

**SIMULAÇÕES DE ALTO DESEMPENHO DE ESCOAMENTOS
MULTICOMPONENTES UTILIZANDO MÉTODO DE LATTICE
BOLTZMANN REGULARIZADO EM GPUS**

Breno Vargas Gemelgo, Luiz Adolfo Hegele Júnior

INTRODUÇÃO

O estudo de escoamentos com interfaces é fundamental para compreender fenômenos presentes em diversos processos naturais e industriais, como injeção de combustíveis, dispersão de poluentes e escoamentos em meios porosos. Esses sistemas apresentam comportamentos complexos, influenciados por efeitos de tensão superficial, gradientes de pressão, forças inerciais e viscosas. A modelagem numérica desses fenômenos é desafiadora, pois exige, além da descrição hidrodinâmica, a representação precisa da evolução interfacial e das interações entre as fases. Diante desse cenário, o Método de Lattice Boltzmann (LBM) destaca-se como uma abordagem cinética capaz de representar o comportamento de fluidos por meio da simulação de sistemas de partículas que se deslocam em uma malha discreta e colidem entre si. Munido das ferramentas adequadas, o método pode capturar de forma natural e simples — do ponto de vista matemático e computacional — tanto os processos hidrodinâmicos quanto os interfaciais. Este trabalho aplica o LBM para a simulação de escoamentos incompressíveis multicomponentes, com ênfase em fluidos imiscíveis separados por interfaces difusas, avaliando seu desempenho e precisão em dois casos de estudo representativos: a oscilação de uma gota inicialmente deformada e a evolução de um jato turbulento, considerada no contexto da dispersão e fragmentação de vazamentos submarinos de óleo.

DESENVOLVIMENTO

A metodologia proposta combina modelagem hidrodinâmica e representação interfacial dentro do arcabouço do LBM. Para a parte hidrodinâmica, há a opção de empregar os conjuntos de velocidades D3Q19 ou D3Q27, que correspondem a discretizações tridimensionais do espaço de velocidades com, respectivamente, 19 ou 27 direções possíveis de deslocamento das partículas na malha. A interação entre as diferentes componentes é modelada por meio de uma formulação de campo de fase, na qual uma variável de ordem as distingue. A evolução dessa variável é governada por uma equação de advecção-difusão com a adição de um termo antidifusivo responsável por manter a interface bem localizada, com base na abordagem proposta por Reis (2022). A tensão superficial é incorporada a partir do campo de fase, utilizando uma força contínua proporcional à curvatura da interface conforme descrito por Montessori (2024), de forma consistente com a lei de Young-Laplace. Essa força é acoplada à dinâmica do LBM por meio de um termo adicional na equação de evolução hidrodinâmica, de modo a reproduzir corretamente os efeitos capilares. Para atenuar instabilidades e eliminar modos não físicos de alta ordem, aplica-se uma técnica de filtragem chamada regularização, que projeta a parte não-equilíbrio da distribuição em uma base de Hermite, como descrito por Shan (2006), preservando apenas os modos hidrodinâmicos relevantes. O método é

implementado em unidades de processamento gráfico (GPUs) usando CUDA em C++, explorando o paralelismo inerente do LBM e da própria arquitetura, a fim de aproveitar eficientemente os recursos computacionais disponíveis. A metodologia foi aplicada a dois casos de estudo: a oscilação e relaxação de uma gota inicialmente deformada, visando validar a modelagem da tensão superficial e dissipação viscosa, e o escoamento de um jato turbulento, para avaliar a consistência hidrodinâmica e a reprodução de regimes interfaciais complexos em altas velocidades e viscosidades incrivelmente baixas. Além dos aspectos de modelagem, foram adotadas considerações aritméticas de baixo nível para aumentar a robustez numérica em precisão simples, seguindo os passos de Lehmann (2019). Entre elas, estão estratégias como a reordenação de somas e o uso de funções de distribuição de partículas deslocadas para mitigar problemas típicos em operações de ponto flutuante, como cancelamento catastrófico e deriva numérica.

RESULTADOS

No caso da oscilação de uma gota inicialmente deformada, as simulações reproduziram a frequência prevista pela formulação de Lamb (1932), ajustada para efeitos viscosos segundo o modelo de Miller (1968), apresentando erro relativo inferior a 2%. Para o jato turbulento, a variação do número de Weber permitiu observar diferentes regimes interfaciais, desde gotejamento controlado por tensão superficial até atomização. O perfil médio de velocidade axial exibiu comportamento coerente com a teoria de jatos livres, incluindo a autossimilaridade em regiões plenamente desenvolvidas, em acordo com Hussein (1994). Em ambos os casos, o método evidenciou boa capacidade preditiva, e a implementação em GPUs viabilizou simulações tridimensionais de grande porte com eficiência milhares de vezes superior à de implementações equivalentes em MATLAB.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O método proposto mostrou-se robusto para a simulação de escoamentos incompressíveis multicomponentes imiscíveis com interfaces difusas, conciliando estabilidade numérica e consistência física. A combinação entre regularização, campo de fase e técnicas aritméticas em precisão simples reduziu erros numéricos e explorou o paralelismo das GPUs, viabilizando simulações tridimensionais de grande porte com alto desempenho. Esses avanços reforçam o LBM regularizado como ferramenta para o estudo de escoamentos complexos e sua aplicação em problemas de maior escala e relevância prática. No contexto atual, o modelo multicomponente desenvolvido permite abordar a dinâmica de jatos submarinos de óleo, visando representar o comportamento associado a vazamentos subaquáticos. As próximas investigações darão continuidade a essa linha, explorando em maior detalhe a evolução hidrodinâmica e interfacial de jatos em cenários de relevância ambiental, incluindo estratégias de mitigação como a aplicação de jatos de água sobre o escoamento de óleo (SSMD), avaliando sua eficácia em promover a dispersão, auxiliar na contenção e contribuir para a redução dos impactos ambientais.

Palavras-chave: método de Lattice Boltzmann; escoamentos multicomponentes; GPU; interfaces difusas; simulação numérica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

HUSSEIN, Hussein.; CAPP, Steven.; GEORGE, William. **Velocity measurements in a high-Reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet.** Journal of Fluid Mechanics, v. 258, p. 31–75, 1994.

LAMB, Horace. **Hydrodynamics.** 6. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1932.

LEHMANN, Moritz. **High Performance Free Surface LBM on GPUs.** 2019. Master's thesis (Biofluid Simulation and Modeling, Theoretische Physik VI) – Universität Bayreuth, Bayreuth, Alemanha.

MILLER, Clarence; SCRIVEN, Lawrence. **The oscillations of a fluid droplet immersed in another fluid.** Journal of Fluid Mechanics, v. 32, n. 3, p. 417–435, 1968.

MONTESORI, Andrea; HEGELE JÚNIOR, Luiz Adolfo; LAURICELLA, Marco. **A high-performance lattice Boltzmann model for multicomponent turbulent jet simulations.** arXiv preprint, arXiv:2403.15773 [physics.flu-dyn], 2024.

REIS, Tim. **A lattice Boltzmann formulation of the one-fluid model for multiphase flow.** Journal of Computational Physics, v. 453, 110962, 2022.

SHAN, Xiaowen; YUAN, Xue-Feng; CHEN, Hudong. **Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation.** Journal of Fluid Mechanics, v. 550, p. 413–441, 2006.

DADOS CADASTRAIS

BOLSISTA: Breno Vargas Gemelgo

MODALIDADE DE BOLSA: Bolsa de Inovação

VIGÊNCIA: 09/2024 a 04/2026 – Total: 19 meses

ORIENTADOR(A): Luiz Adolfo Hegele Júnior

CENTRO DE ENSINO: CESFI

DEPARTAMENTO: Departamento de Engenharia de Petróleo

ÁREAS DE CONHECIMENTO: Engenharia de Petróleo

TÍTULO DO PROJETO DE PESQUISA: Modelagem física e numérica de jato submarino de óleo baseada em experimentos (SUBJET)

Nº PROTOCOLO DO PROJETO DE PESQUISA: NPP4318-2023