ***Flow pattern transition for gas-liquid flow in horizontal and inclined pipes***, International Journal of Multiphase Flow, 6, 217-225, 1980.

Barnea, D. e Taitel, Y., ***A model for slug length distribution in gas-liquid slug flow***, International Journal of Multiphase Flow, 19, 829-838, 1993.

Bedjaoui, N. e Sainsaulieu, L., ***Analysis of a Non-hyperbolic System Modeling Two-phase Flows Part 1: The Effects of Diffusion and Relaxation***, Mathematical Methods in the Applied Sciences, 20**,** 783–803, 1997.

Bendiksen, K. H., ***An experimental investigation of the motion of long bubbles in inclined tubes***, International Journal of Multiphase Flow, 10, 467-483, 1984.

Bendiksen, K., Brandt, I. Jacobsen, K. A. e Pauchon, C., ***Dynamic simulation of multiphase transportation systems***, Multiphase Technology and Consequences for field development Forum, Stavanger, Norway,1987.

Bendiksen, K., Malnes, D., Moe, R. e Nuland, S., ***The dynamic two-fluid model OLGA: theory and application***, SPE production Engineering, 6, 171-180, 1991.

Benkirane, R., Line, A. e Aoki, S., ***Modeling of wavy stratified flow in a rectangular channel***, In. Phase-Interface Phenomena in Multiphase Flow, eds. G.F. Hewitt, F. Mayinger e J.R. Riznic, 121-128, Hemisphere, New York, 1990.

Bestion, D., ***The physical closure laws in the CATHARE code***, Nuclear Engeneering Design, 124**,** 229-245, 1990.

Biberg, D. e Halvorsen, G., ***Wall and interfacial shear stress in pressure driven two-phaselaminar stratified pipe flow***, International Journal of Multiphase Flow, 26, 1645-1673, 2000.

Black, P. S., Daniels, L.C., Hoyle, N.C. e Jepson, W.P., ***Studying transient multiphase flow using Pipeline Analysis Code PLAC***, Journal of Energy Resources Technology, 112, 25-29, 1990.

Boe, A., ***Severe slugging characteristics***, Selected topics in two-phase flow, NTH, Trondheim, Noruega, 1981.

Boris, J. P. e Book, D. L., ***Flux corrected transport I, SHASTA, a fluid transport algorithm that works***, Journal of Computational Physics, 11, 38–69, 1973.

Borkowski, J. A. e Wade, N. L., ***TRAC-BF1=MOD1 Models and correlations***, NUREG CR-1391, 1992.

Brauner, N., Moalem Maron, D.e Rovinsky, J., ***A Two-Fluid model for stratified flows with curved interfaces***, International Journal of Multiphase Flow, 24, 975-1004, 1998.

Brezzi, F., ***On the existence, uniqueness and approximation of saddle point problems arising from Lagrangian multipliers***, RAIRO, Anal. Num., 8, 129-151, 1974.

Buffard, T., Gallouet, T. e Hérard, J. M., ***A sequel to a rough Godunov scheme: application to real gases***, Computers and Fluids, 29, 813-847 2000.

Castro, C. E., Toro, E. F., ***A Riemann solver and upwind methods for a two-phase flow model in non-conservative form***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 50**,** 275–307, 2006.

Celik, I. e Rodi, W., ***Simulation of free surface effects in turbulent channel flows***, Phisyco-Chem. Hydrology Journal, 5, 217-227, 1984.

Chen, J. R., Richardson, S. M. e Saville, G., ***Modeling of two phase blowdown from pipelines I – A hyperbolic model based on variational principles***, Chemical Engineering. Science, 50(4), 695-713, 1995a.

Chen, J. R., Richardson, S.M. e Saville, G., ***Modeling of two phase blowdown from pipelines II – A simplified numerical method for multi-component systems***, Chemical Engineering Science, 50(13), 2173-2187, 1995b.

Chorin, A. J., ***A numerical method for solving incompressible viscous flow problems***, Journal of Computational Physics, 2, 12-26, 1967.

Churchill, S. W. ***Friction factor equation spans all fluid flow regimes***, Chemical Engineering, 84, 24, 91-92, 1977.

Coelho, R. M. L., Lage, P. L. C., Telles, A. S., ***A comparison of hyperbolic solvers for ideal and real gas flows***. Brazilian Journal of Chemical Engineering, 23, 3, 301-318, 2006.

Coelho, R. M. L. e Medeiros, J. L., ***Reconciliação de Dados e Detecção de Vazamentos em Redes de Escoamento Incompressível***, ANAIS II Congresso de Engenharia de Processos do MERCOSUL – II ENPROMER, 1999a.

Coelho, R. M. L., ***Detecção de Vazamentos em Redes de Escoamento via Reconciliação Não Linear***, Prêmio Petrobras de Tecnologia de Dutos, PRODUT/CENPES/ PETROBRÁS, Dez. 1999b.

Coelho, R. M. L., ***Reconciliação Não Linear de Dados aplicada à Detecção de Vazamentos em Redes Estacionárias de Escoamento Incompressível***, M.Sc. tese, Escola de Química/UFRJ, 2000.

Collela, P. e Glaz, H., ***Efficient solution algorithms for the Riemann problem for real gases***, Journal of Computational Physics, **59**, 264-289 1985.

Cook, M. e Behnia, M., ***Film profile behind liquid slugs in gas-liquid pipe flow***, AIChE Journal, 43, 2180-2186, 1997.

Cook, M. e Behnia, M., ***Pressure drop calculation and modeling of inclined intermittent gas-liquid flow***, Chemical Engineering. Science, 55, 4699-4708, 2000a.

Cook, M. e Behnia, M., ***Slug length prediction in near horizontal gas-liquid intermittent flow***, Chemical Engineering. Science, 55, 2009-2018, 2000b.

Coquel, F., El Amine, K., Godlewski, E., Perthame, B. e Rascle, P., ***A numerical method using upwind schemes for the resolution of two-phase flows***, Journal of Computational Physics, 136, 272–288, 1997.

Cortes J, Debussche A e Toumi, I., ***A density perturbation method to study the eigenstructure of two-phase flow equation system***, Journal of Computational Physics, 147, 463-484, 1998.

Cox, C. F. e Cinnella, P., ***General solution procedure for flows in local chemical equilibrium***, AIAA Journal, 32, 519 1994.

Darmofal, D. L., Moinier, P. e Giles, M. B., ***Eigenmode analysis of boundary conditions for the one-dimensional preconditioned Euler equations***, Journal of Computational Physics, 160, 369-384, 2000.

De Henau, V. e Raithby, G. D., ***A study of terrain-induced slugging in two-phase flow pipelines***, International Journal of Multiphase Flow, 21(3), 365-379, 1995a.

De Henau,V. e Raithby,G. D., ***A transient two fluid model for the simulation of slug flow in pipelines I – theory***, International Journal of Multiphase Flow, 21(3), 335-349, 1995b.

De Henau, V. e Raithby, G. D., ***A transient two fluid model for the simulation of slug flow in pipelines II – validation***, International Journal of Multiphase Flow, 21(3), 351-363, 1995c.

De Vuyst, F., ***Stable and accurate hybrid finite volume methods based on pure convexity arguments for hyperbolic systems of conservation law***, Journal of Computational Physics, 193**,** 426-468, 2004.

Demuren, A. O. e Rodi, W., ***Calculation of turbulence driven secondary motion in non-circular ducts***, Journal of Fluid Mechanics, 140, 180-222, 1984.

Dubois, T., Jauberteau, F. e Teman, R., ***Dynamic multilevel and the numerical simulation of turbulence***, Cambridge University Press, 1999.

Dukler, A. E. e Hubbard, M. G., ***A model for gas-liquid slug flow in horizontal and near horizontal tubes***, Ind. Eng. and Chem. Fund., 14, 337-347, 1975.

Duret, E., Faille, I., Gainville, M., Henriot, V., Tran, H. e Willien, F., ***Two models for the simulation of multiphase flow in oil and gas pipelines***, Mathematial and Numerical Aspects of Low Mach Numbers Flows, disponível na internet em www.url:http://www-sop.inria.fr/smash/LOMA/Talks/Faille.pdf consultado em Jun. 2004.

Dziubinski, M., Fidos, H., Sosno, M., ***The flow pattern map of a two-phase non-Newtonian liquid –gas flow in the vertical pipe***, International Journal of Multiphase Flow, 30, 551 –563, 2004.

Edwards, D. P. e Jesen, M. K., ***Calculation of turbulence-driven secondary flows-PartII: predictions for fully developed flow in a square duct***, *ASME Winter Annual Meeting, New Orleans*, 93WA/HT-31, 1993.

Evje, S. e Fjelde, K. K., ***On a rough AUSM scheme for a one-dimensional two-phase model***, Computers and Fluids, 32**,** 1497-1530 2003.

Evje, S. e Fjelde, K. K., ***Relaxation Schemes for the Calculation of the two-phase flow in pipes***, Math. Comp. Modeling, 36, 535-567, 2002.

Evje, S. e Flatten, T., ***Hybrid flux-splitting schemes for a common two-fluid model***, Journal of Computational Physics, 192**,** 175-210, 2003.

Fabre, J., ***Advancements in two phase slug flow modeling***, SPE paper 27961, University of Tusla Centennial Petroleum Engineering Symposium, 29- 31, 1994.

Fagundes Netto, J.R., Fabre, J., Peresson, L., ***Shape of long bubbles in horizontal slug flow***, International Journal of Multiphase Flow, 25, 1129-1160, 1999.

Faille, I. e Heintzé, E., ***A rough Finite Volume scheme for modeling two-phase flow in pipeline***, Computers and Fluids, 28: 213-241, 1999.

Faille, I., ***comunicação pessoal***, 2006.

Fan, Z., Ruder, Z., Hanratty, T.J., ***Initiation of slugs in horizontal gas-liquid flows***, AIChE Journal, 39, 1741-1753, 1993.

Felizola, H. e Shoham, O., ***A unified model for slug flow in upward inclined pipes***, ASME Journal of Energy Resources Technology, 117, 7-12, 1995.

Felizola, H., ***Slug flow in extended reach directional wells***, tese M.Sc., The University of Tulsa, 1992.

Fernandez, R.C., Semiat, R. e Dukler, A.E., ***Hydrodynamic model for gas-liquid slug flow in vertical tubes***, AIChE Journal, 29, 981-989, 1983.

Fjelde, K.K. e Karlsen, K.H., ***High-resolution hybrid primitive-conservative upwind schemes for drift flux model***. Computers and Fluids, 31, 335-367, 2002.

García-Cascales, J. R. G. e Salvador, J. M. C., ***Extension of a high-resolution scheme to 1D liquid–gas flow***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 50(9), 1063-1084, 2006.

Glaister, P., ***An approximate linearized Riemann solver for the Euler equations for real gases***, Journal of Computational Physics, 74, 382-408 1988.

Godunov, S. K., ***A difference method for numerical calculation of discontinuous equation of hydrodynamics***. Math Sbornik (em russo), 47**,** 217-306, 1959.

Goldstein, R. J., Eckert, E. R. G., Ibele, W. E., Patankar, S. V., Simon, T. W., Kuehn, T. H., Strykowski, P. J., Tamma, K. K., Bar-Cohen, A. e Heberlein, J. V. R., ***Heat transfer—a review of 2002 literature***, International Journal of Heat and Mass Transfer, 48, 5, 819-927, 2005

Gomez, L. E., Shoham, O. e Taitel, Y., ***Prediction of slug liquid holdup: horizontal to upward vertical flow***, International Journal of Multiphase Flow, 26, 517-521, 2000.

Gonçalves, M. A. L., Silva, C. B. C. e Pedras, M. H. J., ***Slug measurement in gas-oil pipeline***, Proceedings of the Brazilian Cong. Of Engng. Thermal. Sci., Nov. 11-14, Florianópolis, vol. 3, 1417-1421, 1996.

Govier, G.W. e Aziz, K., ***The flow of complex mixtures in pipes***, New York, N.Y., Van Nostrand Rheinhold, 1972.

Govier, G. W. e Omer, M. M. ***An Horizontal pipeline flow of air-water mixtures***, Canadian Journal of Chemical Engineering., 40, 93-104, 1962.

Gregory, G. A., Nicholson, M. K. e Aziz, K., ***Correlation of the liquid volume fraction in the slug for horizontal gas-liquid slug flow***, International Journal of Multiphase Flow, 4, 33-39, 1978.

Grolman, E., Commandeur, N., de Baat, E. e Fortuin, J., ***Wavy-to slug flow transition in slightly inclined gas-liquid pipe flow***, AIChE Journal, 42, 901-907, 1996.

Grossman, B. e Walters, R. W., ***Analysis of the flux-split algorithms for Euler's equations with real gases***, AIAA Journal, **27**, 524 1989.

Guardone, A. e Vigevano, L., ***Roe linearization for the Van der Waals gas***, Journal of Computational Physics, **175**, 50-78, 2002.

Guinot V., ***Numerical simulation of two-phase flow in pipes using Godunov method***, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 50, 1169-1189, 2001.

Guinot V., ***The discontinuous profile method for simulating two-phase flow in pipes using the single component approximation***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 37**,** 341–359, 2001a.

Guinot V., ***The discontinuous profile method for simulating two-phase flow in pipes using the single component approximation***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 37, 341–359, 2001b.

Harten, A. e Hyman, J. M., ***Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws***, Journal of Computational Physics, 50, 235-269, 1983.

Harten, A., Enquist, B., Osher, S. e Chakravarthy, S., ***Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes III***, Journal of Computational Physics, 71, 231-303, 1987.

Harten, A., ***High resolution schemes for hyperbolic conservation laws***, Journal of Computational Physics, 49(3), 357-393 1983.

Harten, A., ***Introduction of high resolution schemes for hyperbolic conservation laws***, Journal of Computational Physics, 135, 260-278, 1982.

Ishii, M., ***Thermo-fluid Dynamics: Theory of two-phase flow***. Eyrolles, Paris. 1975.

Issa, R. I., ***Prediction of turbulent stratified, two-phase flow in inclined pipes and channels***, International Journal of multiphase Flow, 14, 141-154, 1988.

Jansen, F. E. e Shoham, O., ***Methods for eliminating pipeline-riser flow instabilities***, SPE 27867, 1994.

Jansen, F. E., Shoham, O. e Taitel, Y., ***The elimination of severe slugging– experiments and modeling***, International Journal of Multiphase Flow, 22(6), 1055-1072, 1996.

Kaasa O., ***A Subsea slug catcher to prevent severe slugging***, 6th Underwater Technology International Conference, Bergen, Norway, 1990.

Kim, H. D. e Setoguchi, T., ***Study of the discharge of weak shocks from an open end of a duct***, Journal of Sound and Vibration, 226(5), 1011-1028, 1999.

Kordyban, E., ***Some characteristics of high waves in closed channels approaching Kelvin-Helmholz instability***, ASME Journal Fluids Engineering, 99, 339-346, 1977.

Kordyban, E. S. e Ranov, T. ***Mechanism of slug formation in horizontal two-phase flow***, J. Basic Engng., 92, 857-864, 1970.

Kordyban, E. S., ***Some details of developing slugs in horizontal two phase flow***, AIChE Journal, 31, 802-806, 1985.

Kosterin, S. I., ***Research into structure of the flow of two-phase medium in horizontal tubes***, Izv. Akad. Nauk. SSSR,otdel tekh Nauk (em russo), 7, 37-45, 1943.

Leveque, R. J., ***Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems***, Cambridge University Press, ISBN 0-521-8108-6, 2002.

Lezeau e Thompson, ***Numerical simulation of one-dimensional transient multiphase flow***, disponível na internet em www.cranfield.ac.uk/sme/amac/tmf/implicit.pdf, consultado em 2006.

Lin, P. Y. e Hanrantty, T. J., ***Prediction of initiation slugs with linear stability theory***, International Journal of Multiphase Flow, 12, 79-98, 1986.

Liné, A. e Lopez, D., ***Two-Fluid model of wavy separated two-phase flow***, International Journal Multiphase Flow, 23(6), 1131-1146, 1997.

Liou, M. S., ***A sequel to AUSM: AUSM+***, Journal of Computational Physics, 129, 364-382, 1996.

Liou, M. S., ***A sequel to AUSM, Part II: AUSM+-up for all speeds***. Journal of Computational Physics, 214**,** 137-170, 2006.

Liou, M. S. e Edwards, J. R., ***AUSM schemes and extensions for low mach and multiphase flow***, VKI LS 1999-03, Computational Fluid Dynamics 1999.

Liou, M. S. e Steffen, C. J., ***A new flux splitting scheme***, Journal of Computational Physics, 107, 23-39, 1993.

Liou, M. S., Van Leer, B. e Shuen, J. S., ***Splitting of inviscid fluxes for real gases***, Journal of Computational Physics, 87, 1-24 1990.

Liu, T. P., ***Hyperbolic conservation laws with relaxation***, Comm. Math. Phys., 108, 153-175, 1987.

Lorencez, C., Chang, T. e Kawaji, M., ***Investigation of turbulent momentum transfer at a gas-liquid interface in a horizontal countercurrent stratified flow***, In Turbulence Modification in Multiphase Flow, Proc. 1st ASME/JSME Fluids Eng. Conf., Portland, OR, ASME-FED, vol. 110, 97-102, 1991.

Lorencez, C., Nasr-Esfahany, Kawaji, M. e Ojha, M., ***Liquid turbulence structure at a sheared and wavy gas-liquid interface***, International Journal of Multiphase Flow, 23, 2, 205-226, 1997.

Lorentzen, R.J. e Fjelde, K.K., ***Use of slopelimiter techniques in traditional numerical methods for multi-phase flow in pipelines and wells***. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 48**,** 723–745, 2005.

Lovick, J., Angeli., P., ***Experimental studies on the dual continuous flow pattern in oil –water flows***, International Journal of Multiphase Flow, 30, 139 –157, 2004.

Marruaz, K. S., Gonçalves, M. A. L., Ribeiro, G. S., França, F. A. e Rosa, E. S., ***Horizontal slug flow in a large-size pipeline: Experimentation and modeling***, J. Brazilian Society Mechanical Science, vol. XXIII, no. 4, 481-490, 2001.

Masella, J.M., Tran, Q.H., Ferre, D. e Pauchon, C., ***Transient simulation of two-phase flows in pipes***, International Journal of Multiphase Flow, 24, 739-755. 1998.

Masella, J. M., ***Quelques méthodes numériques pour les écoulements diphasiques bi-fluide en conduites pétrolières***, univ. Paris, Maio, 1997.

McGuinness, M. e Cooke, D., ***Partial stabilization at St. Joseph***, 3rd Offshore and Polar Engineering Conference, Singapore, 235-241, 6-11 jun., 1993.

Meknassi, F., Benkirane, R., Liné, A. e Masbernat, L., ***Numerical modeling of wavy stratified two phase flow in pipes***, Chemical Engineering. Science, 55, 4681-4697, 2000.

Menikoff, R., Plhor, B.J., ***The Riemann problem for fluid flow of real materials***. Reviews of modern physics, 61(1), 75-131, 1989.

Micaelli, J.C., ***CATHARE an advanced best-estimate code for PWR safety analysis***, SETH/LEML-EM, 1987.

Mishima, K. e Ishii, M., ***Theoretical prediction of onset of horizontal slug flow***, Journal of Fluids Engineering 102, 441-445, 1980.

Moe, R. e Bendiksen, K.H., ***Transient simulation of 2D and 3D stratified and intermittent two-phase flows. Part I: Theory***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 16, 461-487, 1993.

Moe, R., ***Transient simulation of 2D and 3D stratified and intermittent two-phase flows. Part II: Applications***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 16, 967-988, 1993.

Moisses, R. e Griffith, P., ***Entrance effects in two-phase slug flow***, Journal of Heat transfer, 84, 29-39, 1962.

Mols, B. e Oliemans, R. V. A., ***A turbulent diffusion model for particle dispersion and deposition in horizontal tube flow***, International Journal of Multiphase Flow, 24(1), 55-75, 1998.

Mols, B., Mittendorff, I. e Oliemans, R. V. A., ***Results from a two-dimensional turbulent diffusion-model for dispersion and deposition of droplets in horizontal annular dispersed gas/liquid flow***, International Journal of Multiphase Flow, 26, 949-975, 2000.

Mottura, L., Vigevano, L. e Zaccanti, M., ***An evaluation of Roe scheme generalization for equilibrium real gas flow***, Journal of Computational Physics, 138, 354-399, 1997.

Murata, A., Hihara, E. e Saito, T., ***Turbulence below an air-water interface in a horizontal channel***, In Turbulence Modification in Multiphase Flow, Proc. 1st ASME/JSME Fluids Eng. Conf., Portland, OR, ASME-FED, vol. 110, 67-74, 1991.

Nallasamy, M., ***Turbulence models and their applications to the prediction of internal flows: A review***, Computers and Fluids, 15, 151-194, 1987.

Naot, D. e Rodi, W., ***Calculation of secondary currents in channel flows***, Journal of the Hydraulics Division-Asce, 108, 948 - 968, 1982.

Newton, C. H. e Behnia, M., ***A numerical model of stratified wavy gas-liquid pipe flow***, Chemical Engineering. Science, 56(24), 6851-6861, 2001.

Newton, C. H. e Behnia, M., ***Numerical Calculation of turbulent stratified gas-liquid pipe flows***, International Journal of Multiphase Flow, 26, 327-337, 2000.

Nichols, B. D. e Hirt, C. W., ***Methods for calculating multi-dimensional, transient free surface flows past bodies***, Proc. First Intern. Conf. Num. Ship Hydrodynamics, Gaithersburg, ML, Out. 20-23, 1975.

Nicholson, M. K., Aziz, K. e Gregory, G. A., ***Intermittent two-phase flow in horizontal pipes: Predictive models***, Canadian Journal of Chemical Engineering., 56,653-663, 1978.

Nicklin, D. J., ***Two-phase bubble flow***, Chemical Engineering. Science, 17, 693-702, 1962.

Niu, Y. Y., ***Advection upwinding splitting method to solve a compressible two-fluid model***. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 36, 351–371, 2001.

Nordsveen, M. e Bertelsen, A. F., ***Wave induced secondary motions in stratified duct flow***, International Journal of Multiphase Flow, 23(3), 503-522, 1997.

Nordsveen, M., ***Wave- and turbulence-induced secondary currents in the liquid phase in stratified duct flow***, International Journal of Multiphase Flow, 27, 1555-1577, 2001.

Orell, A. e Rembrand, R., ***A model for gas-liquid slug flow in a vertical tube***, I e EC Fundam, 25, 196-206, 1986.

Paillère, H., Corre, C., Cascales, J. R. G., ***On the extension of the AUSM+ scheme to compressible two-fluid models***. Computers and Fluids, 32, 891-916 2003.

Paillère, H., Kumbaro, A., Viozat, C. e Clerc, S., ***Development of an AUSM+-type scheme for homogeneous equilibrium two-phase flow***, Sèminare “Schemes de flux pour la simulation numèrique des ecoulements diphasiques”, Reunion du groupe de Travail CEA-EDF-CMLA-Cargèse, 22-24, Septembre, 1999.

Patankar, S. V., ***Numerical heat transfer and fluid flow***, Washington, DC, Hemisphere Publishing Corp., 1980.

Patel, V. C., Rodi, W. e Scheurer, G., ***Turbulence models for near-wall and low Reynolds number flows:A review***, AIAA Journal, 23, 1308-1319, 1985.

Pauchon, C., Dhulesia, H., Binh-Cirlot, G. e Fabre, J., ***TACITE: A transient tool for multiphase pipeline and well simulation***, SPE Annual Technical Conference, SPE 28545, New Orleans, LA, USA, 25-28, 1994.

Pauchon, C., Dhulesia, H., Lopes, D. e Fabre, J., ***TACITE: A comprehensive mechanistic model for two-phase flow***, apresentado na 6th International Conference on Multiphase Production, Cannes, França, 1993.

Pinto, A. M. F. R. e Campos, B. J. L. M., ***Coalescence of two gas slugs rising in a vertical column of liquid***, Chemical Engineering. Science, 51, 45-54, 1996.

Pinto, A. M. F. R., Pinheiro, M. N. C., e Campos, B. J. L. M., ***Coalescence of two gas slugs rising in a co-current flowing liquid in vertical tubes***, Chemical Engineering. Science, 51, 243-253, 1998.

Quartapelle, L., Castelletti, A., Guardone, A. e Quaranta, G., ***Solution of the Riemann problem of classical gasdynamics***, Journal of Computational Physics, 190, 118-140 2003.

Ransom, V. H., ***RELAP5/MOD1 Code Manual Volume 1 : Code Structure, System Models and Numerical Method***. Technical Report NUREG/CR-1826, US Nuclear Regulatory Commission, 1982.

Ransom, V. H., ***Numerical benchmark tests***, ***Multiphase science and technology***, 3, 1987.

Ransom, V. H. e Hicks, D. L., ***Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow***, Journal of Computational Physics 53, 124–151, 1984.

Richter, S., Fleischer, S., Aritomi, M. e Hampel, R., ***Transient two-phase flow in arbitrary inclined tubes caused by depressurization of liquid with dissolved gases***, International Journal of Heat and Mass Transfer, 44, 1-15 , 2001.

Rodi, W., ***Turbulence models and their application in hydraulics – A state of the art review***, *IAHR Monograph Series*, 3º ed., 1993.

Roe, P. L., ***Approximate Riemann solvers, parameters vectors, and difference schemes***, Journal of Computational Physics, 135, 250-258, 1983.

Roe, P. L. e Pike, J., ***Efficient construction and utilization of Approximate Riemann Solutions***, *Computing Methods in Applied Science and Engineering*, Holanda, 1984.

Romate, J. E., ***An approximate Riemann solver for a two-phase flow model with numerically given slip relation***. Journal of Computational Physics, 27(4), 445-477, 1998.

Sainsaulieu, L., ***Finite Volume approximation of two-phase fluid flows based on an approximate Roe-type Riemann solver***. Journal of Computational Physics, 121**,** 1-28, 1995.

Sarica, C., ***comunicação pessoal***, 2006.

Saurel, R. e Abgrall, R., ***A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows***. Journal of Computational Physics, 150, 425-467, 1999.

Saurel, R., Larini, M. e Loraud, J. C., ***Exact and approximate Riemann solvers for real gases***, Journal of Computational Physics, 112, 126-137 1994.

Sergei, S. e Sazhin, ***Advanced models of fuel droplet heating and evaporation,*** Progress in Energy and Combustion Science, *In Press*, 2006.

Shoham, O. e Taitel, Y., ***Stratified turbulent-turbulent gas-liquid flow in horizontal and inclined pipes***, AIChE Journal, 30, 377-385, 1984.

Sod, G. A., ***A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws***, Journal of Computational Physics, 27, 1-31, 1978.

Stanislav, J. F. Kokal, S. e Nicholson, M. K., ***Intermittent gas-liquid flow in upward inclined pipes***, International Journal Multiphase flow, 12, 325-335, 1986.

Suzanne, C., ***Structure de l'ecoulement stratifie de gaz et de liquide en canal rectanguleire***, These de Docteur es Sciences, Institut National Polythechnique de Touluse, 1985.

Sylvester, N. D., ***A mechanistic model for two-phase vertical slug flow in pipes***, J. Energy Resources Technology, 109, 206-213, 1987.

Taitel, Y., ***Stability of severe slugging***, International Journal of Multiphase Flow, 12, 203-217, 1986.

Taitel, Y. e Barnea, D., ***A consistent approach for calculating pressure drop in inclined slug flow***, Chemical Engineering. Science, 45, 1199-1206, 1990-a.

Taitel, Y. e Barnea, D., ***Effect of gas compressibility on a slug tracking model***. Chemical Engineering Science, 53, 2089–2097, 1998.

Taitel, Y. e Barnea, D., ***Simplified transient simulation of two-phase flow using quasi-equilibrium momentum balances***, International Journal of Multiphase Flow, 23(3),493-501, 1997.

Taitel, Y. e Barnea, D., ***Two-phase slug flow***, Advances in Heat Transfer, 20, 83-132, New York: Academic Press, 1990-b.

Taitel, Y. e Dukler, A. E., ***A model for predicting flow regime transitions in horizontal and near horizontal gas-liquid flow***, AIChE Journal, 22, 47-55, 1976.

Taitel, Y., Sarica, C. e Brill, J. P., ***Slug flow modeling for downward inclined pipe flow: theoretical considerations***, International Journal of multiphase Flow, 26,833-844, 2000.

Taitel, Y., Shoham, O. e Brill, J. P., ***Simplified transient solution and simulation of two phase flow in pipelines***, Chemical Engineering Science, 44, 1353-1359, 1989.

Tam, C. K. W., Auriault, L. e Cambuli, F., ***Perfectly matched layer as an absorbing boundary conditions for the linearized Euler equations in open and ducted domains***, Journal of Computational Physics, 144, 213-234, 1998.

Tengesdal, J. O., ***Severe slugging elimination in ultra-deep water tiebacks and risers***, TUFFP 56th Semi-Annual Advisory Board Meeting, 2001.

Tiselj, I, Petelin S., ***Modelling of two-phase flow with second-order accurate scheme***. Journal of Computational Physics, 136, 503-521, 1997.

Toro, E. F. ***Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics-A practical introduction***. 2nd edition; Springer: Berlin, 1999.

Toumi, I. e Kumbaro, A., ***An approximate linearized Riemann solver for a two-fluid model***, Journal of Computational Physics, 124, 286-300, 1996.

Toumi, I., ***A weak formulation for Roe's approximate Riemann solver***, Journal of Computational Physics, 102(2), 360-373, 1992.

Troshko, A. A. e Hassan, Y. A., ***Law of the wall for two-phase turbulent layers***, International Journal of Heat and Mass Transfer, 44, 871-875, 2001.

Truesdell, C. e Toupin, R., ***The classical field theories***, Handbuch der Physik, vol. 3/I, Springer Verlag, 1960.

Truesdell, C., ***Rational thermodynamics***, McGraw-Hill, 1969.

Van Hout, R., Shemer, L. e Barnea, D., ***Evolution of hydrodynamics and statistical parameters of gas-liquid slug flow along inclined pipes***, Chemical Engineering Science, 58, 115-133, 2001.

Van Leer, B., ***On the relation between the upwind-differencing schemes of Godunov, Enguist-Osher and Roe***. SIAM J. Sci. Stat. Comput., 5(1)**,** 1-20, 1985.

Van Leer, B., ***Towards the ultimate conservative difference scheme IV. A new approach to numerical convection***. Journal of Computational Physics, 23, 276-299, 1977.

Van Leer, B., ***Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second-order sequel Godunov method***. Journal of Computational Physics, 32, 101-136, 1979.

Van Leer, B., ***Flux-vector splitting for the Euler equations***, Lect. Notes in Physics, 170, E. Krause ed., Springer-Verlag, p.507, 1982.

Vinokur, M. e Montagné, J. L., ***Generalized flux-vector splitting and Roe average for an equilibrium real gas***, Journal of Computational Physics, 89, 276-300, 1990.

Wackers, J. e Koren, B., ***A fully conservative model for compressible two-fluid flow***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 47, 1337–1343, 2005.

Wada Y, Liou M S., ***An Accurate and robust flux splitting scheme for shock and contact discontinuities***. SIAM J. Sci. Comput., 3, 633-657, 1997.

Wallis, G. B. e Dobson, J. E., ***The onset of slugging in horizontal stratified air-water flow***, International Journal Multiphase Flow, 1(1), 173-193, 1973.

Woods, B. D. e Hanraty, T. J., ***Influence of Froude number on physical process determining frequency of slugging in horizontal gas-liquid flows***, International Journal of Multiphase Flow, 26, 977-998, 2000.

Woods, B. D., Hurlburt, E. T. e Hanraty, T. J., ***Mechanism of slug formation in downwardly inclined pipes***, International Journal of Multiphase Flow, 26, 977-998, 2000.

Woodward, P. R. e Colella, P., ***The Numerical Simulation of Two-Dimensional Fluid Flow with Strong Shocks***, Journal of Computational Physics, 54, 115-173, 1984.

Zienkiewicz, O. C. e Taylor, R. L., ***The finite element method***, Butterworth-Heinemann, 5th edition, vol3., 2000.

Zienkiewicz, O. C. e Codina, R., ***A general algorithm for compressible and incompressible-flow-part 1: The split, characteristic-based scheme***, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 20, 869-885, 1995.

Zuber, N. e Findlay, J. A., ***Average volumetric concentration in two-phase flow systems***, Trans. ASME Journal Heat Transfer, 87, 453-468, 1965.

APÊNDICE A

MODELO DE QUASE-EQUILÍBRIO

O modelo de quase-equilíbrio e o algoritmo propostos por Taitel e Barnea (1997) foi implementado em FORTRAN95 e corresponde ao módulo HERA do simulador TITÃS.

O duto é dividido em N subseções de tamanho Δx. As variáveis de interesse são consideradas constantes em uma dada seção j. Supondo-se escoamento separado (estratificado ou anular), o balanço de forças para o quase-equilíbrio é escrito como:

$$\begin{aligned}(p_j - p_{j+1})A_g - \tau_g S_g \Delta x - \tau_j^g S_j^g \Delta x - (Z_{j+1} - Z_i) g A_g \rho_g = 0 \\ (p_j - p_{j+1})A_l - \tau_l S_l \Delta x - \tau_j^l S_j^l \Delta x - (Z_{j+1} - Z_i) g A_l \rho_l = 0\end{aligned} \qquad \text{(A.1)}$$

onde p é a pressão, A e a área transversal e Z é a cota vertical da célula j. As tensões de cisalhamento são dadas pelas Equações (A.2).

$$\tau_{lf} = f_{lf} \frac{\rho_l v_{lf} \mid v_{lf} \mid}{2}; \tau_{gf} = f_{gf} \frac{\rho_g v_g^2}{2}; \tau_i = f_i \frac{\rho_g (v_g - v_l) \mid v_g - v_l \mid}{2} \qquad \text{(A.2)}$$

Os fatores de atrito são obtidos por correlações comuns como os obtidos pela equação de Blasius (Taitel e Barnea, 1997). O fator de atrito para a interface que é dado por Wallis (1969):

$$f_i = 0{,}005(1 + 75\alpha_l), \quad \text{se } f_i > 0{,}05 \rightarrow f_i = 0{,}05 \qquad \text{(A.3)}$$

Para escoamento disperso com bolhas ou intermitente, o modelo *drift-flux* quase-estacionário é utilizado. Neste caso, o balanço de momento pode ser escrito como:

$$
\begin{aligned}
&(p_j - p_{j+1})A = 0{,}5 f_m \rho_m v_s^2 \pi \Delta x D + Ag\rho_m (Z_{j+1} - Z_j) \\
&\rho_m = (1-\alpha_g)\rho_l + \alpha_g \rho_g \\
&v_s = (1-\alpha_g)v_l + \alpha_g v_g \\
&v_g = C_0 v_s + v_d
\end{aligned}
\qquad \text{(A.4)}
$$

onde f_m é o fator de atrito calculado com a velocidade v_s.

O procedimento de cálculo pode ser resumido como:

(i) em um momento inicial t_n, α_g, p e o padrão de escoamento são conhecidos em cada seção. As pressões p_1 e p_N juntamente com α_g *na entrada* são mantidos constantes;

(ii) as taxas mássicas para o gás e o líquido em cada seção, $\dot{m}_{g,j}^{n+1}$, são calculadas utilizando-se a equação (A.1) ou (A.4). Caso as taxas indiquem que o padrão de escoamento adotado é indevido, altera-se o padrão e repete-se os cálculos. Posteriormente, o critério para determinação do padrão de escoamento será apresentado;

(iii) um novo vetor de pressões é calculado para o próximo intervalo. O nível de líquido é mantido constante e apenas o gás escoa entre as seções neste passo. Uma relação linear entre as taxas no instante t_{n+1} e a diferença de pressão no mesmo instante é adotada de acordo com a equação (A.5).

$$
\dot{m}_{g,j}^{n+1} = (p_j^{n+1} - p_{j+1}^{n+1})\beta_j^n + R_j^n \qquad \text{(A.5)}
$$

de acordo com a equação (A.1), os valores de β_j^n e R_j^n são dados, para o caso de escoamento separado, por:

$$\beta_j^n = \left[\frac{(f_g S_g + \delta f_i S_i)\dot{m}_g \Delta x}{2A_g^3 \rho_g} - \frac{\delta f_i S_i \dot{m}_l \Delta x}{A_g^2 A_l \rho_l} \right]^{-1}$$

$$R_j^n = \frac{(H_j - H_{j+1}) g \rho_g - \frac{\delta f_i S_i \rho_g \dot{m}_l^2 \Delta x}{A_g^2 A_l \rho_l}}{\left[\frac{(f_g S_g + \delta f_i S_i)\dot{m}_g \Delta x}{2A_g^3 \rho_g} - \frac{\delta f_i S_i \dot{m}_l \Delta x}{A_g^2 A_l \rho_l} \right]^{-1}} \qquad \text{(A.6)}$$

onde δ=1 para $v_g > v_l$ e -1 caso contrário. E para o caso de escoamento disperso a equação (A.4) pode ser escrita na mesma forma da equação (A.5), porém com as seguintes definições:

$$\beta_j^n = \frac{2AC_0{}^2 \rho_g A_g}{f_m \rho_m \pi D \Delta x \left| v_g - v_d \right|}$$

$$R_j^n = -\frac{2AC^2 \rho_g A_g (H_{i+1} - H_i) g \rho_g}{f_m \pi D \Delta x \left| v_g - v_d \right|} + \rho_g A_g v_d \qquad \text{(A.7)}$$

A massa de gás em uma dada seção é dada por:

$$m_{g,j}^{n+1} = m_{g,j}^n + \Delta t (\dot{m}_{g,j-1}^{n+1} - \dot{m}_{g,i}^{n+1}) \qquad \text{(A.8)}$$

Então, a nova densidade do gás é calculada por:

$$\rho_{g,j}^{n+1} = m_{g,j}^{n+1} / A_{g,j}^n \Delta x \qquad \text{(A.9)}$$

O novo valor da pressão é, então, calculado por uma equação de estado, utilizando-se a nova densidade e a temperatura conhecida. Juntando as equações (A.8) e (A.9) e supondo-se gás ideal, obtêm-se:

$$
\begin{aligned}
p_j^{n+1} &= y_j^n + z_j^n(\dot{m}_{g,j-1}^{n+1} - \dot{m}_{g,j}^{n+1}) \\
y_j^n &= m_{g,j}^{n+1}\Re T / A_{g,j}^n \Delta x \\
z_j^n &= \Re T \Delta t / A_{g,j}^n \Delta x
\end{aligned}
\tag{A.10}
$$

As equações (A.5) e (A.10) podem ser combinadas fornecendo o sistema de equações tridiagonal a ser resolvido para obtenção do campo de pressões da célula 2 à *N*-1 no instante *n*+1, dado por:

$$
-z_j^n \beta_{j-1}^n p_{j-1}^{n+1} + (1 + z_j^n \beta_{j-1}^n + z_j^n \beta_j^n) p_j^{n+1} - z_j^n \beta_j^n p_{j+1}^{n+1} = y_j^n + z_j^n R_{j-1}^n - z_j^n \quad \text{(A.11)}
$$

(iv) com os novos valores das pressões, calculam-se as vazões de gás pela equação (A.5);

(v) a nova densidade do gás pode ser calculada pela equação dos gases perfeitos;

(vi) a nova massa de gás pode ser calculada usando-se a equação (A.8);

(vii) a nova vazão de líquido pode ser calculada pelas equações de quasi-equilíbrio, equações somadas (modelo do tipo *drift flux*) e ainda dependendo da padrão de escoamento. Neste ponto os autores (Taitel e Barnea, 1997) apenas informam que calculam a vazão de líquido como no segundo passo do algoritmo, porém, no segundo passo, ambas as equações são resolvidas para as velocidades do gás e do líquido. Neste ponto, a nova velocidade do gás já é conhecida. Pode-se optar então por resolver a segunda equação (A.1) com a velocidade do gás conhecida. No entanto, na implementação realizada, optou-se por resolver a soma das duas equações (A.1);

(viii) calculam-se a nova massa de líquido e novo *holdup* com:

$$
\begin{aligned}
m_{l,ji}^{n+1} &= m_{l,j}^n + \Delta t(\dot{Q}_{l,1}^{n+1} - \dot{Q}_{l,N}^{n+1}) \\
\alpha_{g,j}^{n+1} &= 1 - m_{l,j}^{n+1} / \rho_{l,j}^{n+1} A \Delta x
\end{aligned}
\tag{A.12}
$$

Determinação do padrão de escoamento

As condições que definem o padrão de escoamento dependem da inclinação. Em escoamento ascendente e horizontal, se a condição de Kelvin-Helmholtz, equação (A.13), for satisfeita, o escoamento é estratificado.

$$v_g > [1 - H_l / D]\sqrt{(\rho_l - \rho_g) g \cos\theta A_g / \rho_g S_i} + v_l \qquad \text{(A.13)}$$

Onde H_l é a altura de líquido, D é o diâmetro e Si é o perímetro da interface. Caso o critério da equação (A.13) não seja satisfeito, e o *holdup* esteja abaixo de 0,2 (h_L/D < 0,25), tem-se escoamento anular, caso contrário (*holdup* > 0,2), o escoamento será intermitente ou de bolhas. Neste caso, a distinção entre escoamento intermitente e de bolhas será dado pela velocidade do líquido de acordo com o critério de Barnea (1986), equação (A.14).

$$(0.725 + 4.15 h^{1/2})(\sigma / \rho_l)^{3/5} \left(2 \frac{f_m (v_{ls} + v_{gs})^3}{D} \right)^{-2/5} < 2 \sqrt{\frac{0.4\sigma}{(\rho_l - \rho_g) g}} \qquad \text{(A.14)}$$

Onde h é, v_{ls} é a velocidade superficial de líquido, v_{gs} é a velocidade superficial de gás e σ é a tensão superficial.

APÊNDICE B

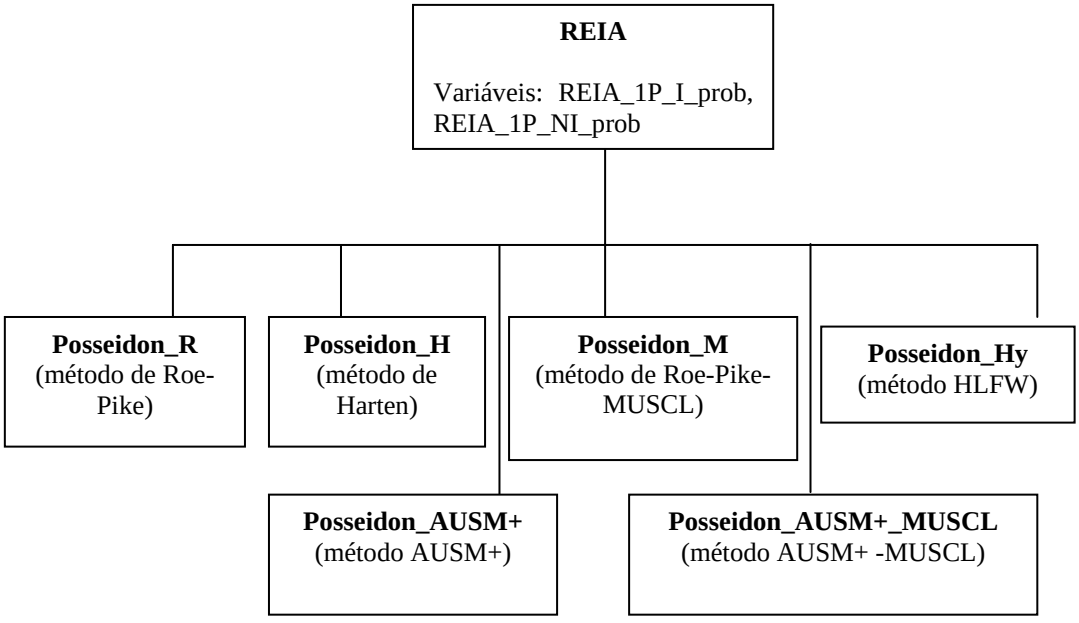
SIMULADOR TITÃS

Todos os métodos utilizados nesta tese foram implementados em um código computacional em FORTRAN95, utilizando-se os recursos de orientação a objeto, com um total de cerca de 17000 linhas para a parte monofásica e 23000 linhas para a parte bifásica. O simulador é divido em três grandes módulos: REIA, CRONOS e HERA.

O módulo REIA é destinado à solução do escoamento unidimensional de gás ideal e gases reais. O módulo HERA é destinado à solução de escoamento bifásico com modelo de *quasi*-equilíbrio. Finalmente, o módulo CRONOS é destinado à solução do escoamento multifásico usando os modelos *drift-flux* e *two-fluid*.

MÓDULO REIA

O módulo REIA é subdividido em submódulos POSSEIDON acrescidos de uma designação de acordo com o método adotado. O diagrama a seguir mostra os submódulos do módulo REIA.



Os submódulos POSSEIDON possuem as seguintes etapas:

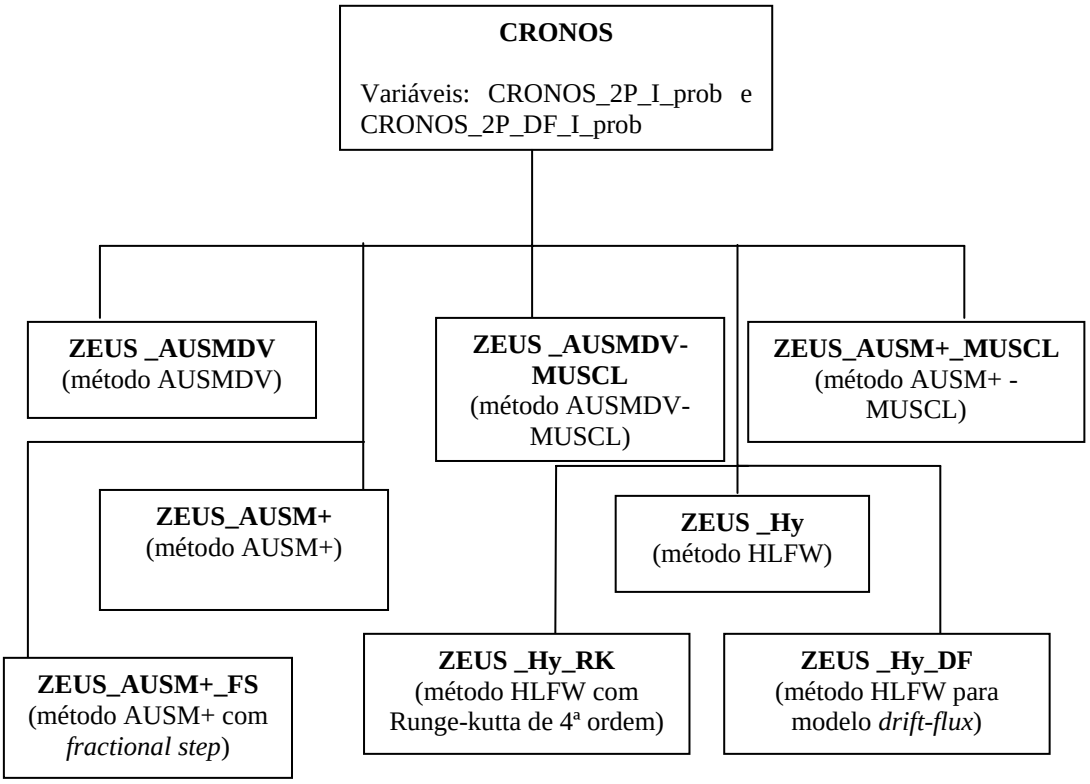
1- Definição do tamanho das variáveis e alocação dinâmica das mesmas
2- Aplicação das condições iniciais
3- Calculo do passo de tempo baseado no CFL
4- Enquanto o tempo for menor ou igual ao tempo total
    a. Chama o *solver*
    b. Aplica as condições de contorno

O *solver* tem as seguintes etapas:

1- Para cada face
    a. Calcula o fluxo
    b. Calcula o estado intermediário
    c. Calcula a matriz jacobiana
    d. Calcula os autovetores e autovalores
    e. Calcula as intensidades de ondas (*wave strengths*)
2- Para todos os volumes
    a. Calcula os termos fontes
    b. Calcula os valores das variáveis conservativas no próximo instante
    c. Calcula variáveis auxiliares, propriedades termodinâmicas, etc.

MÓDULO CRONOS

O módulo CRONOS é subdividido em submódulos ZEUS acrescidos de uma designação de acordo com o método adotado. O diagrama a seguir mostra os submódulos do módulo ZEUS.



Os submódulos ZEUS possuem as seguintes etapas:

1- Definição do tamanho das variáveis e alocação dinâmica das mesmas
2- Aplicação das condições iniciais
3- Calculo do passo de tempo baseado no CFL
4- Enquanto o tempo for menor ou igual ao tempo total
    a. Chama o *solver*
    b. Aplicação das condições de contorno

O *solver* tem as seguintes etapas para os métodos AUSM:

1- Para cada face
    a. Calcula as variáveis reconstruídas se for o caso
    b. Calcula o número de Mach das faces
    c. Calcula os polinômios dos métodos AUSM
    d. Calcula os fluxos AUSM
2- Para todos os volumes
    a. Calcula os termos fontes
    b. Calcula os termos de correção de pressão interfacial
    c. Calcula os valores das variáveis conservativas no próximo instante
    d. Calcula variáveis auxiliares, propriedades termodinâmicas, etc.

O *solver* tem as seguintes etapas para o método HLFW:

1- Para cada face
    a. Calcula o fluxo
    b. Calcula os fluxos de Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff
    c. Calcula o fator de ponderação
    d. Calcula os fluxos HLFW
2- Para todos os volumes
    a. Calcula os termos fontes
    b. Calcula os termos de correção de pressão interfacial
    c. Calcula os valores das variáveis conservativas no próximo instante
    d. Calcula variáveis auxiliares, propriedades termodinâmicas, etc.

Adicionalmente, são necessárias as definições de funções externas (*externals*) definidas pelo usuário e que fazem parte dos argumentos das rotinas do simulador TITÃS, para as seguintes finalidades:

- Estabelecimento das condições de contorno.
- Cálculo dos termos fonte.
- Estabelecimento das condições iniciais.
- Cálculo do estado intermediário se necessário.

- Equações de estado, tanto para cálculo da pressão, densidade, temperatura, entalpia, energia total, etc. Uma rotina para cada uma das variáveis para cada EdE é necessária

Existem muitas outras sub-rotinas que são definidas nas chamadas *general interfaces*. Este tipo de recurso é conhecido como polimorfismo e permite que um único nome seja usado para chamar um conjunto de sub-rotinas, sendo que o compilador decidirá em tempo de compilação qual delas utilizar, em função dos tipos de variáveis, tamanhos e quantidade presentes na chamada da mesma. Como exemplo, pode-se chamar um nome genérico CALCULA_FLUXO no qual sub-rotinas para cálculo do fluxo monofásico ou bifásico estão presentes. Em função dos argumentos usados ao chamar-se CALCULA_FLUXO, em tempo de compilação será usada a rotina para cálculos monofásicos ou bifásicos.

A maioria das rotinas favorecem o uso de mais memória para obterem maior desempenho. Isto é feito principalmente de duas formas. Em primeiro lugar, cálculos repetidos são guardados em variáveis próprias evitando serem realizados mais de uma vez para células diferentes. Em segundo lugar, partes do código foram repetidas a fim de evitar clausulas de *if* no interior de DO *loops*. Por exemplo, se em um *loop* algum cálculo é diferente para as células extremas (1 ou *N*), o código do *loop* é repetido evitando uma cláusula *if* no seu interior.

Finalmente, deve-se salientar que as técnicas de programação usadas permitem a inclusão mais rápida e organizada de novos modelos, EdE’s etc. Por isso, as variáveis internas são matriciais e são definidas em função do número de células, número de variáveis e número de fases, podendo este número assumir quaisquer valores, e apenas as rotinas definidas como *external* deverão estar adaptadas aos tamanhos desejados.