

PROJETO DE GRADUAÇÃO

**CONVECCÃO NATURAL DE EMULSÃO EM
UMA CAVIDADE**

Por,

Rafaela Corrêa Martinho Czarneski

Brasília, 8 de dezembro de 2017

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
Faculdade de Tecnologia
Departamento de Engenharia Mecânica

PROJETO DE GRADUAÇÃO

**CONVECÇÃO NATURAL DE EMULSÃO EM
UMA CAVIDADE**

Por,
Rafaela Corrêa Martinho Czarneski

Relatório submetido como requisito parcial para obtenção
do grau de Engenheiro Mecânico

Banca Examinadora

Prof. Taygoara F. de Oliveira (ENM-UnB)(Orientador) _____
Prof. Mário B. B. de Siqueira (ENM-UnB)(Examinador) _____
Prof. Adriano Possebon Rosa (ENM-UnB)(Examinador) _____

Brasília 8 de dezembro de 2017

Resumo

Possuindo o objetivo de simular numericamente, por meio de um código próprio escrito em Fortran, a convecção natural de uma emulsão no interior de uma cavidade, este trabalho se inicia com uma breve apresentação dos principais temas por ele abordados e da bibliografia relacionada já existente. Em seguida, vem uma revisão dos conceitos teóricos mais importantes para seu entendimento e de toda a metodologia utilizada para se desenvolver o programa.

Como um teste inicial, simulou-se o escoamento transiente sob placa plana, ou escoamento cisalhante, em uma cavidade quadrada com aproximações de primeira e segunda ordem no tempo, e comparou-se os resultados obtidos com aqueles de trabalhos similares disponíveis na literatura.

Após confirmado o bom funcionamento da solução das equações de movimento, adaptou-se a rotina para simular, para diferentes números de Rayleigh, o comportamento de um fluido uniforme quando submetido a um gradiente de temperatura. Por fim, com o uso do método de Level Set, esse fluido foi transformado em uma mistura bifásica (colocase uma gota no seu interior) para, assim, analisar o impacto da presença dessa interface nos fenômenos de troca de calor.

Palavras-chaves: Transferência de Calor, Convecção, Gota, Cavidade.

Abstract

Aiming to perform a numerical simulation, using a self-made Fortran code, of the natural convection of an emulsion inside a closed cavity, this work is initiated with a brief introduction of the main subjects approached by it and an introduction to the related bibliography. Subsequently, comes a review of the most important notions necessary for its understanding and of the complete methodology used to develop the program.

As an initial test for the written program, the unsteady shear driven flow inside a square cavity using first and second order time approximations was simulated and the results were compared with the ones available in the scientific literature.

When the equations of motion were successfully solved, the routine was adapted to simulate, for different Rayleigh numbers, the behavior of an uniform fluid when exposed to a temperature gradient. Finally, using a Level Set method, the fluid was turned into a biphasic mixture (a drop is placed inside it) to analyze how the presence of this interface affects the heat exchange phenomena.

Key-words: Heat Transfer, Convection, Drop, Cavity.

Lista de Figuras

Figura 1.1 – Mistura bifásica de água e óleo.	4
Figura 1.2 – Microemulsão de água em óleo e óleo em água.	5
Figura 1.3 – A máquina planeta Terra, composta por inúmeras máquinas menores. (BEJAN, 2013)	6
Figura 1.4 – Modelo de cavidade retangular utilizado por Batchelor. (BATCHE- LOR, 1954)	7
Figura 1.5 – Linhas de corrente tangentes aos vetores velocidade.	11
Figura 1.6 – Forças intermoleculares no interior de uma gota.	11
Figura 2.1 – Malha cartesiana utilizada em análises de diferenças finitas para casos 2D.	13
Figura 2.2 – Stencil de cinco pontos utilizado nas equações de diferenças finitas. . .	15
Figura 2.3 – Staggered grid ou malha de MAC. (KAZUFUMI; ZHONGHUA, 2008)	19
Figura 2.4 – Volume de controle fixo no espaço.	21
Figura 2.5 – Curvas de $f(x)$ constante. (SHEWCHUK, 1994)	32
Figura 2.6 – Gradiente de $f(x)$ para diferentes locais do plano (SHEWCHUK, 1994). 33	
Figura 3.1 – Comparação do número de iterações necessárias para encontrar o campo de velocidade \mathbf{u} com aproximações de primeira e segunda ordem no tempo.	37
Figura 3.2 – Comparação do número de iterações necessárias para encontrar o campo de velocidade \mathbf{v} com aproximações de primeira e segunda ordem no tempo. 37	
Figura 3.3 – Comparação do número de iterações necessárias para encontrar o campo de pressão \mathbf{p} com aproximações de primeira e segunda ordem no tempo. 38	
Figura 3.4 – Distribuição do campo de pressão em malhas com diferentes refinamentos. 39	
(a) Malha 33 x 33.	39
(b) Malha 65 x 65.	39
(c) Malha 129 x 129.	39
(d) Malha 257 x 257.	39
(e) Malha 513 x 513.	39
(f) Malha 1025 x 1025.	39
Figura 3.5 – Distribuição da velocidade u do escoamento em malhas com diferentes refinamentos.	40

(a) Malha 33 x 33.	40
(b) Malha 65 x 65.	40
(c) Malha 129 x 129.	40
(d) Malha 257 x 257.	40
(e) Malha 513 x 513.	40
(f) Malha 1025 x 1025.	40
Figura 3.6 – Distribuição da velocidade v do escoamento em malhas com diferentes refinamentos.	41
(a) Malha 33 x 33.	41
(b) Malha 65 x 65.	41
(c) Malha 129 x 129.	41
(d) Malha 257 x 257.	41
(e) Malha 513 x 513.	41
(f) Malha 1025 x 1025.	41
Figura 3.7 – Legenda para as Figs. (3.8) e (3.9), (GHIA; GHIA; SHIN, 1982).	42
Figura 3.8 – Perfil de velocidade de u ao longo de linhas verticais que passam pelo centro da cavidade e do vórtice primário, (GHIA; GHIA; SHIN, 1982).	43
Figura 3.9 – Perfil de velocidade de v ao longo de uma linhas horizontais que passam pelo centro da cavidade e do vórtice primário, (GHIA; GHIA; SHIN, 1982).	43
Figura 3.10–Comparação dos resultados para o perfil de velocidade de u gerado com o programa e aquele encontrado por Ghia, Ghia e Shin (1982).	44
(a) Perfil de velocidade de u para $Re = 100$	44
(b) Perfil de velocidade de u para $Re = 400$	44
(c) Perfil de velocidade de u para $Re = 1000$	44
Figura 3.11–Comparação dos resultados para o perfil de velocidade de v gerado com o programa e aquele encontrado por Ghia, Ghia e Shin (1982).	45
(a) Perfil de velocidade de v para $Re = 100$	45
(b) Perfil de velocidade de v para $Re = 400$	45
(c) Perfil de velocidade de v para $Re = 1000$	45
Figura 3.12–Perfis de velocidade de u gerados para diferentes números de Reynolds.	46
Figura 3.13–Perfis de velocidade de v gerados para diferentes números de Reynolds.	46
Figura 3.14–Comparação dos perfis das linhas de corrente obtidos pelo programa e por Ghia, Ghia e Shin (1982).	47
(a) Linhas de corrente de Ghia, Ghia e Shin (1982).	47
(b) Linhas de corrente obtidas com o programa próprio.	47
Figura 3.15–Comparação dos perfis de vorticidade obtidos pelo programa e por Ghia, Ghia e Shin (1982).	47
(a) Contornos de vorticidade de Ghia, Ghia e Shin (1982).	47
(b) Linhas de vorticidade obtidas com o programa próprio.	47
Figura 3.16–Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^3$	49

(a)	Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).	49
(b)	Resultados obtidos.	49
Figura 3.17	–Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^4$.	49
(a)	Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).	49
(b)	Resultados obtidos.	49
Figura 3.18	–Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^5$.	50
(a)	Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).	50
(b)	Resultados obtidos.	50
Figura 3.19	–Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^6$.	50
(a)	Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).	50
(b)	Resultados obtidos.	50
Figura 3.20	–Gráficos do número de Nusselt, na parede quente, para diferentes números de Rayleigh.	52
(a)	$Ra = 10^3$	52
(b)	$Ra = 10^4$	52
(c)	$Ra = 10^5$	52
(d)	$Ra = 10^6$	52
Figura 3.21	–Curvas dos números de Nusselt, obtidos na simulação e usando a fórmula empírica de Berkovsky e Polevikov (1977), em função do número de Rayleigh.	53
Figura 3.22	–Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$.	55
(a)	$t = 0,0$	55
(b)	$t = 0,1$	55
(c)	$t = 0,25$	55
(d)	$t = 0,5$	55
(e)	$t = 0,75$	55
(f)	$t = 1,0$	55
(g)	$t = 1,25$	55
(h)	$t = 1,5$	55
(i)	$t = 1,75$	55
(j)	$t = 2,0$	55
Figura 3.23	–Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$.	56
(a)	$t = 0,0$	56
(b)	$t = 0,1$	56
(c)	$t = 0,25$	56
(d)	$t = 0,5$	56
(e)	$t = 0,75$	56
(f)	$t = 1,0$	56
(g)	$t = 1,25$	56
(h)	$t = 1,5$	56

(i)	$t = 1,75$	56
(j)	$t = 2,0$	56
Figura 3.24–Variação da área da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$		57
Figura 3.25–Um período da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$		58
Figura 3.26–Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$.		59
(a)	$t = 0,0$	59
(b)	$t = 0,1$	59
(c)	$t = 0,25$	59
(d)	$t = 0,5$	59
(e)	$t = 0,75$	59
(f)	$t = 1,0$	59
(g)	$t = 1,25$	59
(h)	$t = 1,5$	59
(i)	$t = 1,75$	59
(j)	$t = 2,0$	59
Figura 3.27–Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$.		60
(a)	$t = 0,0$	60
(b)	$t = 0,1$	60
(c)	$t = 0,25$	60
(d)	$t = 0,5$	60
(e)	$t = 0,75$	60
(f)	$t = 1,0$	60
(g)	$t = 1,25$	60
(h)	$t = 1,5$	60
(i)	$t = 1,75$	60
(j)	$t = 2,0$	60
Figura 3.28–Variação da área da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$.		61
Figura 3.29–Um período da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$		61
Figura 3.30–Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$.		62
(a)	$t = 0,0$	62
(b)	$t = 0,1$	62
(c)	$t = 0,25$	62
(d)	$t = 0,5$	62
(e)	$t = 0,75$	62
(f)	$t = 1,0$	62
(g)	$t = 1,25$	62
(h)	$t = 1,5$	62
(i)	$t = 1,75$	62
(j)	$t = 2,0$	62

Figura 3.31–Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 0,01$ e	
$\lambda = 1,0$.	63
(a) $t = 0,0$.	63
(b) $t = 0,1$.	63
(c) $t = 0,25$.	63
(d) $t = 0,5$.	63
(e) $t = 0,75$.	63
(f) $t = 1,0$.	63
(g) $t = 1,25$.	63
(h) $t = 1,5$.	63
(i) $t = 1,75$.	63
(j) $t = 2,0$.	63
Figura 3.32–Variação da área da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$.	64
Figura 3.33–Um período da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$.	64
Figura 3.34–Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$.	65
(a) $t = 0,0$.	65
(b) $t = 0,1$.	65
(c) $t = 0,25$.	65
(d) $t = 0,5$.	65
(e) $t = 0,75$.	65
(f) $t = 1,0$.	65
(g) $t = 1,25$.	65
(h) $t = 1,5$.	65
(i) $t = 1,75$.	65
(j) $t = 2,0$.	65
Figura 3.35–Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 0,01$ e	
$\lambda = 5,0$.	66
(a) $t = 0,0$.	66
(b) $t = 0,1$.	66
(c) $t = 0,25$.	66
(d) $t = 0,5$.	66
(e) $t = 0,75$.	66
(f) $t = 1,0$.	66
(g) $t = 1,25$.	66
(h) $t = 1,5$.	66
(i) $t = 1,75$.	66
(j) $t = 2,0$.	66
Figura 3.36–Variação da área da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$.	67
Figura 3.37–Número de Nusselt na parede quente para a mistura bifásica.	68
(a) $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$.	68
(b) $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$.	68

(c)	$Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$	68
(d)	$Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$	68

Lista de Tabelas

Tabela 3.1 – Números de Nusselt.	52
Tabela 3.2 – Números de Nusselt calculados por meio do programa e da fórmula empírica fornecida por Berkovsky e Polevikov (1977).	53

Lista de abreviaturas e siglas

<i>NS</i>	Navier-Stokes
<i>TW</i>	Top wall ou parede superior.
<i>BW</i>	Bottom wall ou parede inferior.
<i>LW</i>	Left wall ou parede esquerda.
<i>RW</i>	Right wall ou parede direita.
<i>Re</i>	Número de Reynolds.
<i>Pr</i>	Número de Prandtl.
<i>Ra</i>	Número de Rayleigh.
<i>Nu</i>	Número de Nusselt.
<i>Ca</i>	Número de capilaridade.

Lista de símbolos

σ	Tensão superficial.
a	Raio da gota.
\mathbf{v}	Vetor genérico.
\mathbf{M}	Matriz genérica.
vv	Produto vetor vezes vetor.
\mathbf{Mv}	Produto matriz vezes vetor.
nx	Número de pontos no eixo x da malha.
ny	Número de pontos no eixo y da malha.
\mathbf{u}	Vetor velocidade com componentes (u,v).
p	Pressão.
t	Tempo.
ω	Vorticidade.
λ	Razão de viscosidade.
\mathbf{F}_c	Força de contato na interface.
E	Energia interna total.
\dot{Q}	Taxa de calor.
\dot{W}	Taxa de trabalho.
ρ	Massa específica.
e_i	Energia interna por unidade de massa.
\mathbf{q}''	Vetor taxa de calor.
$\hat{\mathbf{n}}$	Vetor unitário.
V	Volume de controle.

S	Superfície de controle.
\mathbf{g}	Forças de campo.
\mathbf{f}	Vetor forças de superfície.
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor de tensões de Cauchy.
\mathbf{P}	Tensor do campo de pressão.
\mathbf{I}	Matriz identidade.
\mathbf{D}	Tensor taxa de deformação.
\mathbf{W}	Tensor de vorticidade.
T	Temperatura.
k	Condutividade térmica.
α	Difusividade térmica.
h	Coefficiente de troca de calor por convecção.
ρ_0	Massa específica de referência.
\mathbf{F}	Força gravitacional.
β	Coefficiente de expansão volumétrica.
μ	Viscosidade dinâmica.
ν	Viscosidade cinemática.
ϕ	Função level set.
δ	Delta de Dirac.
$H(\phi)$	Função Heaviside.
τ	Interface.
Ω	Região delimitada pela interface.
κ	Curvatura da interface.
\mathbf{b}	Vetor conhecido do método do gradiente.
\mathbf{A}	Matriz conhecida do método do gradiente.
\mathbf{r}	Resíduo.
\mathbf{d}	Resíduo atualizado.

- η Direção de busca do método do gradiente.
- φ Direção de busca atualizada do método do gradiente.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	MOTIVAÇÃO	1
1.2	VISÃO GLOBAL	2
1.3	OBJETIVOS	2
1.3.1	Objetivo Geral	2
1.3.2	Objetivos Específicos	3
1.4	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
1.4.1	Emulsões	4
1.4.2	Convecção Natural	5
1.4.3	A Gota na Cavidade	8
1.5	REVISÃO DE CONCEITOS	9
1.5.1	Números Adimensionais	9
1.5.2	Vorticidade e Linhas de Corrente	11
1.5.3	Tensão Superficial	11
2	METODOLOGIA	13
2.1	MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS	13
2.2	MÉTODO DE PROJEÇÃO: NAVIER-STOKES	16
2.3	EQUAÇÃO DA ENERGIA	21
2.4	APROXIMAÇÃO DE BOUSSINESQ	23
2.5	LEVEL SET	25
2.6	ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES	27
2.7	CONDIÇÕES DE CONTORNO	29
2.8	CÁLCULO DO NÚMERO DE NUSSELT	30
2.9	GRADIENTE CONJUGADO	31
3	RESULTADOS	36
3.1	ESCOAMENTO CISALHANTE	36
3.1.1	Convergência do método de primeira e segunda ordem	36
3.1.2	Influência do refinamento da malha	38
3.1.3	Validação dos resultados	42

3.2	EQUAÇÃO DA ENERGIA E CONVECÇÃO	48
3.2.1	Perfis de temperatura e linhas de corrente	48
3.2.2	Número de Nusselt	51
3.3	MISTURA BIFÁSICA	54
3.3.1	Movimento da Gota	54
3.3.2	Influência no número de Nusselt	67
4	CONCLUSÕES	70
	REFERÊNCIAS	71

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

Fenômenos de convecção natural gerados por forças de empuxo são formas extremamente importantes de transferência de calor e massa. Sendo modelo para diversos fenômenos naturais e científicos, como a dispersão de poluentes e calor na atmosfera e em estuários, formação dos ventos e correntes oceânicas, ou ainda, mais especificamente, para escoamentos no interior de cavidades fechadas, como aplicações de isolamento térmico (paredes, telhados, reatores nucleares) e coleta de energia solar (DAVIS, 1986); são de difícil modelagem, dado o fato de serem escoamentos predominantemente turbulentos.

Felizmente, sua simplificação para problemas de escoamentos em regime laminar, no interior de cavidades retangulares com paredes submetidas a um diferencial de temperatura, já providencia uma boa aproximação para casos reais (CORMACK; LEAL; IMBERGER, 1974). Por esse motivo, problemas com a mesma base deste trabalho já foram extensivamente estudados por outros pesquisadores e servirão como um bom norte para o desenvolvimento deste estudo.

Já as emulsões, compostos formados pela mistura de dois líquidos imiscíveis, são agentes muito presentes no nosso dia-a-dia: no próprio corpo humano (sangue e outros fluidos biológicos), nos alimentos (manteiga, maionese, sorvete), em diversos produtos da indústria farmacêutica (remédios, cosméticos) ou ainda na indústria petroquímica. Ao mesmo tempo, é sabido que existe uma grande dificuldade em se lidar com essas substâncias, devido ao seu normal estado de alta instabilidade química e termodinâmica, que torna alguns processos que envolvem seu uso muito caros e até inviáveis. Além disso, o estudo computacional de um escoamento emulsivo, por assim dizer, ainda não foi totalmente explorado e dá abertura para muitos trabalhos a serem ainda desenvolvidos.

Espera-se que uma análise mais profunda de qualquer fenômeno que envolva esse tipo de mistura possa trazer resultados benéficos que impactam diretamente em diferentes ramos das nossas vidas. De bônus, devido à sua relativa inovação e complexidade matemática, a modelagem da convecção natural de uma emulsão no interior da cavidade, ainda pouco estudada, se apresenta como um bom desafio a ser superado.

1.2 VISÃO GLOBAL

A simulação numérica do processo de convecção natural de uma mistura multifásica é um processo complexo que, neste trabalho, foi dividido em várias etapas a serem desenvolvidas nos dois semestres que envolvem o projeto de graduação.

O primeiro passo, apresentado no relatório passado e mantido nesta nova versão, foi a criação de uma base de programação, desenvolvida em Fortran, e uma de métodos numéricos que auxilie na resolução das equações governantes do problema (programação de diferentes métodos para resolução de sistemas lineares, por exemplo). Em seguida, utilizando-se de ferramentas como o método de diferenças finitas e o método da projeção, procurou-se simular, inicialmente, o escoamento do "shear driven flow" (escoamento cisalhante) de um fluido incompressível no interior de uma cavidade bidimensional. Dadas as condições iniciais e de contorno, são gerados campos para as velocidades e a pressão no fluido. Primeiramente, programou-se um método de segunda ordem no espaço e primeira ordem no tempo e, posteriormente, o mesmo programa foi adaptado para se tornar de segunda ordem também no domínio do tempo.

Na segunda etapa, iniciada somente neste semestre, incluiu-se no programa a Equação da Energia para o escoamento incompressível e gerou-se o campo de temperaturas aplicando-se a aproximação de Boussinesq. Com isso, utilizando-se novas condições de contorno, a convecção do fluido não será mais gerada pelo movimento relativo entre ele e suas fronteiras, mas sim pela diferença de temperatura entre os mesmos. Para validação dos resultados, comparou-se os campos de temperatura e os números de Nusselt, para diferentes regimes de escoamento, com os dados de artigos mais antigos disponíveis na literatura.

A terceira e última parte envolve a transformação do fluido monofásico em uma mistura bifásica. Utilizando o método de Level Set, é feita a modelagem de uma única gota imersa no interior do fluido. Mudando a razão de viscosidade na interface e seu número de capilaridade, analisou-se, então, por meio das variações no número de Nusselt, o impacto da presença dessa gota nas características do escoamento.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo Geral

O principal objetivo deste trabalho é o estudo da convecção natural bifásica em uma cavidade fechada, com vistas à determinação do número de Nusselt em função do número de Rayleigh e das características da emulsão; tais como a razão de viscosidade e a tensão superficial na interface.

1.3.2 Objetivos Específicos

Os objetivos, atingidos com sucesso, da primeira parte deste projeto eram:

- Criação de um banco de métodos numéricos para resolução de sistemas lineares (operações produto vetor vezes vetor e vetor vezes matriz, métodos de Gauss-Seidel, Gradiente Conjugado e aplicação de pré-condicionamento);
- Discretização e programação das equações gerais governantes para escoamentos incompressíveis (Equação da Continuidade, Navier-Stokes, condições de contorno): usando o método das diferenças finitas e o stencil de cinco pontos, buscou-se criar um código próprio que otimizasse a solução dessas equações e a computação das variáveis de malha ponto-a-ponto;
- Implementação do método de projeção de primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço e simulação numérica do escoamento cisalhante no interior da cavidade: testar o funcionamento do método com um problema inicialmente simples;
- Adaptação do método de projeção para transformá-lo em segunda ordem tanto no espaço, quanto no tempo: demonstrar a importância do uso de uma malha de MAC ou "staggered grid" e como seu uso simplifica o código de programação;
- Comparação da eficiência do método de primeira ordem com o método de segunda: estudo do número de iterações necessárias para a convergência;
- Estudo da ordem dos métodos de projeção já programados: comparação com os resultados obtidos por Brown, Cortez e Minion (2001) e Ghia, Ghia e Shin (1982);

Dando continuidade ao último relatório, o trabalho deste semestre tem como metas:

- Implementar no programa já existente a Equação da Energia e as aproximações de Boussinesq: início do fenômeno de convecção natural, simulação do escoamento gerado por forças de empuxo que surgem devido ao gradiente de temperatura;
- Validar os resultados gerados para diferentes números de Rayleigh comparando-se os campos de temperatura, linhas de corrente e número de Nusselt com aqueles do trabalho de Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994);
- Transformar o fluido uniforme em multifásico utilizando o método de Level Set: simulação de uma única gota no meio do escoamento;
- Variando-se a razão de viscosidade entre o interior e exterior da interface e o número de capilaridade, estudar o comportamento de diferentes tipos de gota quando carregadas pela convecção do fluido ao redor;

- Determinar o efeito da presença dessas gotas nos fenômenos de troca de calor: comparar os números de Nusselt para a cavidade com emulsão com aqueles para a cavidade preenchida totalmente por um fluido uniforme.

1.4 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

1.4.1 Emulsões

Formadas pela dispersão de duas fases, uma aquosa (polar) e outra oleosa (apolar), praticamente imiscíveis entre si, as emulsões podem ser classificadas, de acordo com a hidrofilia ou lipofilia da fase dispersante, como misturas de óleo em água (O/A) ou água em óleo (A/O) (PINHO; STORPIRTIS, 1998). Se tratando de sistemas normalmente altamente instáveis, que perdem muito facilmente suas propriedades físico-químicas, o desenvolvimento tecnológico e a pesquisa vêm buscando cada vez mais desenvolver meios que possam retardar pelo maior tempo possível a separação das suas fases (OLIVEIRA et al., 2004).



Figura 1.1 – Mistura bifásica de água e óleo.

Normalmente, ao se misturar duas substâncias de polaridades diferentes, elas tendem a se separar uma da outra; a mais densa decanta e vai para o fundo do recipiente, enquanto a mais leve sobe para a superfície; formando, assim, duas fases uniformes e claramente distintas. Nesse caso, a combinação pode ser misturada e agitada, se tornar monofásica em alguns momentos, mas ela ainda será uma emulsão instável (Fig.1.1). Porém, por vezes, ao se adicionar à mistura um agente emulsivo, também conhecido como tensoativo ou surfactante, é possível garantir a formação de uma mistura aparentemente homogênea a olho nu, mas que é, na realidade, formada por uma grande quantidade de microbolhas espalhadas numa fase dispersa, como na Fig.(1.2). Desse modo, a mistura instável se torna estável.

O emulsificante é constituído por moléculas que possuem, ao mesmo tempo, um lado lipofílico e um lado hidrofílico. Quando entra em contato com a mistura bifásica, o

lado hidrofílico se associa à fase polar e o lipofílico à apolar, criando uma espécie de filme que diminui as tensões interfaciais separando ambos os líquidos. Dessa maneira, torna-se possível a formação dessas bolhas, que têm sua estabilidade garantida por uma película rígida e compacta, que possui um certo grau de elasticidade superficial e não se rompe quando pressionada pelas gotículas (PRISTA, 1995).

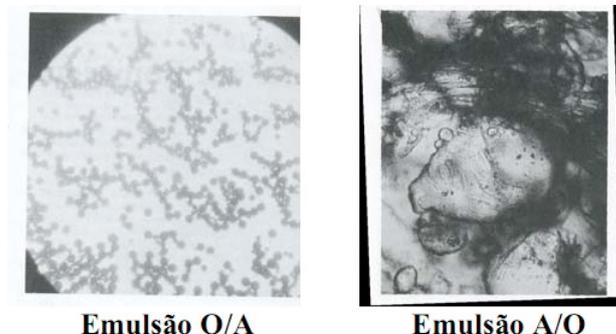


Figura 1.2 – Microemulsão de água em óleo e óleo em água.

1.4.2 Convecção Natural

Falando um pouco do processo de convecção em geral, principalmente dos fenômenos que envolvem a convecção natural, Bejan (2013) destaca sua extrema importância quando diz que a Termodinâmica da convecção natural ilustra com incrível simplicidade e pureza o princípio que governa todos os movimentos na natureza, sejam eles animados ou inanimados. Em seu livro, ele compara o processo de convecção natural no interior de uma cavidade à geração de energia em um motor e estende ainda essa comparação ao nosso próprio planeta Terra, alegando que vivemos em uma "máquina gigante" (Fig.1.3) que absorve a energia gerada pelo Sol e por todos os seres que nela habitam, rejeitando parte dessa energia para o Espaço ao redor (dado que nenhuma máquina possui uma eficiência perfeita).

O estudo da convecção natural em um ambiente totalmente confinado, também de extrema importância para diversos ramos da ciência (geofísica, astrofísica, construção civil, etc.), já foi extensivamente estudado tanto analítica- quanto numérica- e experimentalmente. Os trabalhos de Ostrach (1988) e Patterson e Imberger (1980) fazem uma boa revisão de todos os outros estudos mais antigos realizados até então.

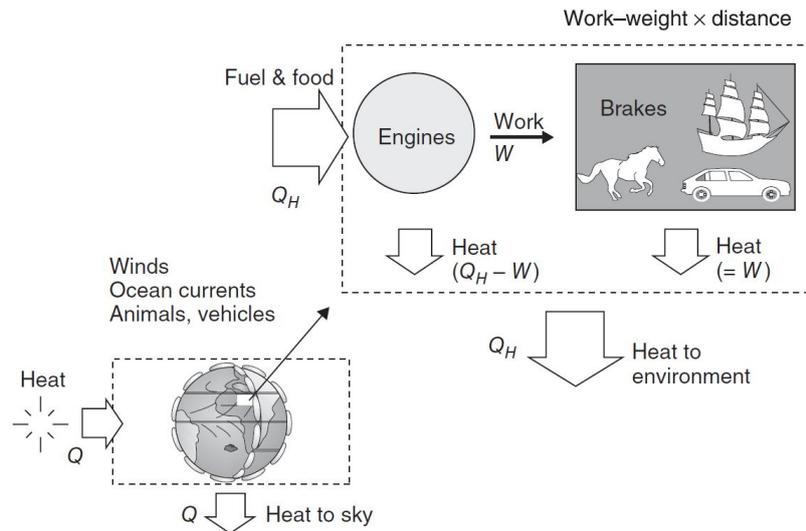


Figura 1.3 – A máquina planeta Terra, composta por inúmeras máquinas menores. (BEJAN, 2013)

Segundo Ostrach, o primeiro a investigar a convecção natural no interior da cavidade foi Lewis (1950), que analisou a transferência de calor em materiais de isolamento do tipo "espuma", formado por células cheias de ar dispersas ao longo de um material sólido. Neste caso, a convecção se passa no interior dessas pequenas células. Em seguida, veio o trabalho de Batchelor (1954), que serviu de inspiração para todos os modelos que vieram a seguir.

Batchelor estudou a transferência de calor em um gás, confinado em uma cavidade retangular de altura l e espessura d , suficientemente larga na outra direção de forma a tornar o problema essencialmente bidimensional, Fig.(1.4). As paredes laterais estão em temperaturas constantes, enquanto as paredes horizontais são perfeitamente isoladas. Sua pesquisa analisou os resultados obtidos para diferentes razões de aspecto $\frac{l}{d}$ e diferentes números de Rayleigh. Ele conclui, assim, que a solução do seu problema depende de três variáveis independentes e adimensionais (GILL, 1966):

- A razão de aspecto l/d , associada exclusivamente à geometria do sistema;
- O número de Prandtl, que é uma propriedade do fluido;
- E o número de Rayleigh, que envolve a diferença de temperatura imposta entre as paredes da cavidade.

O autor chega ainda à conclusão que, para pequenos valores de Rayleigh, ou seja, para pequenas diferenças de temperatura, e para pequenas espessuras d ; a transferência de calor se dá majoritariamente por condução. Neste ponto, ele demonstrou estar certo, como mais tarde confirmado experimentalmente por Elder (1965). Para altos valores de Rayleigh, Batchelor nota que existe a formação de camadas limites adjacentes às paredes

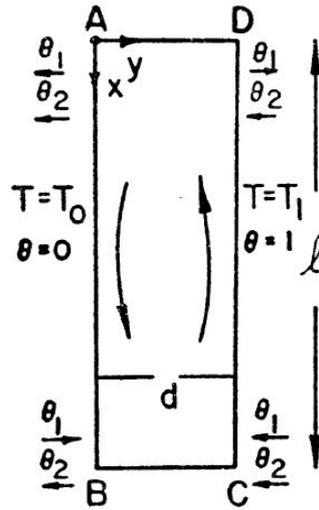


Figura 1.4 – Modelo de cavidade retangular utilizado por Batchelor. (BATCHELOR, 1954)

da cavidade e que essas camadas delimitam uma região de "core", ou núcleo, no meio dela, onde o escoamento possui vorticidade e temperatura constantes. Aqui, estudos posteriores, como apontado por Gill (1966), esclarecem que, na realidade, a temperatura na região do núcleo possui um gradiente vertical constante, ou seja, ela varia com a altura no interior confinamento.

Como descrito por Patterson e Imberger (1980), após Batchelor, algum progresso analítico do problema foi obtido de forma similar por Gill, resultados experimentais foram alcançados por Eckert e Carlson (1961) e resultados numéricos por Davis (1986); todos estes últimos focando a sua análise em razões de aspecto de valor maior ou igual a um. Casos para pequenas razões de aspecto ($\frac{l}{d} < 1$) não foram detalhadamente estudadas até Cormack, Leal e Imberger (1974) e Cormack, Leal e Seinfeld (1974) analisarem o problema de forma analítica e numérica, respectivamente.

Fazendo-se uma comparação dos três estudos analíticos disponíveis, diferenças fundamentais são encontradas entre os trabalhos. Batchelor foca seu trabalho nos baixos números de Rayleigh, que geram uma troca de calor dominada por condução. Gill, por outro lado, fixa a razão de aspecto e um alto número de Rayleigh para obter uma escoamento dominado pelo fenômeno de convecção. Por último, Cormack, Leal e Imberger determinaram que, para um número fixo de Rayleigh e uma razão de aspecto bem baixa, a condução volta a ser o modo dominante de trocas de calor.

O trabalho de Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994) envolveu a simulação da convecção natural no interior da cavidade quadrada para números de Rayleigh variando de 10^3 até 10^{10} . A partir de $Ra = 10^6$ o escoamento se torna turbulento e um modelo $k - \epsilon$ é usado para modelar a turbulência. Os resultados, tanto para o regime laminar quanto para o regime turbulento, são comparados com estudos numéricos e experimentais disponíveis na literatura.

Por fim, o próprio artigo de Patterson e Imberger (1980) realiza uma análise levemente diferente das anteriormente mencionadas e bastante parecida com a deste trabalho. Eles conseguem obter uma série de resultados numéricos para uma razão de aspecto unitária (cavidade quadrada) usando o esquema de diferenças finitas proposto por Chorin (1968) (ou método de projeção).

1.4.3 A Gota na Cavidade

Apesar do comportamento de uma gota, ou interface, submetida especificamente a um escoamento de convecção natural no interior de uma cavidade fechada ainda não ter sido numericamente estudado, existem outros estudos recentes e similares, disponíveis na literatura, que mostram a relevância de se analisar esse tipo de fenômeno.

O trabalho de Zhang, Miksis e Bankoff (2006), por exemplo, realiza uma análise numérica bidimensional da dinâmica de uma gota que desliza sobre a parede inferior de um canal retangular, quando submetida a um escoamento cisalhante. Variando o número de Reynolds (regime do escoamento do fluido ao redor da gota), o número de capilaridade (que avalia o grau de “rigidez” da interface), a razão de viscosidade e densidade são gerados casos em que a gota apresenta instabilidades na sua interface, casos em que ela se separa da parede da cavidade e segue o escoamento e outros em que ela apenas desliza sobre a parede, quase sem se deformar.

Já Romanò e Kuhlmann, inspirados por fenômenos que envolvem a interação entre duas fases fluidas (um fluido e uma fase particulada) como tempestades de areia e transporte de cinzas vulcânicas, têm uma série de artigos desenvolvendo um estudo numérico (artigos Romanò e Kuhlmann (2016) e Romanò e Kuhlmann (2017)) e experimental, Romanò et al. (2017), da interação entre uma partícula de tamanho finito e a parede da cavidade cuja tampa se move tangencialmente à superfície do fluido em seu interior (escoamento também cisalhante).

Bassano (2003), por sua vez, usou a técnica do level set para simular o movimento de migração termo-solutal-capilar de uma gota líquida que é injetada dentro de uma cavidade fechada com paredes superior e inferior diferencialmente aquecidas e paredes laterais termicamente isoladas, preenchida por um outro fluido com diferentes (porém similares) propriedades físicas e concentração. Seu objetivo era determinar como esse movimento, para diferentes gotas e números de Reynolds, é afetado pelo processo de dissolução. Os resultados foram usados na preparação de uma experiência em um foguete espacial e, por esse motivo, os efeitos das forças de empuxo devido a mudanças de densidade foram inicialmente desconsiderados.

Dada a atualidade desses estudos, essa área da mecânica dos fluidos ainda pode ser muito explorada, principalmente como é feito neste trabalho: aliada com outras áreas da engenharia, como a transferência de calor. Os resultados aqui obtidos servirão apenas

como uma base, abrindo um leque de novas possibilidades para levá-lo adiante.

1.5 REVISÃO DE CONCEITOS

1.5.1 Números Adimensionais

Ao longo deste trabalho serão citados alguns números adimensionais que são chave para análise dos fenômenos em estudo. Dessa forma, é importante definir o significado físico e a forma que cada um deles é calculado.

Na mecânica dos fluidos, o regime de um escoamento, que pode ser laminar ou turbulento, é definido pelo chamado número de Reynolds (Re). Ele pode ser entendido como um indicador da relação entre as forças viscosas e forças de inércia existentes entre as moléculas desse fluido. Matematicamente é definido como:

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \quad (1.1)$$

Sendo ρ a massa específica do fluido, u sua velocidade média, L um comprimento característico e μ sua viscosidade dinâmica. Normalmente, quando o valor desse número está abaixo do que chamamos de Reynolds crítico (associado ao tipo de fluido e à geometria do escoamento) o escoamento é de regime laminar. Acima desse valor, ele transita gradualmente para um regime turbulento.

O número de Prandtl, por sua vez, fornece a relação entre difusão de quantidade de movimento (associada à viscosidade cinemática ν) e difusividade de calor, ou térmica (α), no interior do escoamento. É calculado como:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (1.2)$$

Quando seu valor é muito maior que 1, sabe-se que o campo de velocidades se desenvolve muito mais rapidamente do que o campo de temperaturas, como acontece para óleos viscosos, por exemplo. Analogamente, quando ele é muito menor do que um, tem-se um campo de temperatura que cresce de forma rápida, caso dos metais líquidos. E, por fim, quando seu valor é próximo de unitário, o fluido apresenta um campo de velocidades se desenvolvendo mais ou menos no mesmo ritmo do de temperatura.

Em um escoamento que envolve trocas de calor, é importante se determinar o seu número de Rayleigh. Para cada tipo de fluido existe um Rayleigh crítico, de forma similar a um Reynolds crítico, abaixo do qual as trocas de calor se dão majoritariamente por condução e acima do qual o fenômeno se transforma em convecção. Geralmente, um valor de Rayleigh acima de 1000 já garante trocas de calor na forma convectiva. Sua fórmula é

dada por:

$$Ra = \frac{g\beta(T - T_\infty)L^3}{\nu\alpha} \quad (1.3)$$

Onde g é o módulo da aceleração da gravidade, β o coeficiente de expansão volumétrica do fluido, T a temperatura da parede adjacente a ele e T_∞ a temperatura do fluido fora da camada limite térmica. Para a cavidade fechada, $(T - T_\infty)$ é a diferença de temperatura entre as duas paredes que não são termicamente isoladas.

É citado ainda o número de Nusselt (Nu), uma grandeza que está associada ao número de Reynolds e ao número de Prandtl e relaciona a quantidade de calor transferida por convecção e aquela transferida por condução no interior de um escoamento qualquer. Na maior parte dos casos, pode ser obtido com a fórmula:

$$Nu = \frac{hL}{k} \quad (1.4)$$

Sendo h o coeficiente de transferência de calor por convecção e k a condutividade térmica do fluido. É fácil perceber que quanto maior o Nu , mais convectivo é o regime de troca de calor.

Por último, para se estudar o escoamento da mistura bifásica, temos um parâmetro que representa o efeito relativo entre a viscosidade (forças viscosas) e a tensão superficial que atua através de uma interface (gota e fase contínua), o número de capilaridade (Ca), normalmente calculado como:

$$Ca = \frac{U_c\mu}{\sigma} \quad (1.5)$$

Onde σ é a tensão superficial e U_c uma velocidade característica. Na segunda parte deste trabalho, porém, buscou-se reescrever essa velocidade característica em termos de parâmetros que envolvam a temperatura na cavidade, já que o escoamento convectivo é gerado por uma diferença de temperatura entre duas paredes, e não pelo movimento de uma delas. Representando U_c por:

$$U_c = \frac{\alpha a}{L^2} \quad (1.6)$$

Sendo a o raio da gota. Teremos, assim, o número de capilaridade obtido com a Eq.(1.7):

$$Ca = \frac{\alpha a\mu}{L^2\sigma} \quad (1.7)$$

1.5.2 Vorticidade e Linhas de Corrente

Para se entender melhor os resultados que serão apresentados ao final do relatório, é apresentada uma pequena revisão dos conceitos de vorticidade e linha de corrente de um escoamento.

A vorticidade, indicada por ω , é a grandeza que quantifica a rotação das partículas de um fluido. É o campo vetorial formado pelo rotacional do campo de velocidades, ou seja:

$$\omega = \nabla \times \mathbf{u} \quad (1.8)$$

Dessa maneira, linhas de vorticidade são curvas ao longo das quais o valor da vorticidade é constante. Linhas de corrente, por sua vez, são curvas que, para cada instante de tempo, são tangentes à velocidade do fluxo. Normalmente, em um escoamento, tem-se uma família de linhas de correntes, como exemplificado na Fig.(1.5):

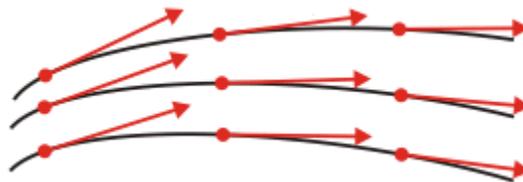


Figura 1.5 – Linhas de corrente tangentes aos vetores velocidade.

1.5.3 Tensão Superficial

Ao se tratar de interfaces que separam duas substâncias, normalmente líquidas ou gasosas, novos tipos de forças, que são consequência de interações intermoleculares, costumam surgir na análise matemática do problema. Em uma interface esférica, como a representada na Fig.(1.6), nota-se que cada uma das moléculas em seu interior é atraída por forças de outras moléculas em todo seu redor, enquanto as moléculas na superfície são atraídas apenas por forças no sentido do interior do líquido.

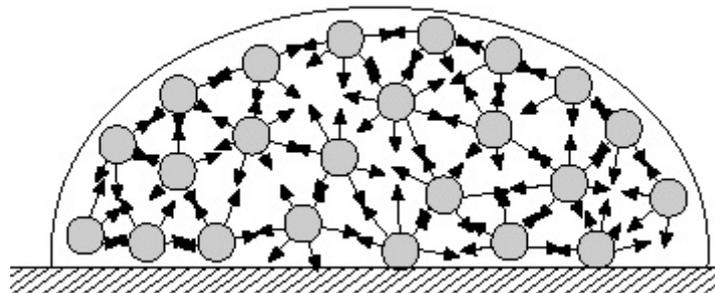


Figura 1.6 – Forças intermoleculares no interior de uma gota.

Assim, percebe-se que, sobre as moléculas que não estão na superfície, a força resultante tem valor nulo, enquanto, sobre aquelas que estão, surge uma resultante não nula que aponta para dentro da gota. Com isso, as moléculas da superfície são atraídas pro interior e são instantaneamente substituídas por outras, que sofrerão o mesmo efeito. E, assim, esse ciclo infinito se repete.

Se o sistema não reagisse de nenhuma forma, toda gota do universo tenderia a se contrair o máximo possível, conforme as moléculas se deslocassem mais e mais para dentro da interface, assumindo o que chamamos de estado de área mínima de superfície (normalmente esférico). Porém, energia (conhecida como energia livre de superfície) é fornecida ao sistema na forma de um trabalho infinitesimal por unidade de área, que busca constantemente aumentar sua área superficial. Tal energia pode ser interpretada ainda como uma força de contração por unidade de comprimento, exercida pela superfície e que atua tangencialmente a ela.

Com isso, surge uma tensão, existente apenas na região da interface, que garante à mesma uma característica elástica. A essa propriedade física dá-se o nome de tensão superficial, representada pela letra σ .

Definida a tensão superficial, partimos para o uso e explicação de uma equação básica para o estudo de gotas e interfaces, a equação de Young-Laplace. Para uma gota bidimensional imersa em um fluido, é possível provar que:

$$p_g - p = \frac{2\sigma}{a} \quad (1.9)$$

Onde p_g é a pressão no interior da interface e p a pressão do fluido ao seu redor. Essa lei garante que a pressão dentro da interface é sempre maior que no exterior e que essa diferença de pressão aumenta quando o raio da gota diminui. Ela será usada mais adiante, complementando a equação do movimento do escoamento, para representar o impacto da presença da interface no fluido.

2 METODOLOGIA

2.1 MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS

A obtenção da solução numérica dos problemas que envolvem mecânica dos fluidos depende da criação de uma malha, normalmente bi- ou tridimensional, que é discretizada em diferentes intervalos para cada uma das direções x , y e z . Definida uma origem, cada um de seus pontos pode ser localizado por meio do fornecimento de uma, duas ou três coordenadas e, dado um conjunto dessas coordenadas, o ponto a que elas se referem será sempre único (FERZIGER; PERIC, 2002). Uma das ferramentas mais utilizadas para representação de equações diferenciais neste tipo de domínio é o método das diferenças finitas. Na Fig.(2.1), um exemplo de malha bidimensional para análise de diferenças finitas.

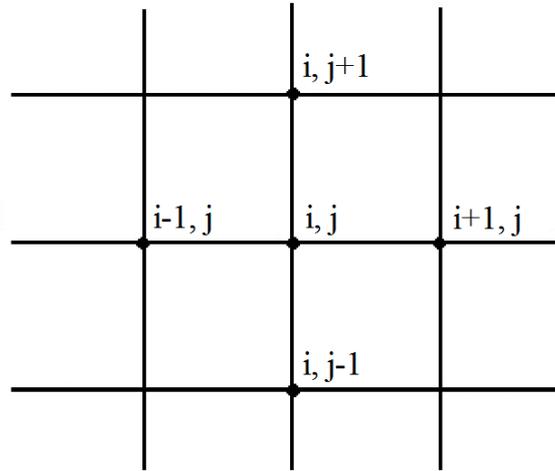


Figura 2.1 – Malha cartesiana utilizada em análises de diferenças finitas para casos 2D.

Ele consiste em representar as derivadas em um ponto específico (seja ela de primeira, segunda ou terceira ordem) por uma aproximação por série de Taylor, envolvendo outros pontos à sua volta e a distância relativa entre eles. Dada uma função u contínua e diferenciável, ela pode ser expandida da seguinte maneira:

$$u(x) = u(x_i) + (x - x_i) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(x - x_i)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \dots + \frac{(x - x_i)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i + H \quad (2.1)$$

H representando os "termos de maior ordem". Reescrevendo a Eq.(2.1), a primeira

derivada de u em relação a x no ponto x_i será dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u(x) - u(x_i)}{(x - x_i)} - \frac{(x - x_i)}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \dots - \frac{(x - x_i)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i + H \quad (2.2)$$

Ou ainda de forma mais simplificada:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u(x) - u(x_i)}{(x - x_i)} + O(h) \quad (2.3)$$

Sendo h a distância na malha entre dois pontos consecutivos e $O(h)$ o erro de truncamento associado à expansão. Neste caso, a aproximação será dita de primeira ordem, porque o erro de truncamento é de ordem um e ele escala linearmente com o espaçamento da malha (h).

A partir do ponto x_i , é possível reescrever a aproximação, escolhendo-se pontos a frente, atrás ou pontos ao mesmo tempo à frente e atrás do mesmo. A esses métodos dá-se o nome de aproximação por diferenças à frente (forward difference), aproximação por diferenças atrás (backward difference) e aproximação por diferenças centrada (centered difference), respectivamente. Sendo representadas por:

- Forward difference:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} + O(h) \quad (2.4)$$

- Backward difference:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + O(h) \quad (2.5)$$

- Centered difference:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + O(h^2) \quad (2.6)$$

As Equações (2.4) e (2.5) representam esquemas de primeira ordem. Combinando-se as equações da expansão por série de Taylor de cada uma delas, chega-se à aproximação centrada, dada pela Eq.(2.6), de segunda ordem. Ou seja, resultados obtidos usando-se aproximações desse tipo tendem a convergir mais rapidamente, ao passo que o erro de truncamento escala com o quadrado do espaçamento da malha e é mais facilmente diminuído. Para uma malha quadrada, por exemplo, diminuindo-se h pela metade, o erro de truncamento diminui da ordem de 2^2 .

Usando a mesma lógica da expansão por série de Taylor para a primeira derivada, pode-se obter as aproximações para derivadas de ordem 2. Neste trabalho, utilizou-se apenas aproximações centradas para a segunda derivada. Considerando-se ainda que o espaçamento h é constante, tem-se:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + O(h^2) \quad (2.7)$$

Por último, é importante também introduzir aqui o conceito de stencil, que será frequentemente citado ao longo do trabalho. Durante a resolução numérica, diferentes pontos são "visitados" pelo programa. Como já visto, a estimativa das derivadas em um ponto envolve não apenas ele mesmo, mas também pontos que estão ao seu redor. Assim, o stencil de cinco pontos para um ponto genérico (i, j) terá a forma dada pela Fig. (2.2) abaixo:

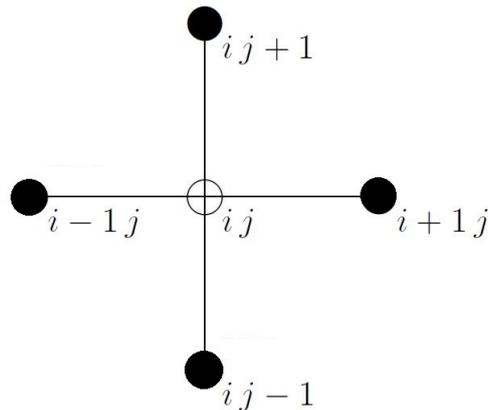


Figura 2.2 – Stencil de cinco pontos utilizado nas equações de diferenças finitas.

O tipo do stencil, ou seja, o número de pontos a ele associado, está diretamente relacionado com a formação das matrizes que compõem o sistema linear dado pelas equações governantes do problema. Ele é quem define a operação vetor vezes matriz em variáveis de malha. Neste trabalho, optou-se pela programação dos métodos numéricos que serão utilizados para resolver o sistema, ao invés de se usar ferramentas prontas obtidas na internet. Com esse programa próprio, o uso do stencil e o método de diferenças finitas, a solução das equações na malha é feita por etapas, partindo-se sucessivamente de um ponto a outro. Dessa forma, a convergência dos resultados é muito mais rápida do que quando se utilizam programas prontos que resolvem o sistema inteiro (olhando para as matrizes como um todo) de uma vez.

Neste projeto, foram criados algoritmos básicos para reproduzir operações que são usadas com muita frequência em variáveis de malha, como a multiplicação de uma matriz por um vetor ou de um vetor por outro vetor. Por exemplo, produto vv de um vetor \mathbf{v}_1 vezes um vetor \mathbf{v}_2 , em um ponto genérico (i, j) de uma malha nx (número de pontos no eixo x) por ny (número de pontos no eixo y) é representado por:

$$vv = vv + v_1(i, j)v_2(i, j) \quad (2.8)$$

Com i variando de 1 até nx , j variando de 1 até ny e vv sendo inicialmente igual

a zero. Analogamente, para o produto $\mathbf{M}\mathbf{v}$ de uma matriz \mathbf{M} por um vetor \mathbf{v} , tem-se:

$$Mv(i, j) = a(i, j)v(i-1, j) + b(i, j)v(i, j-1) + c(i, j)v(i, j) + d(i, j)v(i+1, j) + e(i, j)v(i, j+1) \quad (2.9)$$

Sendo a, b, c, d, e os coeficientes da matriz M . Nota-se que, para realizar este produto para o vetor v em um ponto (i, j) , são utilizados todos os cinco pontos do seu stencil.

2.2 MÉTODO DE PROJEÇÃO: NAVIER-STOKES

Para simular o comportamento de um fluido incompressível e uniforme no interior da cavidade, de forma genérica, é necessário primeiramente encontrar a solução da equação adimensional de Navier-Stokes como apresentada na Eq.(2.10), associada à Equação da Continuidade (Eq.2.11) e às devidas condições de contorno.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.11)$$

Sendo \mathbf{u} a velocidade do fluido, p o campo de pressão, Re o número de Reynolds e o formato da equação escrito em função das variáveis adimensionalizadas.

Resolvê-la tal como ela foi apresentada envolve um alto nível de dificuldade. O acoplamento das variáveis de velocidade e pressão em uma mesma equação geram sistemas muito difíceis de serem resolvidos numericamente e que, muitas vezes, não chegam nem a convergir. Tendo isso em vista, em 1968, Alexandre Joel Chorin (CHORIN, 1968) desenvolveu um método que desacopla as duas variáveis e torna a solução das equações da dinâmica dos fluidos muito mais simples e rápida. Ao seu método, deu-se o nome de Método de Projeção. Resumidamente, para o caso deste trabalho, ele consiste na execução dos seguintes passos:

1. Cálculo de um campo intermediário de velocidades \mathbf{u}^* por meio de uma equação livre de termos de pressão;
2. Cálculo do campo de pressão utilizando-se o campo de velocidades calculado em 1;
3. Correção do campo de velocidade com o uso do campo de pressão calculado em 2.

O sistema composto pelas Eqs. (2.10) e (2.11) pode ser escrito em termos de diferenças finitas como:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n - \nabla p^{n+1} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} \quad (2.12)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (2.13)$$

Neste trabalho, o método será implícito no tempo, ou seja, as variáveis (fora o termo convectivo) serão calculadas sempre no tempo presente ($n + 1$) e ele será incondicionalmente estável. Métodos explícitos, que utilizam as variáveis de tempos anteriores (n), exigem condições rígidas de estabilidade; normalmente, nesses casos, Δt deve ser muito menor que h^2 (o espaçamento da malha).

A Eq.(2.12) pode ser reescrita ainda na forma de um sistema de duas outras equações que, quando somadas, recuperam a original:

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} \quad (2.14)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla p^{n+1} \quad (2.15)$$

Aplicando-se o divergente em ambos os lados da Eq.(2.15), tem-se:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} \right) = -\nabla \cdot \nabla p^{n+1} \quad (2.16)$$

$$\frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} - \nabla \cdot \mathbf{u}^*) = -\nabla^2 p^{n+1} \quad (2.17)$$

Pela equação da continuidade (Eq.2.11), o divergente do termo da velocidade em ($n + 1$) é igual a zero, o que, finalmente, leva a:

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u}^*) \quad (2.18)$$

De posse dessas equações recém deduzidas, os passos do Método de Projeção podem ser redescritos como:

1. Determinar \mathbf{u}^* utilizando a Eq.(2.14);
2. Calcular a pressão em $n + 1$ por meio da Eq.(2.18);
3. Usando a Eq.(2.15), corrigir a velocidade em $n + 1$.

O procedimento e as equações anteriores levam a um método de primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço. Para o início das simulações, deseja-se transformá-lo num método de segunda ordem para todas as variáveis. Assim, devem ser feitos alguns

ajustes nas equações já obtidas. Utilizando o método de Weinan e Liu (2001) como referência, a Eq.(2.14) será reescrita como:

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{Re} \frac{(\nabla^2 \mathbf{u}^* + \nabla^2 \mathbf{u}^n)}{2} \quad (2.19)$$

A principal diferença do método de segunda ordem no tempo reside no fato de que as propriedades do escoamento não são avaliadas somente nos instantes n e $n + 1$, mas também em instantes intermediários $n + \frac{1}{2}$. O termo difusivo (termo do laplaciano), inicialmente avaliado no instante $n + 1$, passa a ser calculado como uma média dos seus valores nos instantes n e $n + 1$, ou seja, em $n + \frac{1}{2}$. O termo convectivo, antes avaliado em n , agora também é avaliado em $n + \frac{1}{2}$. No cálculo dessa componente do escoamento surge um pequeno problema: devido à presença do produto escalar e sua não linearidade, a propriedade em $n + \frac{1}{2}$ não pode ser calculada simplesmente pela média aritmética dos seus dois instantes vizinhos. Assim, Liu propõe o utilização da fórmula de Adams-Bashforth, que consiste em:

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2}(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n - \frac{1}{2}(\mathbf{u}^{n-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n-1} \quad (2.20)$$

Continuando o mesmo raciocínio, a Eq.(2.15) é reescrita como:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla p^{n+\frac{1}{2}} \quad (2.21)$$

E a Eq.(2.18) se torna:

$$\nabla^2 p^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u}^*) \quad (2.22)$$

Depois disso, o método se desenrola com os mesmos três passos dados para utilização do método de primeira ordem.

Já se sabe há algum tempo que, sua precisão, e até sua convergência, podem ser perdidas se alguns cuidados não forem tomados quando da simulação de casos totalmente discretos (no tempo e também no espaço). Também é sabido que a máxima precisão é mantida quando a discretização espacial é feita no chamado "staggered grid", ou na malha de MAC (Fig.2.3), como também é conhecida (WEINAN; LIU, 2001).

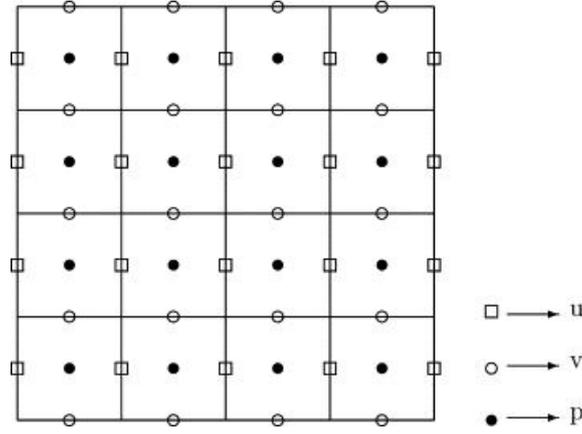


Figura 2.3 – Staggered grid ou malha de MAC. (KAZUFUMI; ZHONGHUA, 2008)

Nota-se que, aqui, os nós para a velocidade do fluido em x , em y e para a pressão não se encontram em um mesmo lugar na célula. Enquanto os pontos da pressão estão localizados bem no meio dela, os pontos da componente x da velocidade (u) estão nas laterais e os pontos da componente y (v) nas faces inferior e superior. E é exatamente assim que criaremos a discretização para a cavidade do nosso problema.

Utilizando esse método de segunda ordem e uma malha de MAC, foi possível realizar a primeira simulação. Foi analisado o comportamento de um fluido incompressível que se move no interior da cavidade devido ao movimento da sua parede superior. Alterando-se as condições de contorno, adicionando-se uma velocidade u nessa parede e mantendo os gradientes de pressão nulos nas demais, tem-se o problema do "shear driven cavity flow" ou escoamento cisalhante. Esse caso foi estudado na primeira parte desse trabalho, como meio de validação do funcionamento do método de projeção. Os resultados obtidos para os campos de velocidade, vorticidade e linhas de corrente foram comparados com os de Ghia, Ghia e Shin (1982).

Na segunda etapa e subsequente simulação, o fluido, que era inicialmente uniforme, torna-se bifásico pela presença de uma gota no meio dele e se movimenta agora devido a um gradiente de temperatura, não mais devido ao movimento da tampa da cavidade. Sua viscosidade não é mais constante em todo o domínio, mas diferente no interior (fase dispersa) e no exterior (fase contínua) da interface ali existente. Dessa maneira, a equação adimensionalizada de Navier-Stokes mostrada anteriormente assume uma nova forma (ainda incompleta) que será melhor desenvolvida e explicada nas próximas seções:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p + Pr \nabla \cdot (\lambda (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \mathbf{F}_c \quad (2.23)$$

\mathbf{F}_c é a força de contato que aparece devido à tensão superficial na interface e λ é a razão de viscosidade entre o interior e exterior da mesma. Como a viscosidade do fluido não é mais constante em todo o domínio, o termo λ não pode ser retirado da operação do divergente de $\nabla \mathbf{u}$. Percebe-se, também, que o regime do escoamento não é mais regido

pelo número de Reynolds, mas sim pelo número de Prandtl (e pelo número de Rayleigh, que aparecerá mais para frente, após as considerações da Equação da Energia).

A partir deste ponto, a discretização das equações do método de projeção foi feita de maneira diferente. Utilizando o método proposto por Salac e Miksis (2012), a discretização temporal é feita agora com uma aproximação de segunda ordem de diferenças para trás (backward difference) e as variáveis do lado esquerdo da equação são avaliadas em um novo ponto, uma extrapolação para \mathbf{u}^{n+1} chamado de $\hat{\mathbf{u}}$. É forçado o aparecimento de um termo difusivo função de \mathbf{u}^* que garante uma simetria ao sistema linear a ser resolvido do lado esquerdo da equação e um termo difusivo função de $\hat{\mathbf{u}}$ que ajuda na estabilidade do método numérico. A Eq.(2.19) para \mathbf{u}^* fica sendo então:

$$\frac{3\mathbf{u}^* - 4\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} = -\hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} + Pr \nabla \cdot (\lambda(\nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T)) + Pr \bar{\lambda} \nabla^2 \mathbf{u}^* - Pr \bar{\lambda} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{F}_c \quad (2.24)$$

Podendo ser escrita de maneira simplificada como:

$$\frac{3\mathbf{u}^* - 4\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} = Pr \bar{\lambda} \nabla^2 \mathbf{u}^* + G(\hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{F}_c \quad (2.25)$$

Onde:

$$G(\hat{\mathbf{u}}) = -\hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} - Pr \bar{\lambda} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} + Pr \nabla \cdot (\lambda(\nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T)) \quad (2.26)$$

Sendo $\hat{\mathbf{u}}$ e $\bar{\lambda}$ calculados por meio das equações:

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^n + \text{minmod}(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{u}^{n-1} - \mathbf{u}^{n-2}) \quad (2.27)$$

$$\bar{\lambda} = \text{max}(1, \lambda) \quad (2.28)$$

E a função $\text{minmod}(x, y)$ computada como:

$$\text{minmod}(x, y) = \begin{cases} 0, & xy < 0 \\ x, & |x| < |y| \\ y, & |y| < |x| \end{cases} \quad (2.29)$$

Usando o mesmo raciocínio apresentado para as outras formas do método de projeção, a equação para cálculo do campo de pressão se torna:

$$\nabla^2 p^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u}^*) \quad (2.30)$$

E a equação para atualização do campo de velocidades:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{2\Delta t}{3} \nabla p^{n+1} \quad (2.31)$$

No final, a simulação do escoamento de um fluido com uma gota em seu interior se resume em resolver as Eqs.(2.24), (2.30) e (2.31), nessa ordem, associadas às respectivas condições de contorno.

2.3 EQUAÇÃO DA ENERGIA

Considerando-se apenas as últimas equações apresentadas no método de projeção, nenhuma troca de calor está sendo levada em conta na simulação. Com a introdução da chamada Equação da Energia, as trocas de energia entre o fluido e o meio em que ele se encontra se tornarão parte integrante da análise e influenciarão fortemente os resultados obtidos. Conhecido o perfil de velocidades, obtém-se, também, em função das temperaturas das paredes da cavidade, a distribuição de temperatura no escoamento.

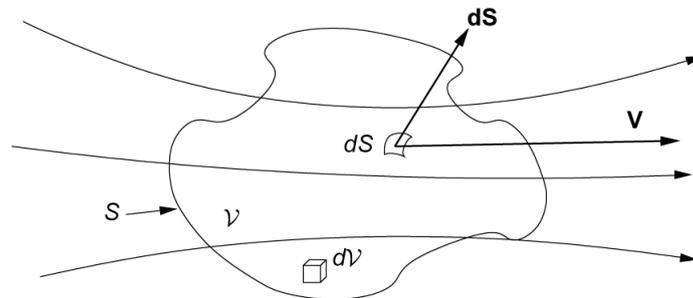


Figura 2.4 – Volume de controle fixo no espaço.

Para um volume de controle genérico, como o dado pela Fig.(2.4), considera-se que energia não se cria, nem se destrói: ideia do princípio da conservação da energia. Isto é, a variação de energia dentro do volume de controle deve ser igual à quantidade de energia que entra, menos a que sai. Dado que ela só pode ser transferida na forma de calor, trabalho, ou massa e que, nesse caso, a massa do volume de controle mantém-se constante, tem-se:

$$\frac{dE}{dt} = \dot{Q} + \dot{W} \quad (2.32)$$

Ou seja, a variação total de energia interna no interior do volume de controle será igual à variação líquida da quantidade de calor por ele trocado mais a quantidade de trabalho exercida sobre o sistema (ou menos essa quantidade, caso o trabalho seja exercido por ele). Abrindo mais um pouco a Eq.(2.32):

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \left(\frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + e_i \right) dV = - \int_S (\mathbf{q}'' \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS + \int_V (\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}) dV + \int_S (\mathbf{f} \cdot \mathbf{u}) dS \quad (2.33)$$

Colocando em palavras, podemos dizer que: a variação no tempo da energia cinética e da energia interna no interior do volume de controle é igual à soma das parcelas de calor

(\mathbf{q}'') que atravessam sua superfície, com o trabalho realizado pelas forças de campo (\mathbf{g}) no volume todo, mais o trabalho realizado pelas forças de superfície (\mathbf{f}). Aplicando-se o Teorema da Divergência e reescrevendo o vetor das forças de superfície em função do tensor de tensões ($\boldsymbol{\sigma}$):

$$\int_{V(t)} \rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + e_i \right) dV = - \int_V (\nabla \cdot \mathbf{q}'') dV + \int_V (\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}) dV + \int_V \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV \quad (2.34)$$

Aplicando o Teorema da Localização e considerando-se a troca de calor como dada somente por condução entre as moléculas, tem-se:

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + e_i \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (2.35)$$

Agora, aplica-se a identidade:

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} \quad (2.36)$$

Para finalmente chegar a:

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + e_i \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} \quad (2.37)$$

Utilizando-se o Princípio de Conservação da Energia Mecânica:

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right) = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \quad (2.38)$$

Faz-se (2.37) menos (2.38) para resultar em:

$$\rho \frac{de_i}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} \quad (2.39)$$

Decompondo o tensor de tensões como a soma de um tensor de forças normais (função do campo de pressão) com um tensor de forças cisalhantes (função da viscosidade dinâmica e da velocidade) e reescrevendo o gradiente de \mathbf{u} na forma da soma do tensor simétrico \mathbf{D} (associado à taxa de deformação de um elemento fluido) com o anti-simétrico \mathbf{W} (associado à vorticidade do escoamento):

$$\rho \frac{de_i}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + (\mathbf{PI} + 2\mu \mathbf{D}) : (\mathbf{D} + \mathbf{W}) \quad (2.40)$$

Fazendo o produto distributivo e desconsiderando o tensor vorticidade:

$$\rho \frac{de_i}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + ((\mathbf{PI} : \mathbf{D}) + (2\mu \mathbf{D} : \mathbf{D})) \quad (2.41)$$

$$\rho \frac{de_i}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + (\nabla \cdot \mathbf{u} + (2\mu \mathbf{D} : \mathbf{D})) \quad (2.42)$$

O divergente do campo de velocidades é igual a zero (fluido incompressível) e, pela baixa magnitude da sua ordem, o termo associado às dissipações viscosas ($2\mu \mathbf{D} : \mathbf{D}$) será desconsiderado. Desse modo, levando em conta, ainda, que a energia interna pode ser reescrita como uma constante multiplicada pela temperatura, tem-se a forma final da Equação da Energia, dada por:

$$\frac{dT}{dt} = \alpha \nabla^2 T \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T \quad (2.44)$$

Sendo α a difusividade térmica do fluido, calculada como $\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$. De maneira mais simplificada, pode-se escrever:

$$\frac{DT}{Dt} = \alpha \nabla^2 T \quad (2.45)$$

2.4 APROXIMAÇÃO DE BOUSSINESQ

Para o estudo do fenômeno da convecção, as variações de massa específica do fluido devido às variações de temperatura devem ser obrigatoriamente levadas em conta. Assim, as equações governantes do escoamento (Navier-Stokes) precisam ser reescritas, de forma a incluir forças de empuxo (que são a essência do fenômeno da convecção natural) geradas por tais variações.

Escoamentos nos quais as variações de viscosidade e massa específica não podem ser ignoradas são extremamente difíceis de se analisar (TRITTON, 1988). Numa tentativa de simplificar a resolução das equações de NS para fluidos compressíveis, Joseph Valentin Boussinesq (1842–1929) desenvolveu uma teoria que pode ser perfeitamente aplicada para casos em que a variação relativa de massa específica, devida ao campo de temperatura, é suficientemente pequena e nos quais todas as outras propriedades são mantidas constantes. Ou seja:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} \ll 1 \quad (2.46)$$

Sendo ρ_0 a massa específica de referência escolhida em um ponto típico do escoamento.

Outro princípio básico das aproximações de Boussinesq é o de que tais variações de massa específica não têm nenhum outro efeito além de gerar o surgimento de uma força gravitacional \mathbf{F} (TRITTON, 1988), que será dada por:

$$\mathbf{F} = \rho \mathbf{g} \quad (2.47)$$

Onde ρ é a massa específica num dado ponto do escoamento, definida como a soma da massa específica de referência mais suas variações:

$$\rho = \rho_0 + \Delta\rho \quad (2.48)$$

Como todas as acelerações do escoamentos são muito menores quando comparadas com o módulo de \mathbf{g} a dependência de ρ em relação a T pode ser linearizada:

$$\Delta\rho = -\beta\rho_0(T - T_\infty) \quad (2.49)$$

Sendo T_∞ a temperatura de referência (igual à temperatura da parede mais fria no caso da convecção natural) e β o coeficiente de expansão volumétrica do fluido. Então, utilizando as Eqs. (2.48) e (2.49), a equação de NS para o fluido bifásico pode ser escrita como:

$$\rho_0 \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla \cdot (\lambda(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \mathbf{F} + \mathbf{F}_c \quad (2.50)$$

Substituindo a fórmula para a força \mathbf{F} :

$$\rho_0 \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla \cdot (\lambda(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_c \quad (2.51)$$

$$\rho_0 \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla \cdot (\lambda(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \rho \mathbf{g} - \beta \rho_0 \mathbf{g}(T - T_\infty) + \mathbf{F}_c \quad (2.52)$$

Dividindo tudo por ρ_0 e lembrando que \mathbf{g} pode ser expresso como o gradiente de uma função potencial de módulo gz , tem-se:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla \cdot (\lambda(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) - \beta \mathbf{g}(T - T_\infty) + \frac{\mathbf{F}_c}{\rho_0} \quad (2.53)$$

Onde p agora é a pressão modificada, dada por $p = p + \rho_0 gz$, e ν é a viscosidade cinemática do fluido. O novo termo, $-\beta \mathbf{g}(T - T_\infty)$, que se soma à equação tradicional de NS é chamado de força de flutuação, ou empuxo, e aparece apenas na equação da velocidade vertical (não tem efeito sobre a velocidade horizontal).

2.5 LEVEL SET

O método de Level Set foi inicialmente desenvolvido por Osher e Sethian (1988) como uma maneira de computar e analisar o movimento de uma interface em duas ou três dimensões. Seu objetivo é, de forma resumida, acompanhar o movimento descrito por essa gota quando submetida a um campo de velocidade \mathbf{u} . Atualmente, já existem muitas variações da técnica, tendo cada uma delas suas particularidades e melhor aplicabilidade. Baseado no trabalho de Osher e Fedkiw (2000), serão apresentadas, aqui, as principais características do método em geral e a forma como ele afeta o escoamento convectivo que era inicialmente uniforme e monofásico.

Dada uma interface τ e uma função distância $\phi(x, t)$ dessa interface, chamada função de level set, criada para representá-la; seu contorno delimita uma região aberta representada por Ω . Nessa lógica, a função $\phi(x, t)$ terá as seguintes propriedades:

$$\begin{cases} \phi(x, t) > 0 \text{ para } x \in \Omega, \\ \phi(x, t) < 0 \text{ para } x \notin \Omega, \\ \phi(x, t) = 0 \text{ para } x \in \partial\Omega = \tau(t). \end{cases} \quad (2.54)$$

Ou seja, ela assume um valor positivo para pontos no interior de τ , valores negativos para pontos no exterior e, exatamente na região da interface, ela se iguala a zero.

O comportamento da gota é semelhante ao de um escalar que é "carregado", ou convectado, pelo escoamento, sem sofrer difusão. Assim, a equação que vai descrever seu movimento será:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = 0 \quad (2.55)$$

Resolvendo a Eq.(2.55) a todo tempo, é possível saber a cada instante onde ela se encontra na cavidade. Com essa solução é possível se obter ainda o vetor direção normal ($\hat{\mathbf{n}}$) e a curvatura (κ) em certa região da interface, dados por:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \quad (2.56)$$

$$\kappa = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (2.57)$$

De posse desses parâmetros, já é possível se escrever a fórmula, que é uma outra forma de representação da equação de Young-Laplace, para força de contato \mathbf{F}_c que aparece na equação de NS devido ao efeito da tensão superficial. Basicamente, essa força é normal à superfície, é função da curvatura e da distância do ponto do escoamento até ela. Ela deve existir apenas nos pontos da malha que se encontram exatamente em cima da

gota, nos pontos nos quais $\phi = 0$. Para tal costuma-se usar a função delta de Dirac $\delta(x)$, da seguinte maneira:

$$\mathbf{F}_c = \sigma\kappa\delta(\phi)\hat{\mathbf{n}} \quad (2.58)$$

Sendo σ o coeficiente de tensão superficial.

Porém, essa função, quando assim utilizada, cria uma descontinuidade muito grande na região adjacente à interface. Por esse motivo, será utilizada uma função Heaviside $H(\phi)$ para suavizar $\delta(\phi)$ de forma que:

$$\delta(\phi) = \frac{\partial H(\phi)}{\partial \phi} \quad (2.59)$$

A Heaviside é calculada como:

$$H(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{se } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \text{sen}\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right], & \text{se } |\phi| \leq \epsilon \\ 0, & \text{se } \phi > \epsilon \end{cases} \quad (2.60)$$

E $\delta(\phi)$ será, então:

$$\delta(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{se } |\phi| > \epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right], & \text{se } |\phi| \leq \epsilon \end{cases} \quad (2.61)$$

Onde ϵ é a espessura de uma pequena região ao redor da interface dada por $1,5h$ (lembrando que h é o espaçamento da malha.)

Com o uso deste tipo de Heaviside, é garantido um contorno suave para nossa gota. Assim, a força de contato entre a fase dispersa do fluido e a interface é totalmente definida e pode ser inserida diretamente nas equações do movimento já deduzidas.

Por último, é relevante se citar a necessidade de reinicialização da função distância, em uma certa região ao redor da interface, a cada certo número de iterações numéricas do método do Level Set. Com o passar do tempo, a função distância torna-se excessivamente plana ("flat") ou íngreme ("steep") ao redor da gota e; conseqüentemente, ela perde suas características, deixando de representar uma distância e podendo afetar fortemente a estabilidade numérica do programa. Como recomendado por Osher e Fedkiw (2000), regularmente (aqui, a cada duas iterações) a função $\phi(x, t)$ é redefinida pela seguinte rotina:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + (2\delta(\phi) - 1)(|\nabla \psi| - 1) = 0 \quad (2.62)$$

$$\psi(x, 0) = \phi(x, t) \quad (2.63)$$

Sendo ψ apenas um novo nome assumido pela variável que representa a função distância.

2.6 ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

Inserindo-se a equação recém deduzida para força de contato na equação de Navier-Stokes (Eq. 2.53) e resumindo toda a metodologia apresentada até aqui, as equações que devem ser resolvidas para o fluido, além da própria equação do Level Set, para se reproduzir do fenômeno da convecção bifásica na cavidade são:

Equação da Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T \quad (2.64)$$

Componente horizontal u :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla u = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla \cdot (\lambda(\nabla u + \nabla u^T)) + \frac{\sigma \kappa \delta(\phi)}{\rho} \quad (2.65)$$

Componente vertical v :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla v = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla \cdot (\lambda(\nabla v + \nabla v^T)) + \frac{\sigma \kappa \delta(\phi)}{\rho} + g\beta(T - T_{frio}) \quad (2.66)$$

Equação da continuidade:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.67)$$

Para facilitar o processo de simulação numérica, é costume reescrever cada uma das equações, que são dimensionais, na sua forma adimensional. Assim, o número de parâmetros que podem variar durante a análise é diminuído drasticamente. Serão formados grupos, conhecidos como números adimensionais (Re , Pr , $Ra...$), de duas ou mais grandezas dimensionais (massa específica, viscosidade, etc.) e que simplificarão bastante o estudo dos resultados.

Essa adimensionalização é feita escolhendo-se, inicialmente, grandezas características para cada uma das variáveis do problema e dividindo em seguida a variável dimensi-

onal, na equação, pela sua respectiva característica. Para este estudo adotou-se os mesmos parâmetros adotados por Shi e Khodadadi (2003):

$$L_c = L \quad , \quad U_c = \frac{\alpha}{L} \quad , \quad P_c = \frac{\rho\alpha^2}{L^2} \quad , \quad t_c = \frac{L^2}{\alpha} \quad , \quad \theta = \frac{T - T_{frio}}{T_{quente} - T_{frio}}$$

Onde L é o lado da cavidade, T_{frio} a temperatura da sua parede mais fria, T_{quente} a temperatura da parede mais quente e θ a temperatura já adimensionalizada. As variáveis L_c , U_c , P_c e t_c são o comprimento, velocidade, pressão e tempo característicos, respectivamente. As outras variáveis adimensionais serão então:

$$x^* = \frac{x}{L} \quad , \quad y^* = \frac{y}{L} \quad , \quad u^* = \frac{uL}{\alpha} \quad , \quad v^* = \frac{vL}{\alpha} \quad , \quad p^* = \frac{pL^2}{\rho\alpha^2} \quad , \quad t^* = \frac{t\alpha}{L^2}$$

Sendo esse * apenas uma representação para a variável adimensional na equação, que nada tem a ver com o \mathbf{u}^* do campo intermediário de velocidades do método de projeção. Desse modo, primeiramente, para a Equação da Energia (Eq. 2.64), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta T}{t_c} \frac{\partial \theta}{\partial t^*} + \frac{U_c \Delta T}{L} \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \theta &= \frac{\alpha \Delta T}{L^2} \nabla^{*2} \theta \\ \frac{1}{t_c} \frac{\partial \theta}{\partial t^*} + \frac{U_c}{L} \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \theta &= \frac{\alpha}{L^2} \nabla^{*2} \theta \\ \frac{\alpha}{L^2} \frac{\partial \theta}{\partial t^*} + \frac{\alpha}{L^2} \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \theta &= \frac{\alpha}{L^2} \nabla^{*2} \theta \\ \frac{\partial \theta}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \theta &= \nabla^{*2} \theta \end{aligned}$$

Posteriormente, o mesmo processo é repetido para as equações das velocidades (Eq. 2.65 e 2.66); porém, ele é mais trabalhoso e não será aqui demonstrado por questões de simplicidade. Ao final, o sistema de equações a ser resolvido numericamente é:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \theta = \nabla^{*2} \theta \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* u^* = -\nabla^* p^* + Pr \nabla^* \cdot (\lambda(\nabla^* u^* + \nabla^{*T} u^*)) + \frac{Pr}{Ca} \left(\frac{a}{L} \right) \kappa^* \delta^*(\phi) \quad (2.69)$$

$$\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* v^* = -\nabla^* p^* + Pr \nabla^* \cdot (\lambda(\nabla^* v^* + \nabla^{*T} v^*)) + \frac{Pr}{Ca} \left(\frac{a}{L} \right) \kappa^* \delta^*(\phi) + Ra Pr \theta \quad (2.70)$$

Sendo Pr , Ra e Ca os números de Prandtl, Rayleigh e capilaridade e $\frac{a}{L}$ a razão de aspecto (raio da gota dividido pelo comprimento da lateral da cavidade).

2.7 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Como já dito, a primeira simulação da cavidade realizada foi a do escoamento gerado pela placa plana (ou ainda, nesse caso, parede superior) que se move com velocidade horizontal igual a u em contato com a superfície do fluido em seu interior, o escoamento cisalhante. Para as velocidades, adotam-se condições de contorno de Dirichlet e, para a pressão, condições de contorno de Neumann.

A única parede que se move é a parede superior, que tem velocidade 1 (adimensional) no sentido positivo do eixo x , todas as demais estão paradas e possuem, assim, velocidades nulas. Ao mesmo tempo, o fluxo de pressão através de cada uma das fronteiras será igual a zero. Utilizando a condição de contorno de não escorregamento entre o fluido e as paredes adjacentes tem-se, então:

- TW - Parede superior ($\forall x$ em $y = y_{máx}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 1, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dy^* = 0. \end{array} \right. \quad (2.71)$$

- BW - Parede inferior ($\forall x$ em $y = y_{mín}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 0, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dy^* = 0. \end{array} \right. \quad (2.72)$$

- LW - Parede esquerda ($\forall y$ em $x = x_{mín}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 0, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dx^* = 0. \end{array} \right. \quad (2.73)$$

- RW - Parede direita ($\forall y$ em $x = x_{máx}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 0, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dx^* = 0. \end{array} \right. \quad (2.74)$$

Nessa situação, além dos pontos de contorno nas próprias paredes, existem dois pontos-chave que são, normalmente, fonte de problemas. Nas duas "quinas" superiores da malha ($x_{mín}, y_{máx}$) e ($x_{máx}, y_{máx}$), ou seja, exatamente nos pontos onde a borda superior se encontra com as bordas laterais, surge um pequeno conflito para as condições de contorno. A velocidade das paredes laterais é nula, enquanto a da parede superior não o é. Dessa maneira, adotou-se para esses pontos a velocidade das paredes laterais.

Na primeira simulação, a circulação do fluido dentro da cavidade é gerada puramente pelo movimento da placa com a qual ele está em contato na superfície. Como o objetivo final é, na realidade, criar uma convecção natural gerada pelas forças de empuxo no interior do fluido, foi necessária a adição de mais uma equação ao problema (Equação da Energia), que traz consigo condições de contorno extras ao problema anterior.

Além das condições para as velocidades e para a pressão, deve-se especificar também as temperaturas (θ) de cada uma das quatro paredes. Considerando que a parede esquerda tem temperatura T_{quente} , a parede direita está à temperatura T_{frio} e as paredes superior e inferior são termicamente isoladas, as novas condições de contorno para as equações do escoamento serão dadas por:

- TW - Parede superior ($\forall x$ em $y = y_{m\acute{a}x}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 0, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dy^* = 0, \\ d\theta/dy^* = 0. \end{array} \right. \quad (2.75)$$

- BW - Parede inferior ($\forall x$ em $y = y_{m\acute{i}n}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 0, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dy^* = 0, \\ d\theta/dy^* = 0. \end{array} \right. \quad (2.76)$$

- LW - Parede esquerda ($\forall y$ em $x = x_{m\acute{i}n}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 0, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dx^* = 0, \\ \theta = 1 \end{array} \right. \quad (2.77)$$

- RW - Parede direita ($\forall y$ em $x = x_{m\acute{a}x}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} u^* = 0, \\ v^* = 0, \\ dp^*/dx^* = 0, \\ \theta = 0 \end{array} \right. \quad (2.78)$$

2.8 CÁLCULO DO NÚMERO DE NUSSELT

Com o objetivo de se avaliar o sucesso da implementação Equação da Energia, deseja-se calcular o número de Nusselt na parede quente da cavidade para diferentes

regimes de troca de calor, ou seja, diferentes números de Rayleigh, e compará-los com aqueles obtidos por trabalhos antigos disponíveis. Dessa forma, do mesmo modo que para adimensionalização, usando como referência o trabalho de Shi e Khodadadi (2003), o número de Nusselt local (Nu_l) em um ponto qualquer na parede ($x^* = 0$) é calculado como:

$$Nu_l = -\frac{\partial\theta}{\partial x^*} \quad (2.79)$$

Para se obter o número de Nusselt total, ou médio, deve-se integrar o número de Nusselt local em toda a região da parede, ou seja, de $y_{mín} = 0$ até $y_{máx} = L$:

$$Nu = -\int_0^L \frac{\partial\theta}{\partial x^*} dy^* \quad (2.80)$$

Utilizando a Regra do Trapézio, um método de integração de segunda ordem, a integral acima é facilmente calculada.

2.9 GRADIENTE CONJUGADO

Uma importante parte da simulação numérica consiste em resolver, para cada instante de tempo e para cada ponto da malha (associado com seu próprio stencil), um sistema linear formado pelas equações do escoamento e as condições de contorno apresentadas anteriormente. Assim, para tal, buscou-se encontrar um método numérico que fosse eficiente e utilizasse, em cada loop do programa, o menor número de iterações possível para chegar numa solução considerada satisfatória.

O método do gradiente conjugado é o método iterativo mais popular para resolução de grandes sistemas lineares de equações da forma:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (2.81)$$

Onde \mathbf{x} é um vetor não conhecido, \mathbf{b} um vetor já conhecido e \mathbf{A} uma matriz quadrada, simétrica e positiva definida (SHEWCHUK, 1994). Ele consiste em reescrever o sistema da Eq. (2.81) na sua forma quadrática; uma função escalar de um vetor definida como:

$$f(x) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{Ax} - \mathbf{b}^T\mathbf{x} + c \quad (2.82)$$

Sendo c uma constante escalar dada. Com algum esforço matemático, é possível se provar que o gradiente da forma quadrática é igual a $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, ou seja, tirando-se o

gradiente de $f(x)$, o problema inicial é imediatamente recuperado:

$$\nabla f = \frac{1}{2}\mathbf{A}^T\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b} \quad (2.83)$$

Como \mathbf{A} é simétrica, a Eq.(2.83) se reduz a:

$$\nabla f = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b} \quad (2.84)$$

Igualando-se a Eq.(2.84) a zero, o sistema linear volta à sua forma original (Eq. 2.81).

Assim, é possível notar que a solução buscada coincide exatamente com o ponto crítico que minimiza a função. O objetivo do método é exatamente este, encontrar tal ponto x que minimiza o gradiente da $f(x)$.

O método do gradiente conjugado se baseia no método do gradiente, uma versão menos eficiente e simplificada do mesmo. Dado um ponto inicial x_0 no domínio do espaço, procura-se encontrar o caminho mais curto para se chegar ao ponto de mínimo, e solução, x . Para uma função bidimensional, suas linhas de $f(x) = \text{constante}$ são curvas elipsoidais como as representadas na Fig.(2.5) e a solução do problema, o ponto de mínimo, será o epicentro delas:

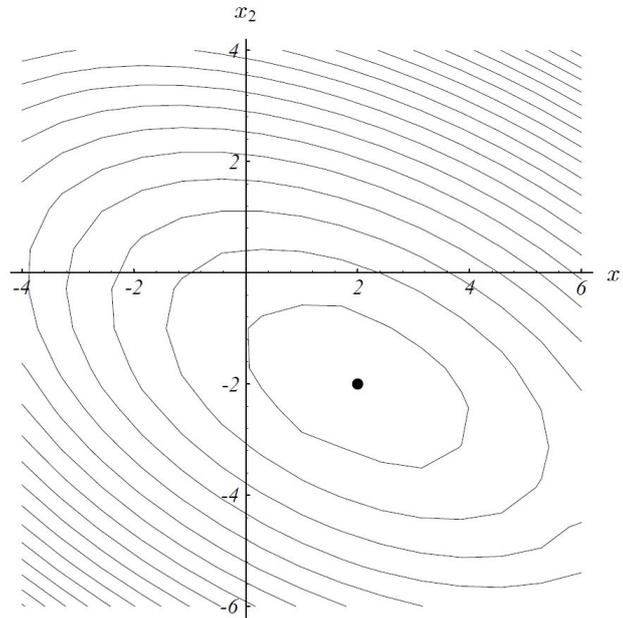


Figura 2.5 – Curvas de $f(x)$ constante. (SHEWCHUK, 1994)

Como mostrado na Fig.(2.6), para cada ponto da curva, o gradiente local será um vetor perpendicular à ela. Ao mesmo tempo, sabe-se que esse vetor gradiente representa o sentido de crescimento da função. Se nosso desejo é encontrar o ponto mínimo dela, a primeira intuição seria seguir a direção de $-\nabla f$, que será:

$$-\nabla f = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (2.85)$$

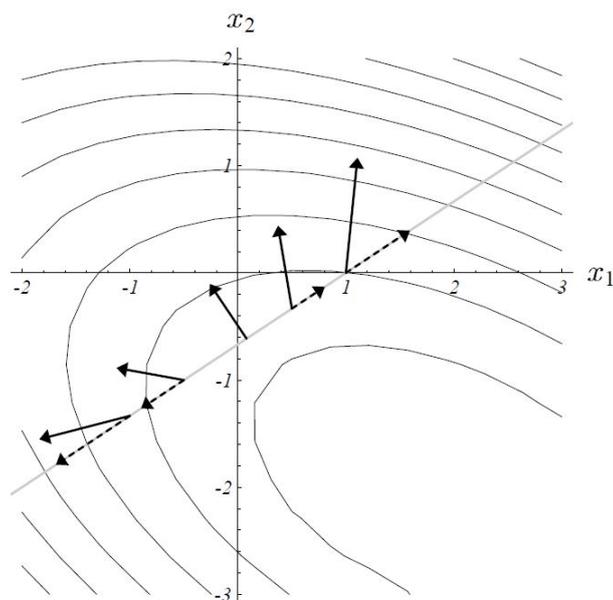


Figura 2.6 – Gradiente de $f(x)$ para diferentes locais do plano (SHEWCHUK, 1994).

Que é justamente igual ao resíduo do método. Conclui-se, então, que o resíduo (r) indica a direção de maior decrescimento de $f(x)$:

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} = -\nabla f \quad (2.86)$$

Partindo-se do ponto x_0 , deseja-se chegar ao próximo ponto x_1 andando-se algum tanto (η) na direção do resíduo, ou seja:

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \eta \mathbf{r}_0 \quad (2.87)$$

Para determinar o valor de η , partimos do princípio de que ele minimiza a função quando a derivada direcional de $f(x)$ em relação a η também é igual a zero. Pela regra da cadeia, tem-se:

$$\frac{df(\mathbf{x}_1)}{d\eta} = \nabla f(\mathbf{x}_1) \frac{d\mathbf{x}_1}{d\eta} \quad (2.88)$$

Derivando-se a Eq.(2.87), temos que a derivada de x_1 em relação a x é exatamente igual ao resíduo, assim:

$$\frac{df(\mathbf{x}_1)}{d\eta} = \nabla f(\mathbf{x}_1) \mathbf{r}_0 \quad (2.89)$$

Igualando a expressão da Eq.(2.89) a zero, é possível perceber que o gradiente de f em x_1 e o resíduo r_0 deverão ser ortogonais. Além disso, partindo-se da Eq.(2.86), podemos

escrever:

$$\nabla f(\mathbf{x}_1) = -\mathbf{r}_1 \quad (2.90)$$

Com isso:

$$\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_0 = 0 \quad (2.91)$$

$$(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_1) \mathbf{r}_0 = 0 \quad (2.92)$$

$$(\mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{x}_0 + \eta \mathbf{r}_0)) \mathbf{r}_0 = 0 \quad (2.93)$$

$$(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0) \mathbf{r}_0 - \eta (\mathbf{A}\mathbf{r}_0) \mathbf{r}_0 = 0 \quad (2.94)$$

$$(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0) \mathbf{r}_0 = \eta (\mathbf{A}\mathbf{r}_0) \mathbf{r}_0 \quad (2.95)$$

$$\mathbf{r}_0 \mathbf{r}_0 = \eta \mathbf{r}_0 (\mathbf{A}\mathbf{r}_0) \quad (2.96)$$

$$\eta = \frac{\mathbf{r}_0 \mathbf{r}_0}{\mathbf{r}_0 (\mathbf{A}\mathbf{r}_0)} \quad (2.97)$$

Determinado o valor de η , o método do gradiente é executado com a sequência dos passos:

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_i \quad (2.98)$$

$$\eta_i = \frac{\mathbf{r}_i \mathbf{r}_i}{\mathbf{r}_i (\mathbf{A}\mathbf{r}_i)} \quad (2.99)$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \eta_i \mathbf{r}_i \quad (2.100)$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \eta_i \mathbf{A}\mathbf{r}_i \quad (2.101)$$

O método do gradiente apresenta um problema, na medida que sua convergência se dá de forma muito lenta. Os vetores resíduo e, conseqüentemente, os vetores gradiente, de cada iteração são sempre ortogonais ao vetor resíduo do passo de tempo anterior. Com isso, o programa acaba seguindo, entre o chute inicial e a solução exata, um "caminho" que revisita diversas vezes a mesma direção de busca. O método do gradiente conjugado, utilizado no programa e cuja demonstração não está no escopo deste trabalho, toma como base o método do gradiente e, com uma atualização da fórmula de η a cada loop, otimiza sua rotina para garantir que cada direção de busca é visitada apenas uma vez durante sua execução. Seu algoritmo é escrito como:

$$\mathbf{d}_0 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0 \quad (2.102)$$

$$\eta_i = \frac{\mathbf{r}_i \mathbf{r}_i}{\mathbf{d}_i (\mathbf{A} \mathbf{d}_i)} \quad (2.103)$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \eta_i \mathbf{d}_i \quad (2.104)$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \eta_i \mathbf{A} \mathbf{d}_i \quad (2.105)$$

$$\varphi_{i+1} = \frac{\mathbf{r}_{i+1} \mathbf{r}_{i+1}}{\mathbf{r}_i \mathbf{r}_i} \quad (2.106)$$

$$\mathbf{d}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \varphi_{i+1} \mathbf{d}_i \quad (2.107)$$

Sendo ψ e \mathbf{d} a atualização da direção de busca e do resíduo, respectivamente.

3 RESULTADOS

3.1 ESCOAMENTO CISALHANTE

3.1.1 Convergência do método de primeira e segunda ordem

Na primeira etapa do projeto, foi concluída a resolução do problema do escoamento cisalhante, no interior de uma cavidade bidimensional, discretizada em uma malha uniforme (igualmente espaçada em ambas as direções) de 129 x 129, com origem no ponto $(0, 0)$ e paredes de tamanho unitário ($x_{máx} = y_{máx} = 1$), tanto para primeira quanto para segunda ordem no tempo. A simulação foi rodada até que se atingisse o regime permanente. Em todas as análises, a tolerância utilizada foi de 10^{-12} e o intervalo de tempo para discretização temporal (Δt) é calculado em função do *cfl* (Courant-Friedrichs-Lewy) como sendo:

$$\Delta t = \frac{h \text{ cfl}}{u_{máx}} \quad (3.1)$$

Com o intuito de se analisar a diferença de eficiência entre as duas simulações, ou seja, a rapidez da convergência de cada uma delas, foram criados gráficos que relacionam o passo de tempo com o número de iterações necessárias para que o método do gradiente conjugado chegue a um resultado satisfatório.

Para este primeiro estudo, foram utilizados um número de Reynolds igual a 10 e um tempo máximo de análise igual a 0,02. Primeiro, rodou-se o programa que contém o algoritmo de primeira ordem e gerou-se um arquivo contendo dados de cada passo de tempo (nt) e o número de iterações usadas em cada um desses instantes para encontrar os campos de velocidade u , v e pressão p do escoamento. Depois, repetiu-se o mesmo procedimento com o programa adaptado para aproximação de segunda ordem no tempo. Os resultados para cada uma das variáveis são mostrados nas Figs. (3.1), (3.2) e (3.3).

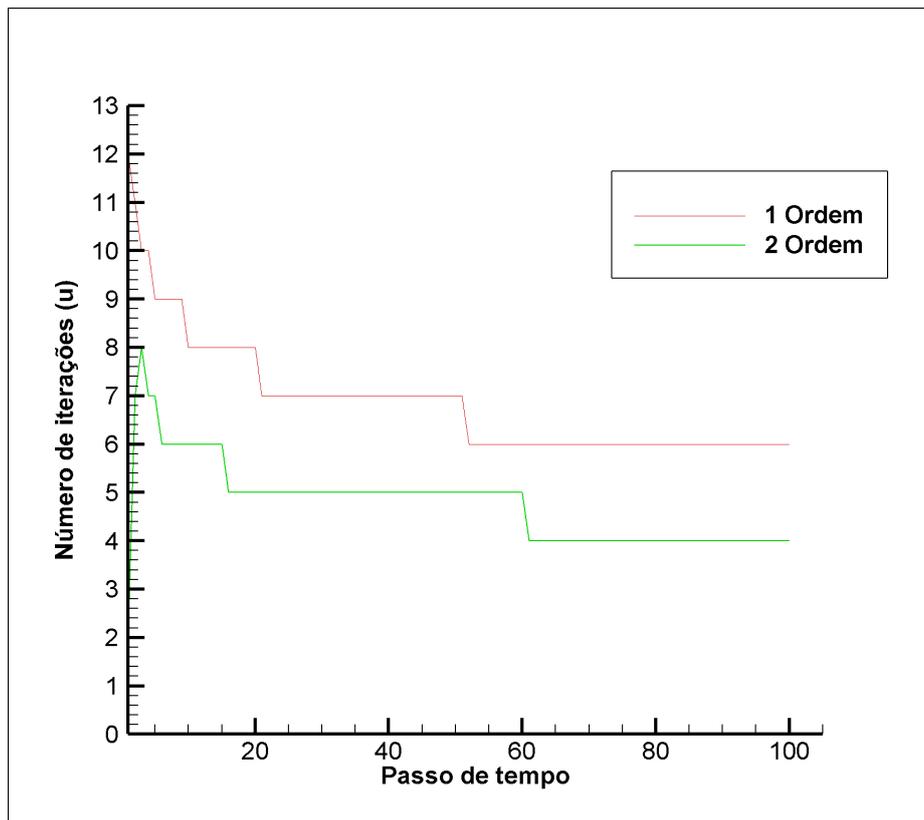


Figura 3.1 – Comparação do número de iterações necessárias para encontrar o campo de velocidade u com aproximações de primeira e segunda ordem no tempo.

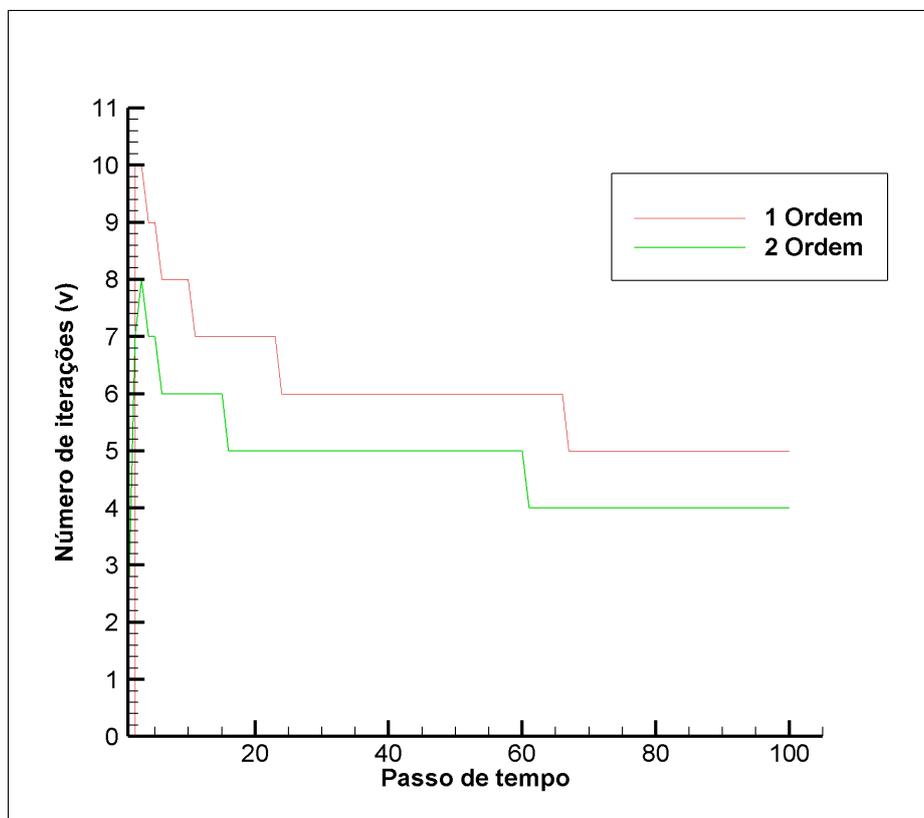


Figura 3.2 – Comparação do número de iterações necessárias para encontrar o campo de velocidade v com aproximações de primeira e segunda ordem no tempo.

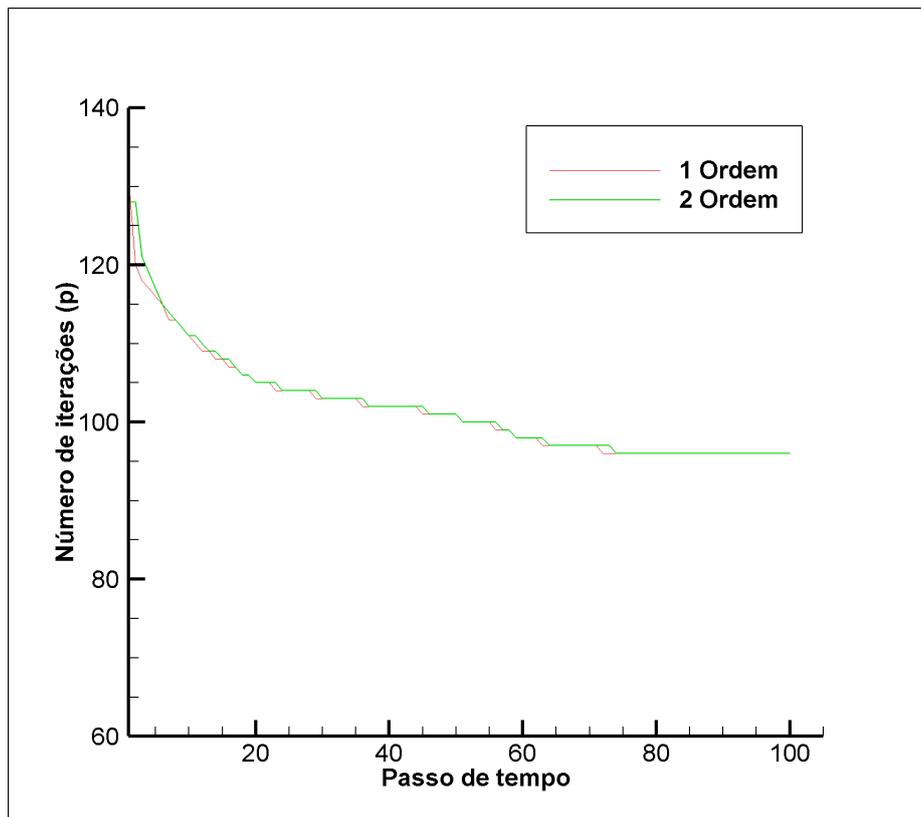


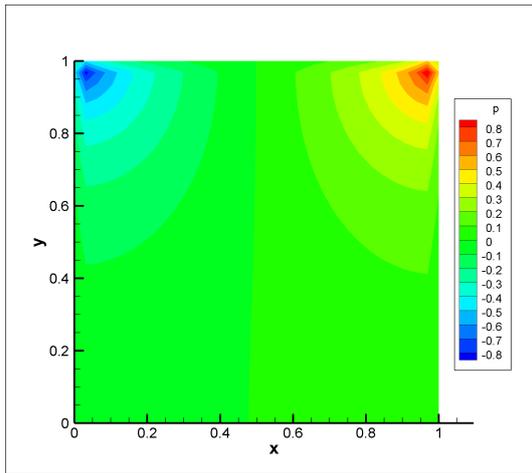
Figura 3.3 – Comparação do número de iterações necessárias para encontrar o campo de pressão p com aproximações de primeira e segunda ordem no tempo.

Pela observação das Figs. (3.1) e (3.2), fica claro que método de segunda ordem usa menos iterações para resolver o sistema linear do que o de primeira. Para a pressão (Fig. 3.3), os resultados são semelhantes porque sua equação é essencialmente a mesma para os dois casos.

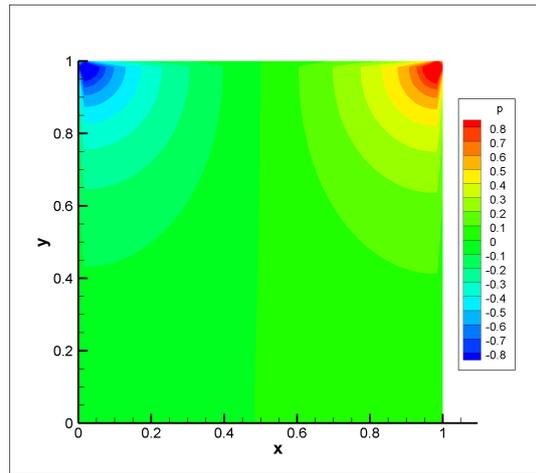
3.1.2 Influência do refinamento da malha

Para as análises subsequentes, é necessário se estabelecer um refinamento padrão para a malha, que será utilizado em todas as simulações posteriores. Sendo assim, procurou-se estudar o impacto do número de pontos (nx, ny) utilizados na discretização nos resultados finais.

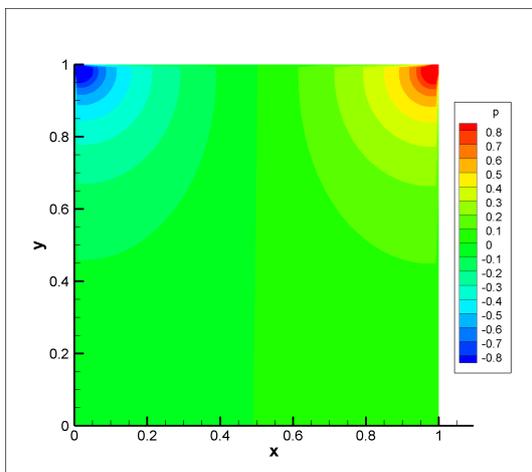
Usando-se agora um número de Reynolds igual a 100 (para tornar o escoamento um pouco mais expressivo) e, novamente, um tempo de análise igual a 0,02, gerou-se imagens dos campos de velocidade e de pressão para malhas com 33, 65, 129, 257, 513 e 1025 pontos em cada um de seus eixos. Nas Fig.(3.4) abaixo, os resultados encontrados para a pressão:



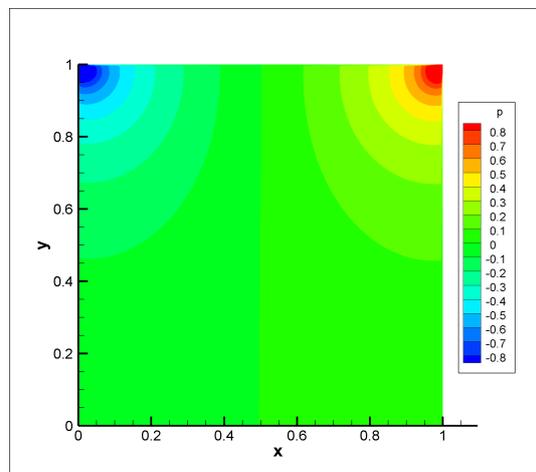
(a) Malha 33 x 33.



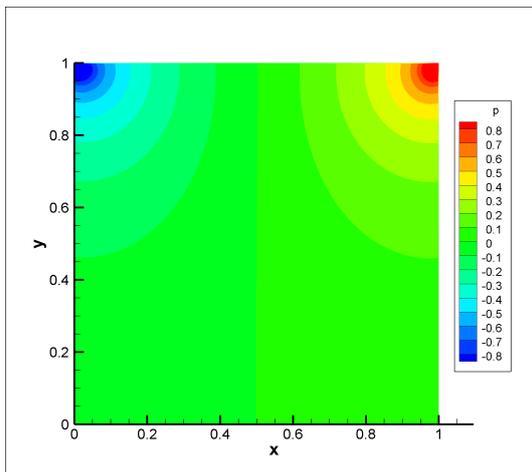
(b) Malha 65 x 65.



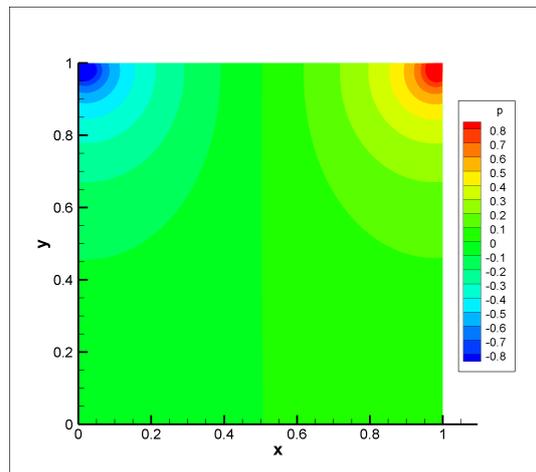
(c) Malha 129 x 129.



(d) Malha 257 x 257.



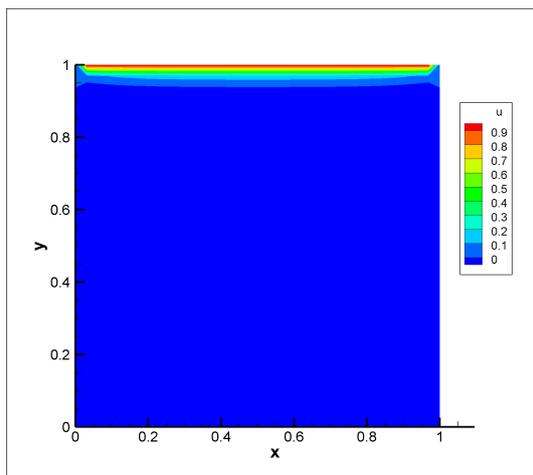
(e) Malha 513 x 513.



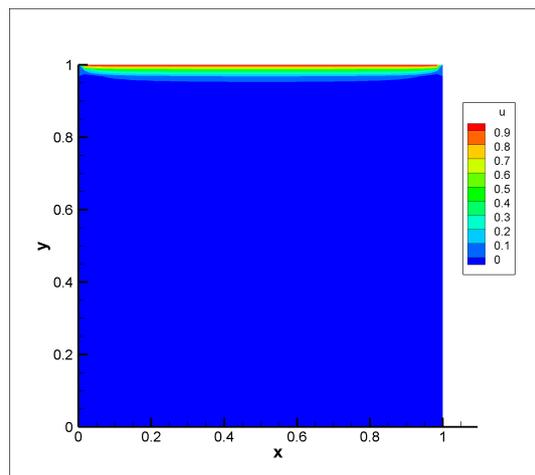
(f) Malha 1025 x 1025.

Figura 3.4 – Distribuição do campo de pressão em malhas com diferentes refinamentos.

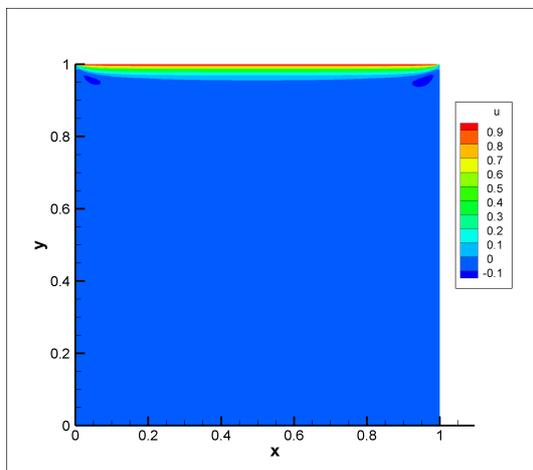
Da mesma maneira, para o campo de u :



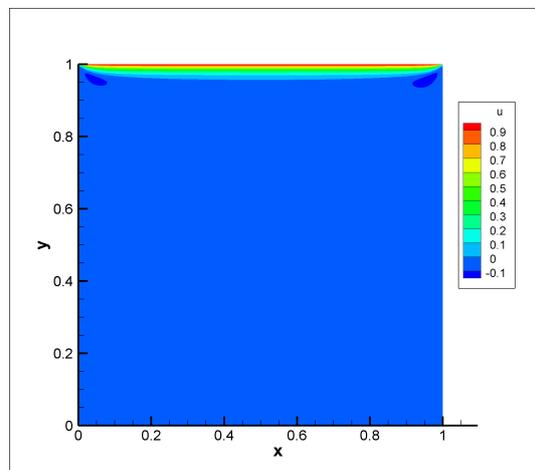
(a) Malha 33×33 .



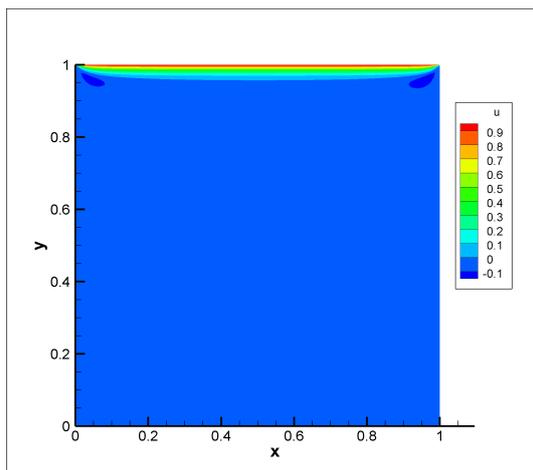
(b) Malha 65×65 .



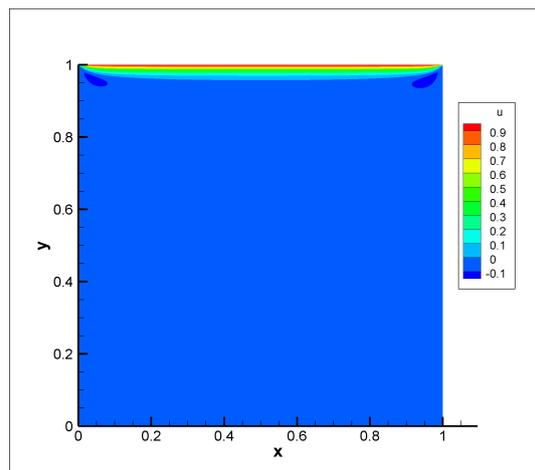
(c) Malha 129×129 .



(d) Malha 257×257 .



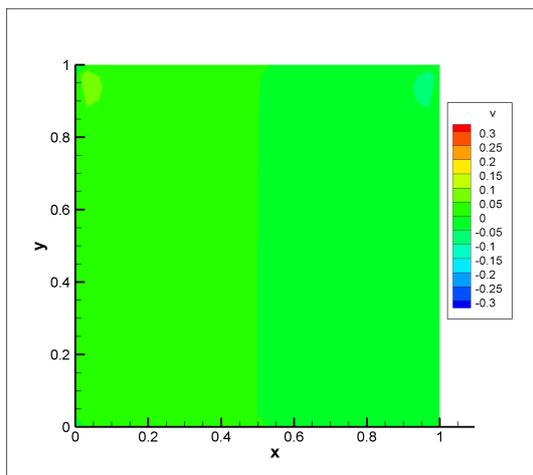
(e) Malha 513×513 .



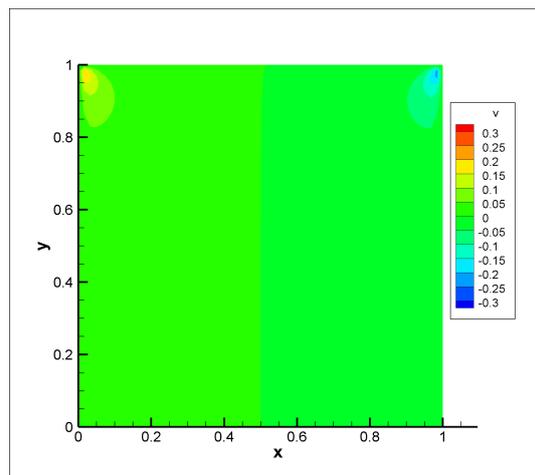
(f) Malha 1025×1025 .

Figura 3.5 – Distribuição da velocidade u do escoamento em malhas com diferentes refinamentos.

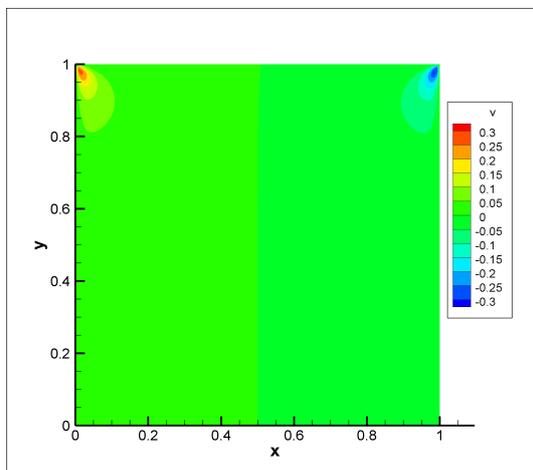
E, finalmente, para o campo de v :



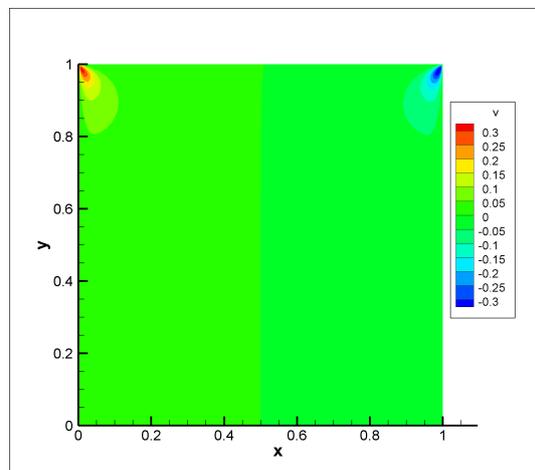
(a) Malha 33 x 33.



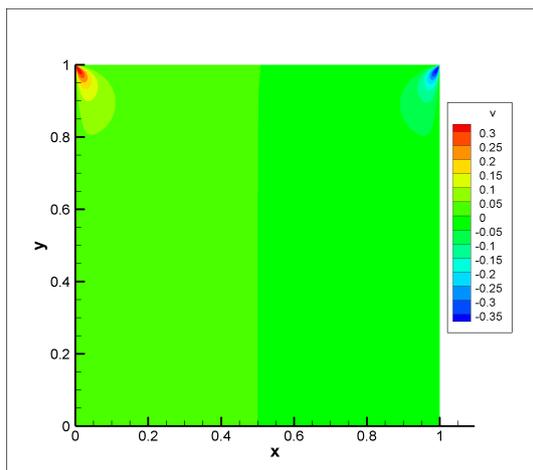
(b) Malha 65 x 65.



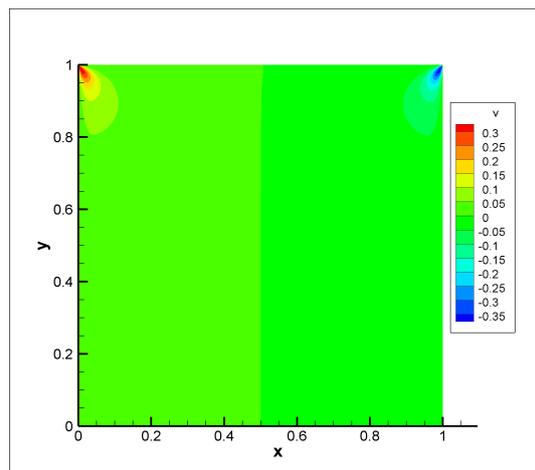
(c) Malha 129 x 129.



(d) Malha 257 x 257.



(e) Malha 513 x 513.



(f) Malha 1025 x 1025.

Figura 3.6 – Distribuição da velocidade v do escoamento em malhas com diferentes refinamentos.

Baseado nas Figs. (3.4), (3.5) e (3.6), é possível notar que, da malha 129 x 129 em diante, os campos permanecem praticamente inalterados com o aumento do refinamento, ao passo que o tempo necessário para a convergência do programa aumentou consideravelmente. Assim, a malha padrão utilizada daqui pra frente para o escoamento cisalhante será sempre a de 128 intervalos, ou 129 pontos.

3.1.3 Validação dos resultados

Pelos resultados obtidos até aqui, o programa parece estar funcionando muito bem; porém, para se ter certeza, gerou-se dados para o perfil de velocidades, linhas de corrente e de vorticidade do escoamento para diferentes números de Reynolds, da mesma forma feita por Ghia, Ghia e Shin em (GHIA; GHIA; SHIN, 1982). O objetivo dos autores era obter a solução para o problema do escoamento cisalhante para o maior número de Reynolds possível (eles chegaram até o valor de $Re = 10^4$), utilizando uma malha com alto refinamento e o método de multigrid.

A rotina criada neste trabalho deveria apresentar, teoricamente, resultados con-
dizentes para escoamentos com números de Reynolds até a ordem de 10^3 . Sendo assim, utilizando os mesmos valores simulados por Ghia, esta análise foi realizada para Reynolds igual a 100, 400 e 1000.

Em seu trabalho, Ghia, Ghia e Shin (1982) fornecem tabelas e gráficos contendo o perfil das velocidades u e v do escoamento na malha 129 x 129, para cada número de Reynolds, em linhas que passam pelo centro geométrico da cavidade e pelo centro do vórtice primário que se forma em seu interior. Nas Figs. (3.8) e (3.9), são mostrados os resultados dos perfis encontrados para u e v , respectivamente. Na Fig.(3.7) a legenda para as duas figuras seguintes:

		LEGEND						
Re		100	400	1000	3200	5000	7500	10000
Source		a	b	c	d	e	f	g
Present		—	—	—	—	—	—	—
Rubin and Khosla [1977]		△		▲				
Nallasamy & Prasad [1977]		□		■				□
Agarwal [1981]		○	●	●	○		○	

Figura 3.7 – Legenda para as Figs. (3.8) e (3.9), (GHIA; GHIA; SHIN, 1982).

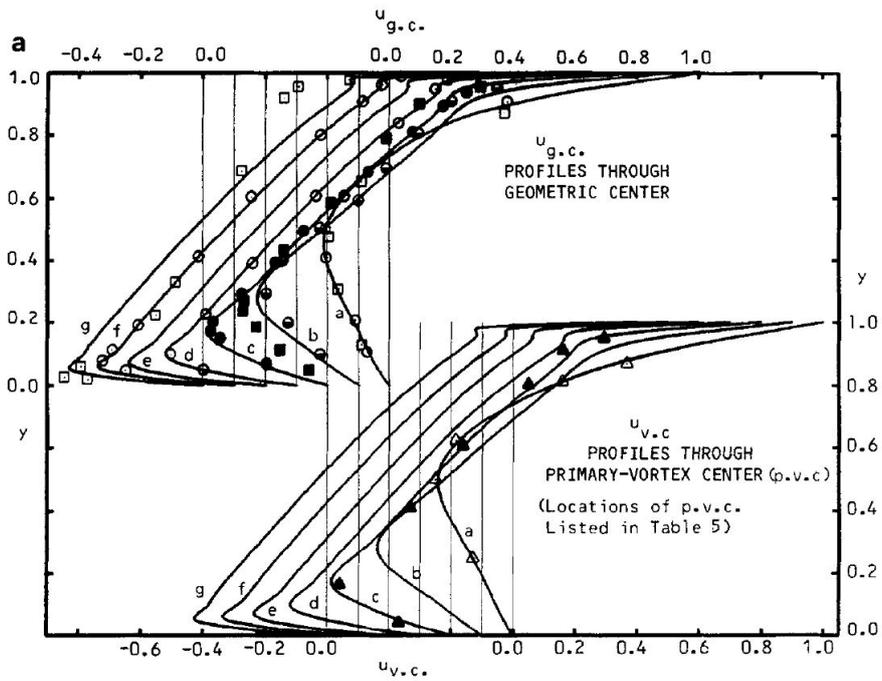


Figura 3.8 – Perfil de velocidade de u ao longo de linhas verticais que passam pelo centro da cavidade e do vórtice primário, (GHIA; GHIA; SHIN, 1982).

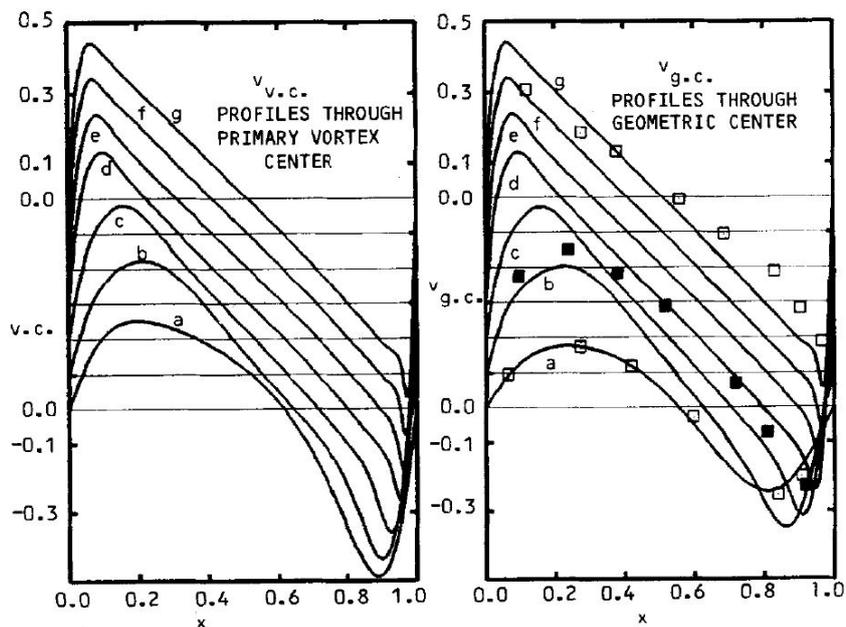
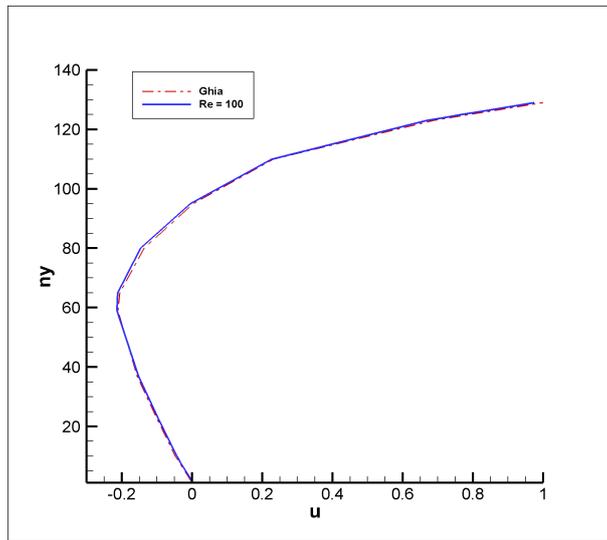
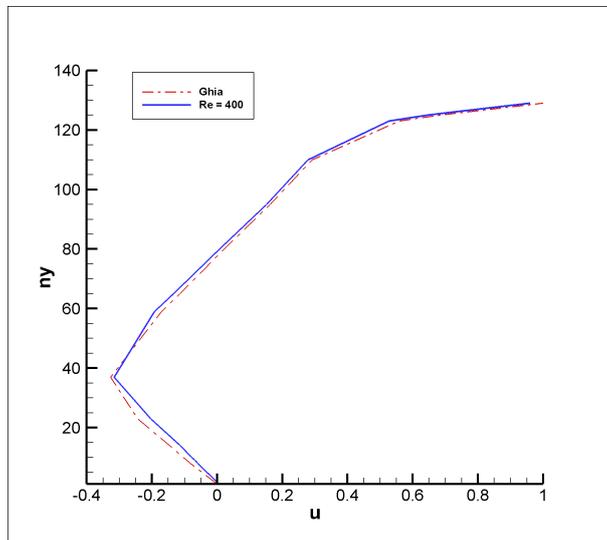


Figura 3.9 – Perfil de velocidade de v ao longo de uma linhas horizontais que passam pelo centro da cavidade e do vórtice primário, (GHIA; GHIA; SHIN, 1982).

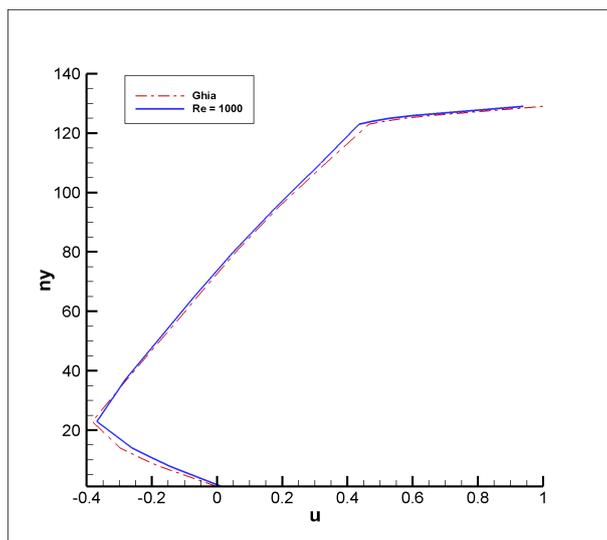
Neste relatório, os perfis encontrados para u , na região do centro geométrico da cavidade, utilizando também uma malha 129×129 , são mostrados na Fig.(3.10). Da mesma forma, os perfis encontrados para a velocidade v são dispostos na Fig.(3.11). As linhas mais finas, traço e ponto, representam o perfil traçado por Ghia, Ghia e Shin, enquanto a curva mais espessa e contínua mostra o perfil obtido com o programa próprio.



(a) Perfil de velocidade de u para $Re = 100$.

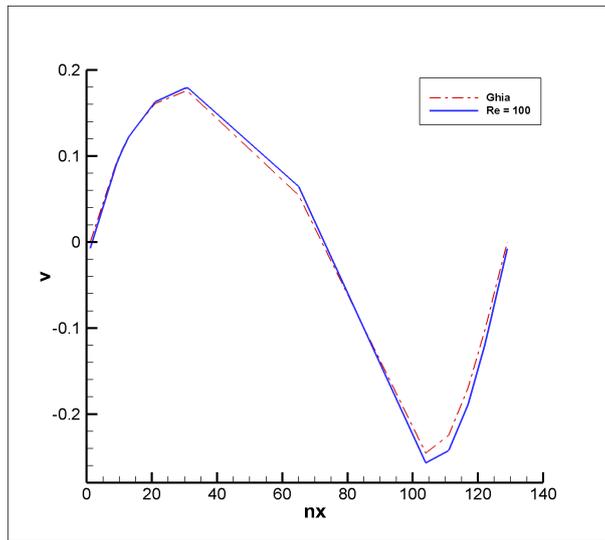


(b) Perfil de velocidade de u para $Re = 400$.

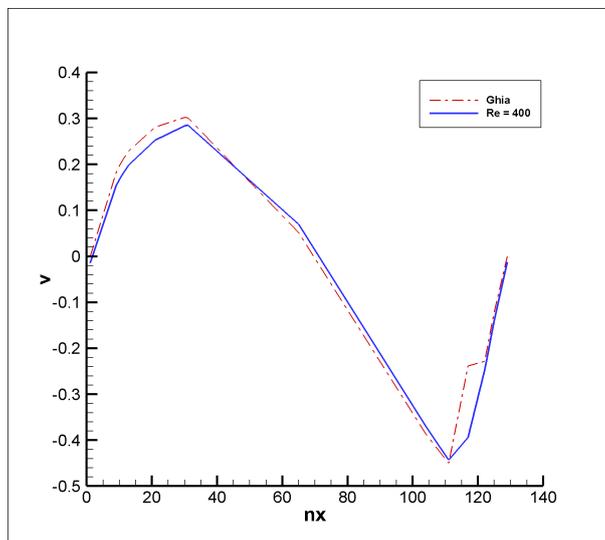


(c) Perfil de velocidade de u para $Re = 1000$.

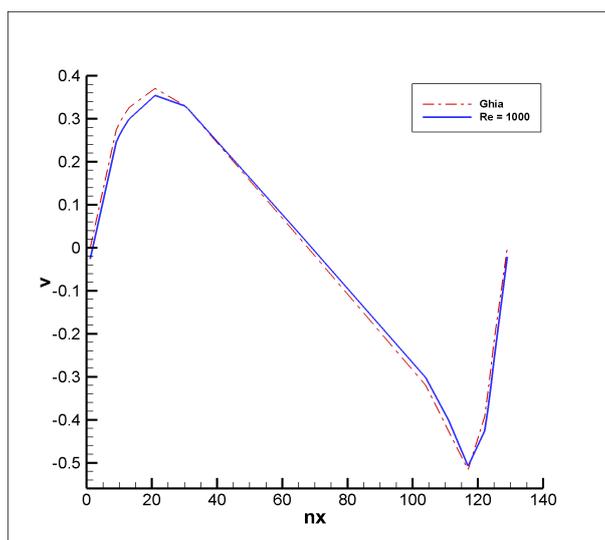
Figura 3.10 – Comparação dos resultados para o perfil de velocidade de u gerado com o programa e aquele encontrado por Ghia, Ghia e Shin (1982).



(a) Perfil de velocidade de v para $Re = 100$.



(b) Perfil de velocidade de v para $Re = 400$.



(c) Perfil de velocidade de v para $Re = 1000$.

Figura 3.11 – Comparação dos resultados para o perfil de velocidade de v gerado com o programa e aquele encontrado por Ghia, Ghia e Shin (1982).

Ainda a título de comparação, foram criadas as Figs. (3.12) e (3.13), que sintetizam, em uma mesma figura, os resultados dos perfis obtidos com o programa e os perfis de Ghia, Ghia e Shin (1982) para diferentes números de Reynolds.

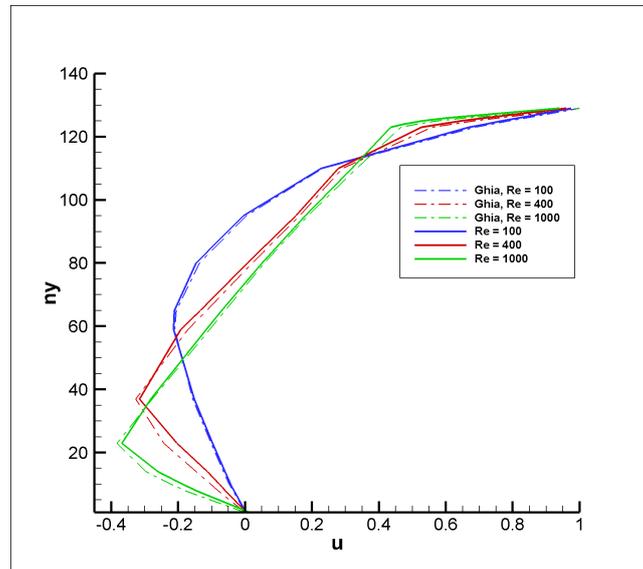


Figura 3.12 – Perfis de velocidade de u gerados para diferentes números de Reynolds.

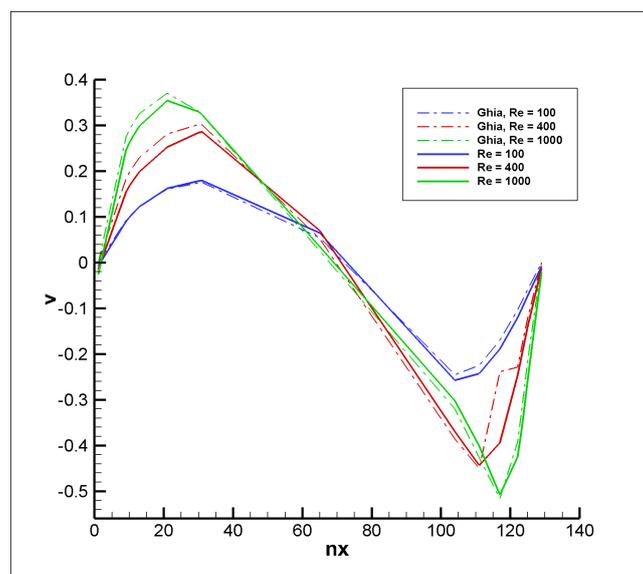
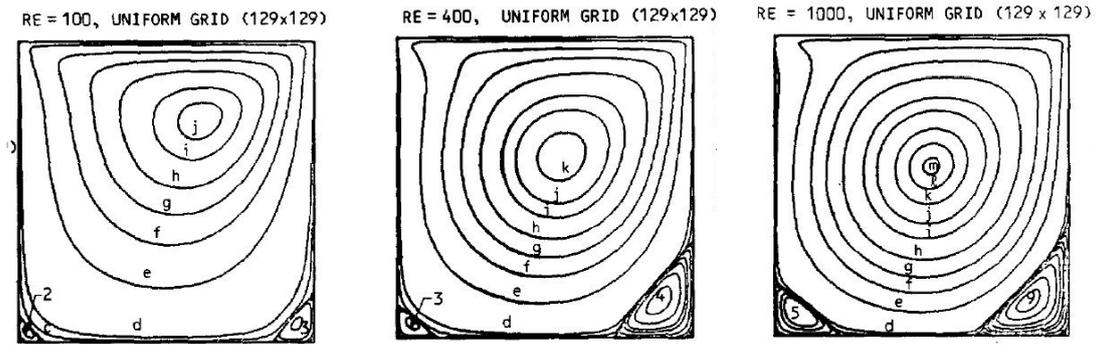
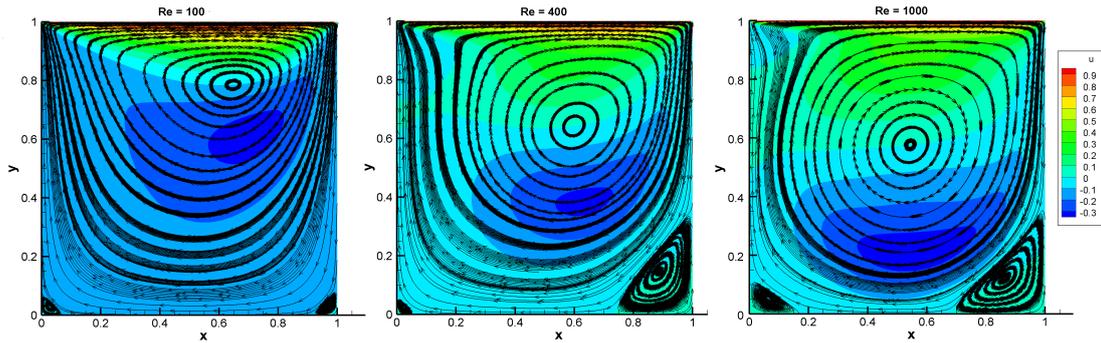


Figura 3.13 – Perfis de velocidade de v gerados para diferentes números de Reynolds.

Comparando-se o formato das curvas, conclui-se que o programa realmente simula de forma satisfatória o escoamento no interior da cavidade. Nota-se que, conforme aumenta-se o tempo de simulação, mais o perfil do gráfico se aproxima da referência. Além disso, notou-se também que, quanto maior o número de Reynolds, maior o tempo de análise necessário para se alcançar o resultado desejado. Por fim, traçou-se os campos de velocidade, com suas respectivas linhas de corrente, e a distribuição da vorticidade. Na Fig. (3.14), tem-se a distribuição das linhas de corrente encontrada por Ghia e a traçada neste trabalho. Analogamente, os resultados da vorticidade são mostrados na Fig.(3.15):

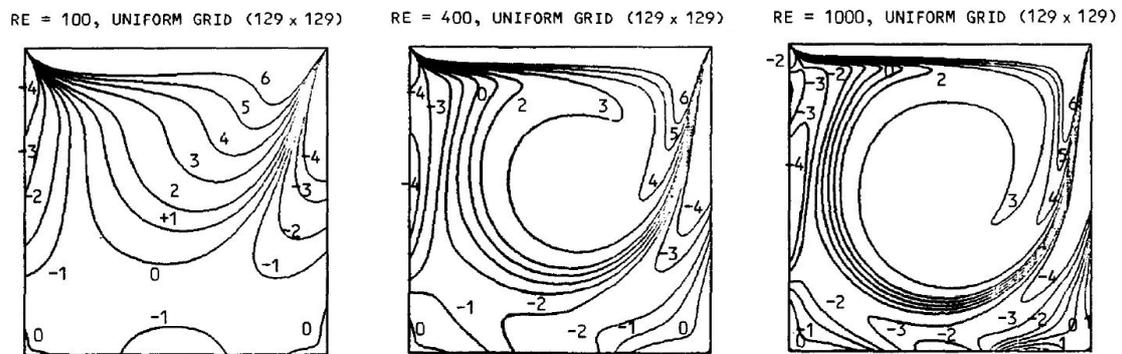


(a) Linhas de corrente de Ghia, Ghia e Shin (1982).

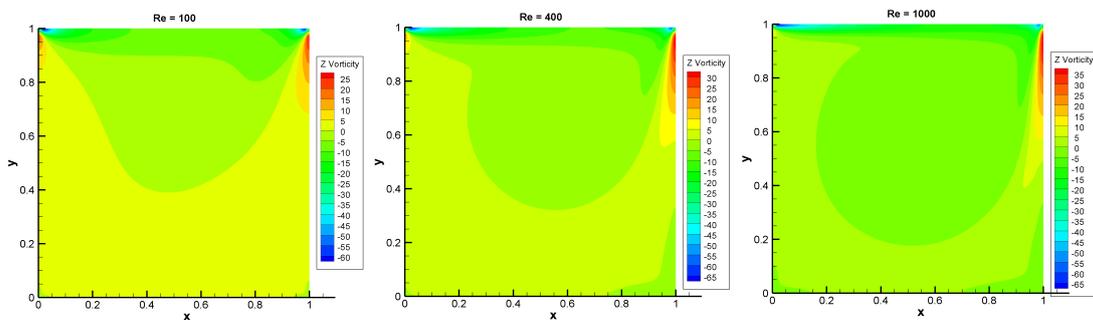


(b) Linhas de corrente obtidas com o programa próprio.

Figura 3.14 – Comparação dos perfis das linhas de corrente obtidos pelo programa e por Ghia, Ghia e Shin (1982).



(a) Contornos de vorticidade de Ghia, Ghia e Shin (1982).



(b) Linhas de vorticidade obtidas com o programa próprio.

Figura 3.15 – Comparação dos perfis de vorticidade obtidos pelo programa e por Ghia, Ghia e Shin (1982).

O padrão dos escoamentos se mostrou idêntico ao do artigo, identifica-se muito bem as duas regiões de recirculação, ou vórtices secundários, que surgem nos cantos inferiores direito e esquerdo da cavidade. Com o aumento no número de Reynolds, nota-se também o aumento do sua intensidade (percebe-se pelo próprio aumento da região, assim como pelo aumento do valor máximo nas escalas de vorticidade da Fig.(3.15)) e o deslocamento do centro do vórtice primário para o meio da malha. Não foi possível observar o surgimento da terceira região de recirculação, localizada na parte superior adjacente à parede esquerda, porque seu surgimento se dá em escoamentos com Re superior a 1000.

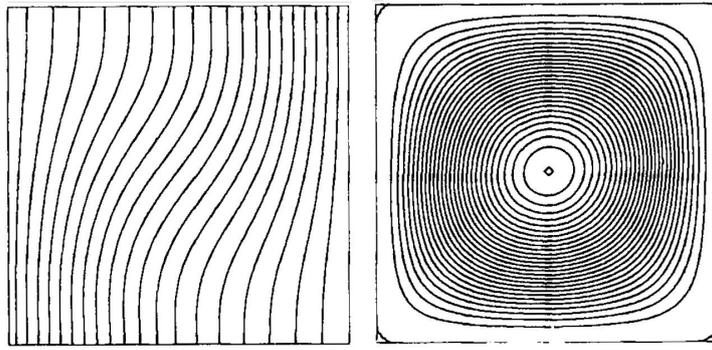
3.2 EQUAÇÃO DA ENERGIA E CONVECÇÃO

3.2.1 Perfis de temperatura e linhas de corrente

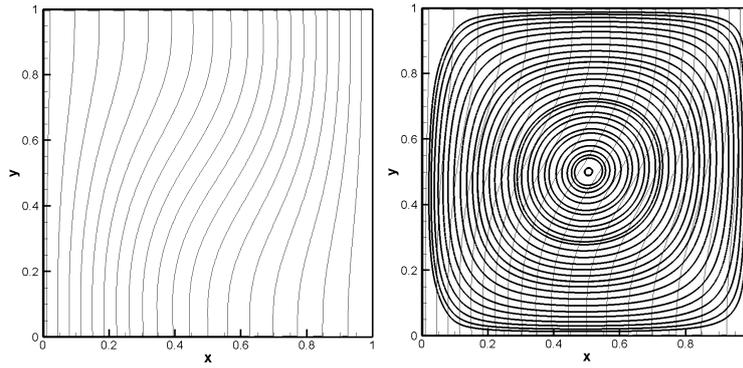
Com o sucesso dos resultados apresentados para o escoamento cisalhante, o passo seguinte foi a implementação e validação da Equação da Energia, por meio da simulação do escoamento na cavidade com paredes laterais a diferentes temperaturas. Para diferentes números de Rayleigh e utilizando um número de Prandtl igual a 0,71 (ar), comparou-se os perfis do campo de temperatura e linhas de corrente gerados com aqueles obtidos por Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994) na sua análise do escoamento laminar.

Nesta segunda etapa do trabalho, algumas variáveis da simulação tiveram que ser alteradas: a malha teve de ser refinada para melhor detalhamento da região adjacente à parede, onde existem gradientes intensos de temperatura, passando a ser de 257 x 257 pontos, e o intervalo de tempo dt teve que ser eventualmente reduzido para garantir a convergência numérica, variando da ordem de 10^{-3} até 10^{-5} . Simulou-se o intervalo mínimo necessário para se alcançar o regime permanente, que é o momento em que o gráfico do número de Nusselt pelo tempo se transforma numa reta horizontal e não sofre mais variações, como será demonstrado ainda mais adiante. A cavidade é quadrada e possui lado unitário.

Assim, foram reproduzidas exatamente as mesmas simulações do artigo de Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994) para números de Rayleigh iguais a 10^3 , 10^4 , 10^5 e 10^6 . As comparações são feitas nas Figs. (3.16) a (3.19).

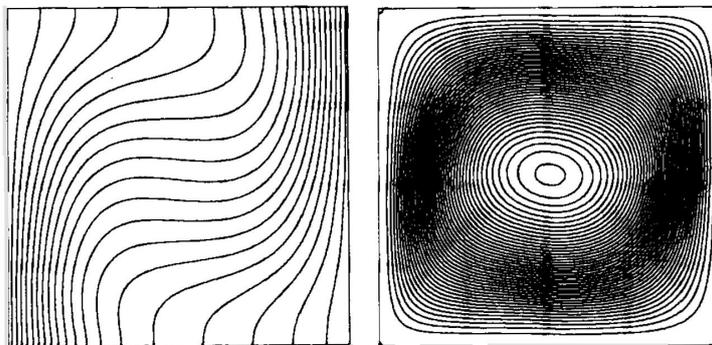


(a) Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).

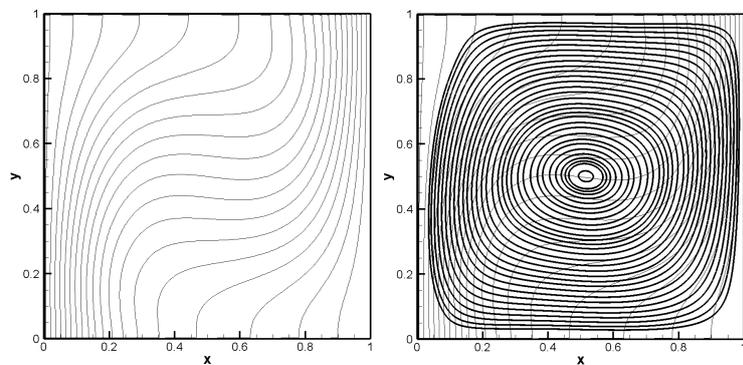


(b) Resultados obtidos.

Figura 3.16 – Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^3$.

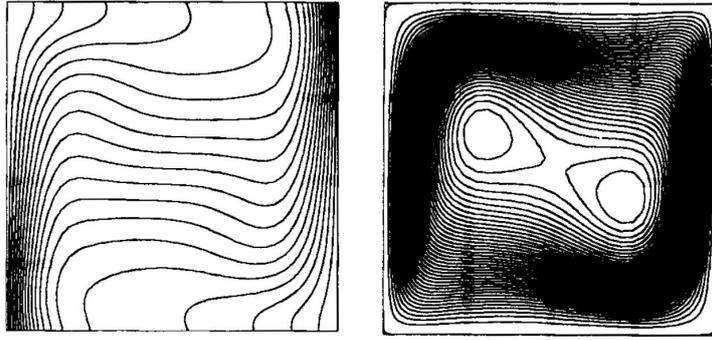


(a) Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).

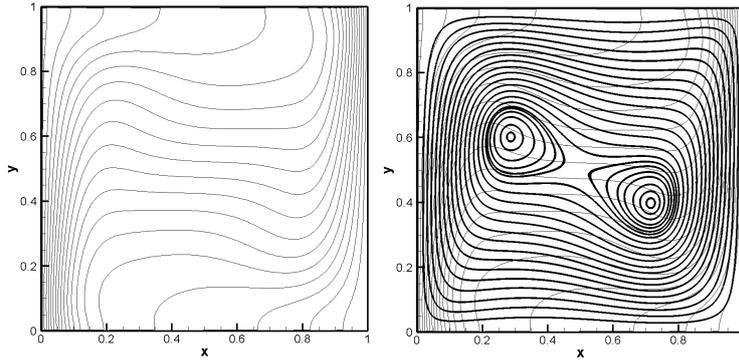


(b) Resultados obtidos.

Figura 3.17 – Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^4$.

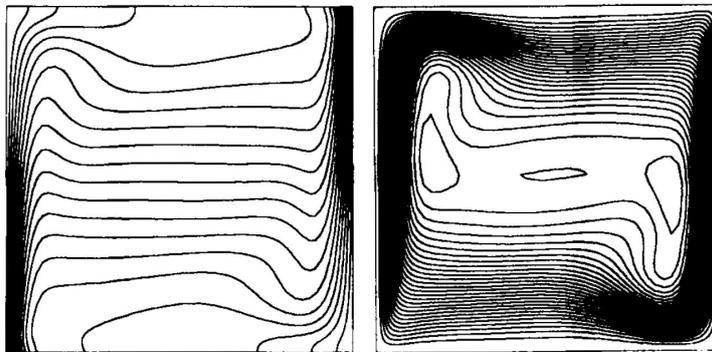


(a) Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).

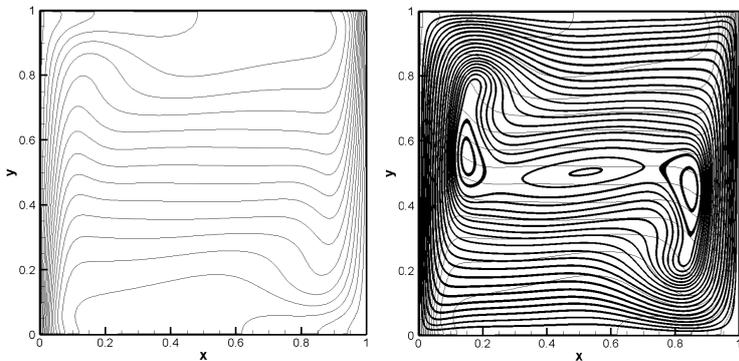


(b) Resultados obtidos.

Figura 3.18 – Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^5$.



(a) Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994).



(b) Resultados obtidos.

Figura 3.19 – Campo de temperatura e linhas de corrente para $Ra = 10^6$.

Pela evolução das figuras, é notável a mudança sofrida pelo mecanismo de troca de calor com o aumento do número de Rayleigh. Para $Ra = 10^3$, as isothermas são verticais e praticamente paralelas, indicando um modo de transferência de calor essencialmente difusivo e dominado pela condução. Quando Rayleigh cresce, elas se tornam horizontais no meio da cavidade (na região chamada de "core", ou núcleo), mas permanecem verticais perto das laterais, formando uma região que se aproxima cada vez mais de uma camada limite térmica. Observando ainda as linhas de corrente, percebe-se que o fluido agora sofre a influência de uma corrente convectiva que o conduz para cima na região da parede quente (menor densidade) e para baixo na região da parede fria (maior densidade). A similaridade das imagens dá a entender que a equação funciona perfeitamente bem, mas só isso ainda não é suficiente para atestar sua validade.

3.2.2 Número de Nusselt

Apesar do campo de temperatura e das linhas de corrente terem ficado praticamente iguais às referências encontradas, só é possível ter certeza que os valores obtidos para as variáveis estão condizentes com a realidade por meio do cálculo do número de Nusselt (Nu), que representa o gradiente adimensional de temperatura na parede e, em última instância, permite a determinação de um coeficiente de troca de calor por convecção ou uma condutividade térmica efetiva. Para verificar a validade dos números calculados, utilizou-se como referência a Tabela III do artigo de Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994), que traz um resumo dos resultados obtidos numericamente por outros artigos, e também a fórmula empírica para convecção natural em espaços fechados retangulares verticais recomendada por Berkovsky e Polevikov (1977).

Utilizando a Eq.(2.80) apresentada na metodologia, gera-se um gráfico do número de Nusselt médio, calculado na parede quente, em função do tempo transcorrido. Quando essa curva se torna uma reta horizontal e não sofre mais mudanças, ou seja, o número permanece constante, o regime permanente é atingido e temos o valor final procurado. Na Figura (3.20), os gráficos obtidos.

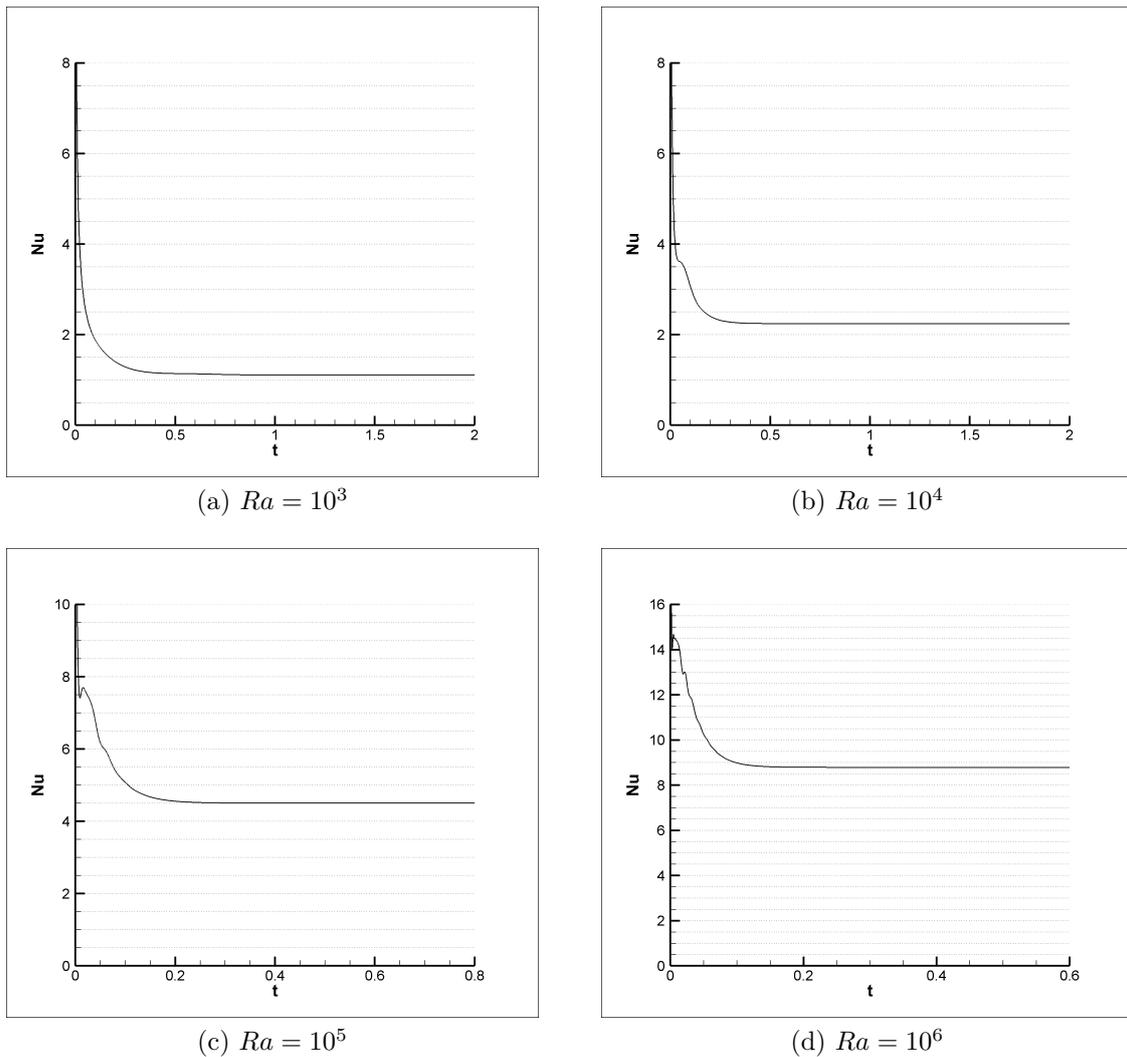


Figura 3.20 – Gráficos do número de Nusselt, na parede quente, para diferentes números de Rayleigh.

E, na Tabela (3.1), os valores próprios retirados das curvas, juntamente com as referências da Tabela III de Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994):

Tabela 3.1 – Números de Nusselt.

Rayleigh	Markatos e Pericleous (1984)	De Vahl Davis (1986)	Fusegi et al. (1991)	Barakos et al. (1994)	Este trabalho	Erro relativo
10^3	1,108	1,118	1,105	1,114	1,116	0,3%
10^4	2,201	2,243	2,302	2,245	2,246	0,08%
10^5	4,430	4,519	4,646	4,510	4,508	0,4%
10^6	8,754	8,799	9,012	8,806	8,794	0,6%

Comparando-se os valores obtidos e, dada a baixa magnitude dos erros relativos à média dos resultados das referências, chega-se a conclusão que o programa está funcionando como esperado. Porém, por via das dúvidas, decidiu-se compará-los com mais uma fonte de referência. Berkovsky e Polevikov (1977) sugerem a seguinte fórmula empírica

para cálculo do número de Nusselt em cavidades fechadas, retangulares e verticais com razão de aspecto entre 1 e 2:

$$Nu = 0,18 \left(\frac{Pr}{0,2 + Pr} Ra \right)^{0,29} \quad (3.2)$$

Com a ressalva de que a seguinte desigualdade seja satisfeita:

$$Ra \frac{Pr}{0,2 + Pr} > 10^3 \quad (3.3)$$

Nessa lógica, usando a Eq.(3.2) e o programa, desta vez calculou-se o Nusselt para valores de Rayleigh iguais a $5 \cdot 10^3$, $1 \cdot 10^4$, $5 \cdot 10^4$, $1 \cdot 10^5$, $5 \cdot 10^5$ e $1 \cdot 10^6$. Os resultados obtidos com cada ferramenta são resumidos na Tabela (3.2) e na Fig.(3.21).

Tabela 3.2 – Números de Nusselt calculados por meio do programa e da fórmula empírica fornecida por Berkovsky e Polevikov (1977).

Rayleigh	$Nu_{programa}$	$Nu_{empírico}$
$5 \cdot 10^3$	1,79	1,98
$1 \cdot 10^4$	2,25	2,42
$5 \cdot 10^4$	3,66	3,86
$1 \cdot 10^5$	4,51	4,72
$5 \cdot 10^5$	7,23	7,53
$1 \cdot 10^6$	8,79	9,20

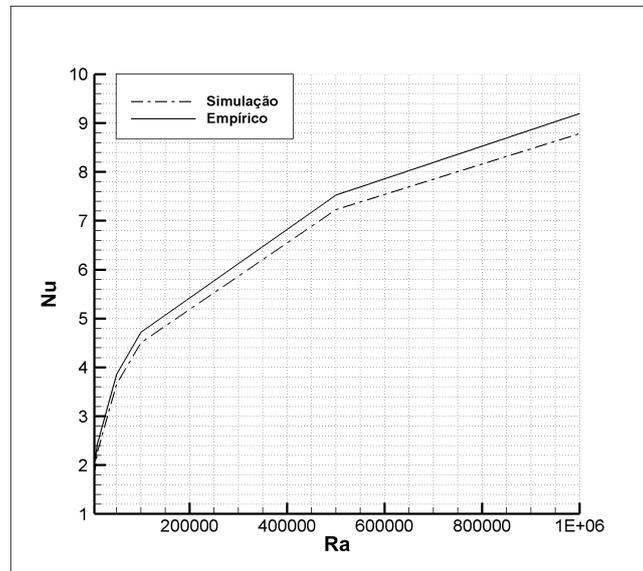


Figura 3.21 – Curvas dos números de Nusselt, obtidos na simulação e usando a fórmula empírica de Berkovsky e Polevikov (1977), em função do número de Rayleigh.

Nota-se, aqui, que os valores obtidos são bastantes similares, sendo que aqueles calculados por meio da equação são sempre um pouco maiores que aqueles calculados

com a simulação. Provavelmente essa diferença se dá exatamente pelo fato da fórmula ter sido desenvolvida por meio de experimentos reais, enquanto a simulação apenas imita a realidade, e pelas condições do programa (cavidade quadrada, por exemplo, de razão de aspecto igual a 1) estarem no limite de alcance da mesma. De qualquer forma, os resultados são considerados satisfatórios o suficiente para se passar para a etapa seguinte do projeto, a inserção da gota no escoamento.

3.3 MISTURA BIFÁSICA

Até agora, confirmou-se a validade da equação de Navier-Stokes, com a simulação do escoamento cisalhante, da Equação da Energia, com a simulação da convecção natural na cavidade e agora transforma-se o fluido uniforme em uma mistura bifásica colocando uma gota em seu interior.

Nesta seção serão estudados quatro casos diferentes, para um mesmo número de Rayleigh, variando o número de capilaridade e a razão de viscosidade, tem-se um caso de gota "mole" e um caso de gota "dura" para uma razão de viscosidade unitária (mesmo fluido no interior e exterior da gota) e uma gota mole e outra dura para uma razão de viscosidade igual a 5 (fluido no interior da gota 5 vezes mais viscoso que o da fase dispersa). De posse dos resultados dessas simulações, será mostrado como a gota é carregada pelo movimento convectivo do escoamento e como sua presença afeta as trocas de calor; ou seja, como se comporta o gráfico do número de Nusselt pelo tempo quando a gota está junto dele.

3.3.1 Movimento da Gota

Para simulação do escoamento bifásico, a malha utilizada continua sendo de 257×257 , as dimensões da cavidade são as mesmas, o intervalo de tempo dt adotado é de $5 \cdot 10^{-5}$ e o tempo máximo de simulação é 3. O número de Rayleigh foi definido como sendo igual a 10^3 para garantir que a convergência numérica acontecesse e não tomasse muito tempo (maiores números de Rayleigh imporiam uma condição muito restrita para dt). A gota é, no tempo inicial $t = 0$, esférica e posicionada com seu centro na posição $(0, 25, 0, 5)$, possuindo raio igual a $\frac{1}{8}$ do lado da cavidade. O objetivo era esperar tempo suficiente para que o escoamento entrasse em regime estacionário, onde, diferentemente do regime permanente, as variáveis mudam de valor com o tempo. Essas mudanças porém, se repetem de tempos em tempos, criando uma espécie de regime periódico.

Para cada um dos casos, são mostradas figuras contendo a evolução da função de level set (movimento da gota em si) e do campo de flutuação de pressão do escoamento (pressão total menos a hidrostática, obtida diretamente pelo método de projeção), assim como um gráfico da evolução da área da gota em função do tempo (uma medida de erro da simulação). Para se ter certeza de que a level set está funcionando bem, este último

deve apresentar a menor variação possível.

Começaremos com a variação da função distância para a gota mole ($Ca = 1,0$) com razão de viscosidade unitária ($\lambda = 1,0$), dada na Fig.(3.22):

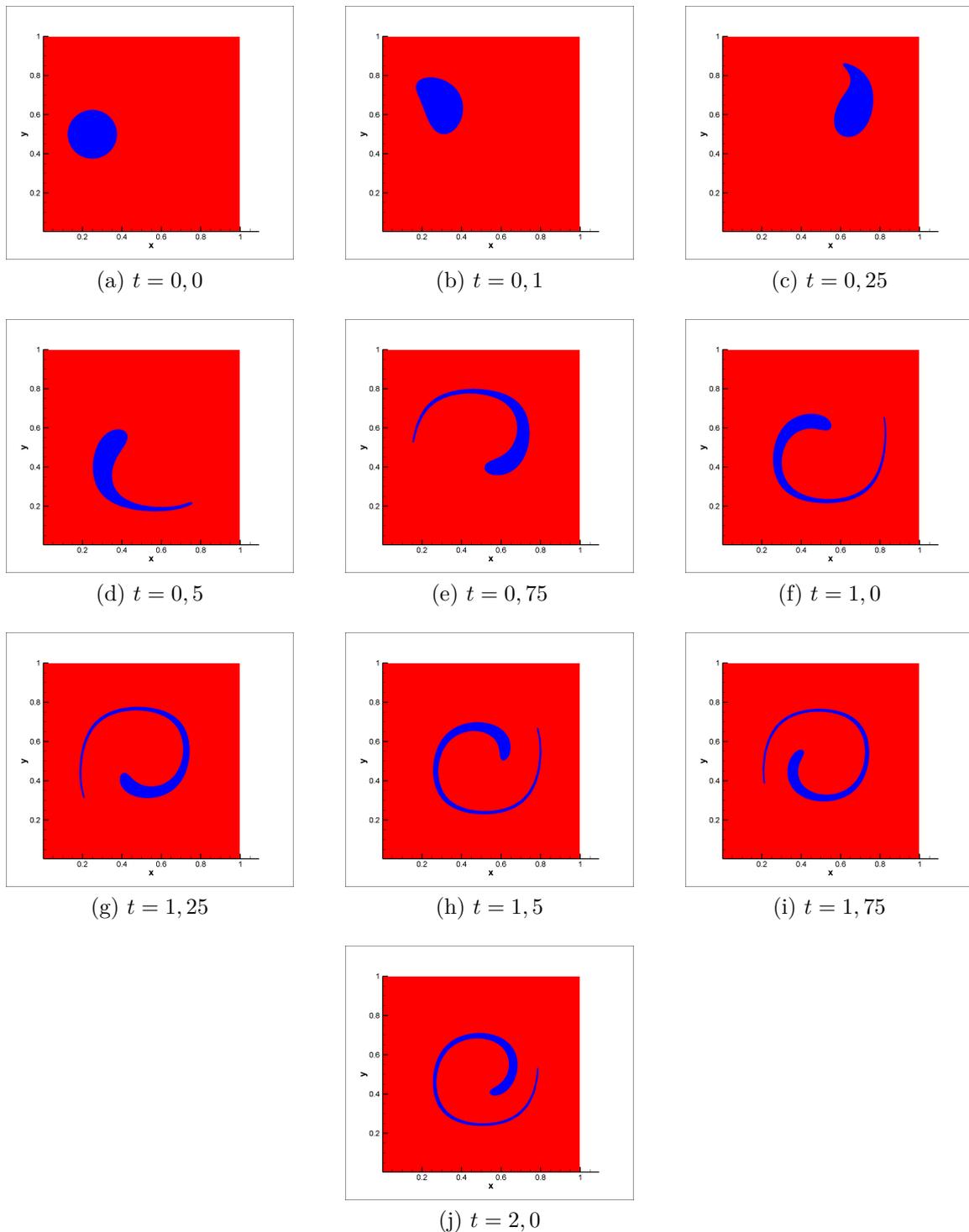


Figura 3.22 – Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$.

A simulação foi até o tempo de 3, mas após mais ou menos 1,5 ela já se encontra em regime estacionário e, conseqüentemente, nada novo acontece a partir daí. Nessa situação, em que as tensões capilares são pequenas em comparação com as tensões de

cisalhamento, e a viscosidade da gota é igual à do fluido ambiente, observa-se que ela se move praticamente acompanhando as linhas de corrente, sem causar modificações significativas no escoamento. Na prática, essa situação aproxima-se de um marcador inerte e o fluido da gota tem papel de um traçador das linhas de trajetória, de forma similar a uma gota de corante em um escoamento cisalhante. Não é esperado que haja alterações perceptíveis no processo de transferência de calor, dado que a ação da gota no escoamento é praticamente nula. Na Fig.(3.23), a variação da flutuação de pressão do escoamento:

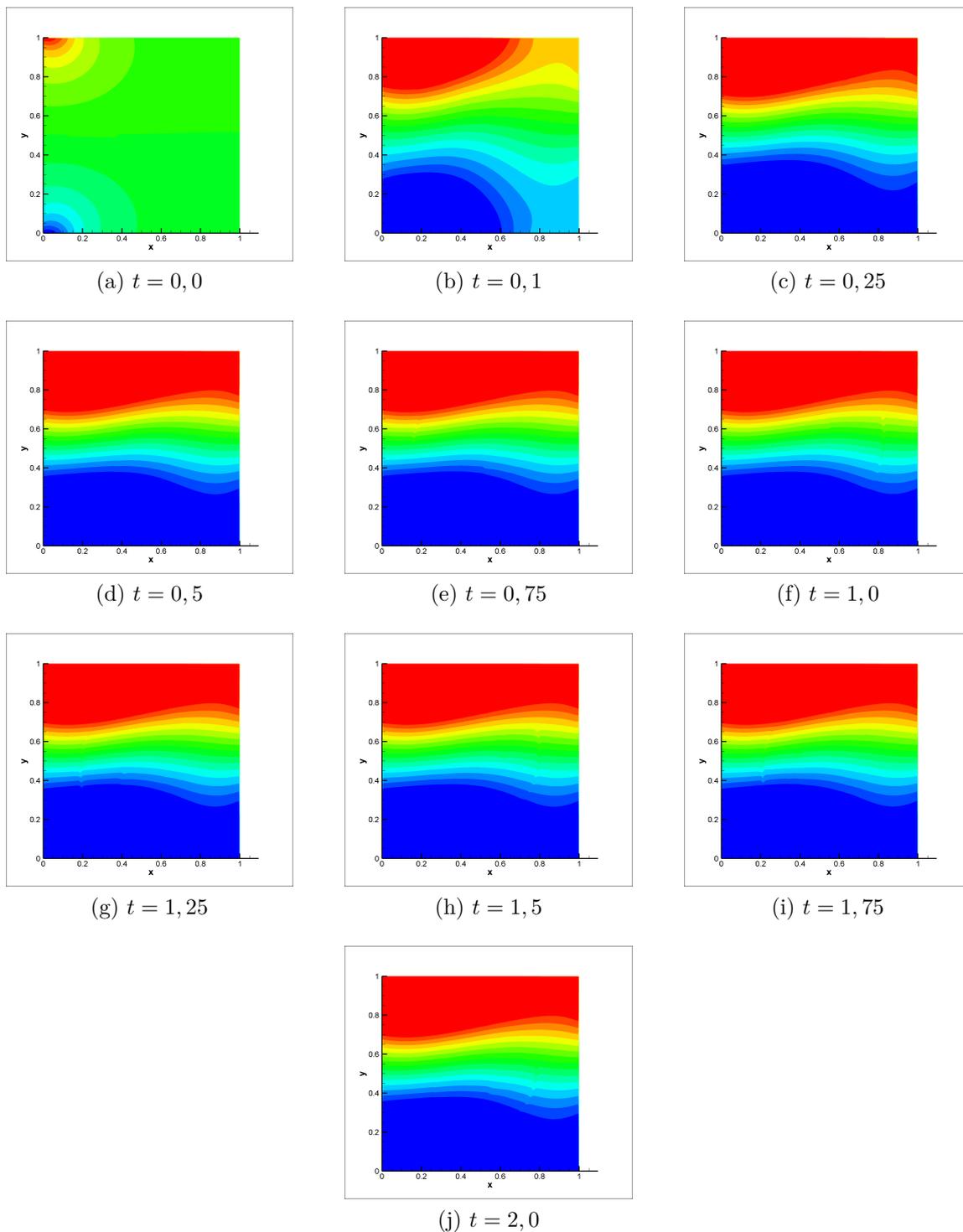


Figura 3.23 – Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$.

De fato, a gota é tão mole que quase não é percebida pelo escoamento ao redor. Sua presença gera apenas pequenas perturbações que aparecem como ondulações nas linhas de isopressão. O gráfico da área da gota em função do tempo (Fig.3.24) mostra uma grande mudança nessa propriedade:

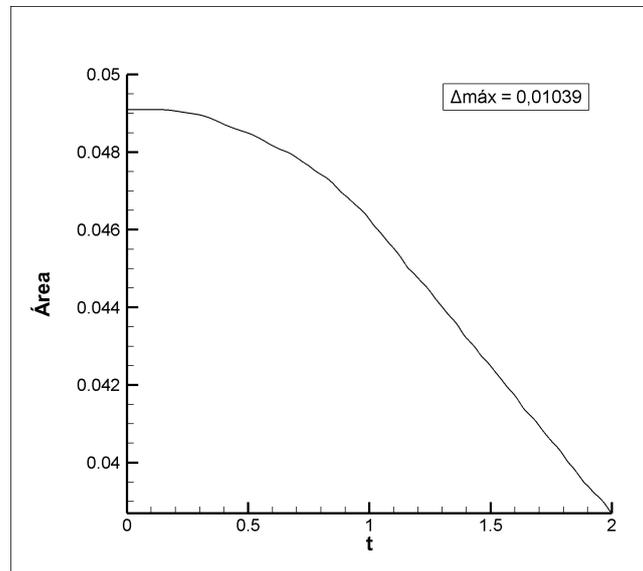


Figura 3.24 – Variação da área da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$

É verificada uma variação de área de aproximadamente 21% ao longo da simulação. Para reduzir isso é preciso refinar a malha, diminuir o intervalo de tempo dt , e, eventualmente, utilizar alguma técnica numérica para forçar a conservação da área artificialmente. Dado que o escoamento é incompressível, a gota não deveria perder nada da sua massa. No entanto, a preocupação é amenizada pelo fato de que essa configuração, em especial, não provoca alterações no escoamento e não há necessidade de realizar simulações altamente acuradas nesta aplicação.

Mantendo-se o número de capilaridade, aumenta-se agora a razão de viscosidade para 5, ou seja, o fluido no interior da nova gota é cinco vezes mais viscoso que o fluido da fase uniforme. Tem-se, na Fig.(3.25), o seu formato durante o primeiro período de rotação na cavidade, possível de se ver claramente em uma só figura por causa da conservação do mesmo; e, na Fig.(3.26), o movimento descrito por ela, novamente, do tempo inicial 0 até 2:

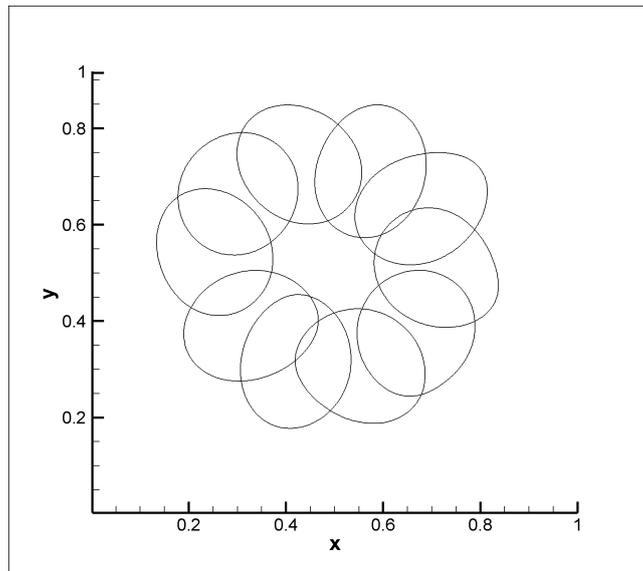


Figura 3.25 – Um período da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$

Agora o efeito sua presença já é mais notada pelo escoamento, como pode se observar na Fig.(3.27). As ondulações nas linhas de isopressão são bem maiores e chega-se a ver mais ou menos o formato da interface quando ela atravessa certas regiões da cavidade.

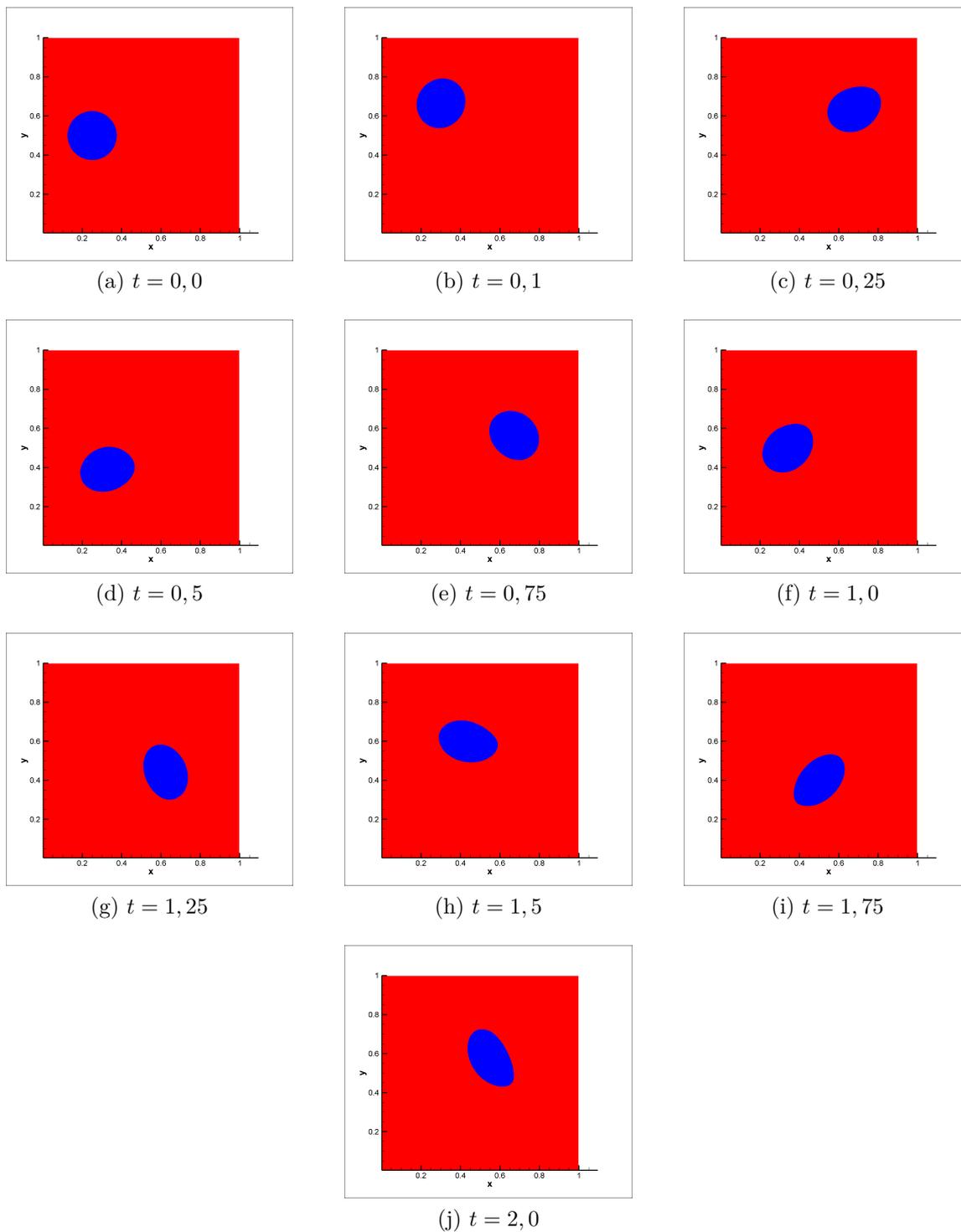


Figura 3.26 – Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$.

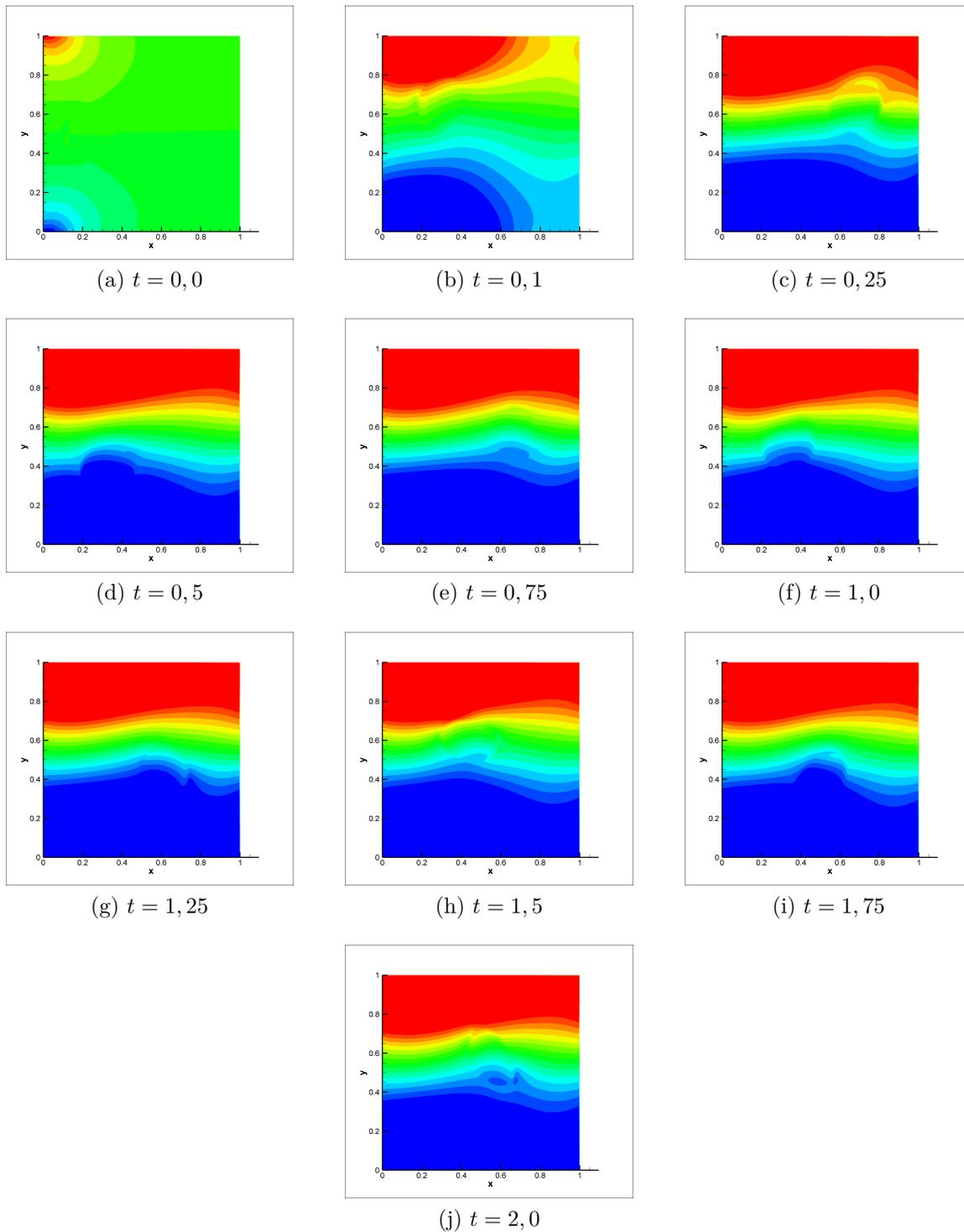


Figura 3.27 – Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$.

Conclui-se então, das últimas duas análises, que o aumento da razão de viscosidade torna a gota muito mais robusta. Ela parte de uma situação de grande deformação e quase rompimento, onde ela se torna irreconhecível, para um cenário de deformações muito mais razoáveis, preservando em grande parte sua forma esférica e sofrendo apenas um achatamento. Tal fato é confirmado ainda pelo gráfico da variação da sua área pelo tempo (Fig.3.28), que mostra uma variação bem mais baixa, de apenas 0,7%:

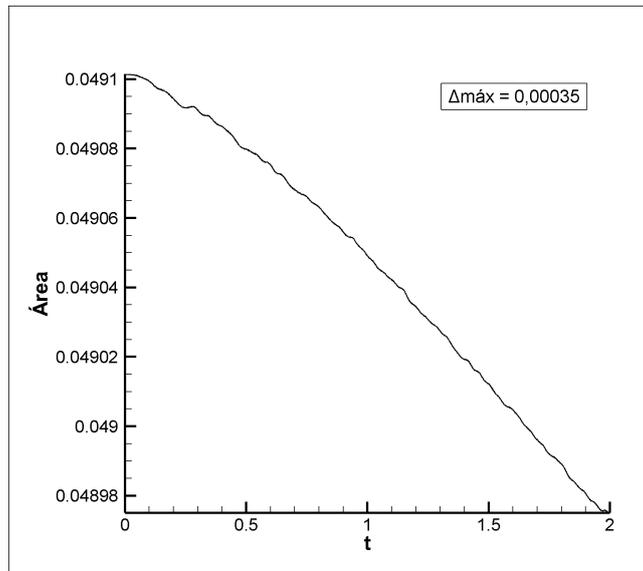


Figura 3.28 – Variação da área da gota de $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$.

Nesta parte seguinte deseja-se estudar o comportamento da gota dura, com maior coeficiente de tensão superficial e de número de capilaridade igual a 0,01 (cem vezes menor que os casos anteriores). Primeiramente, a razão de viscosidade será fixada novamente em 1 e representa-se um período dela na Fig.(3.29):

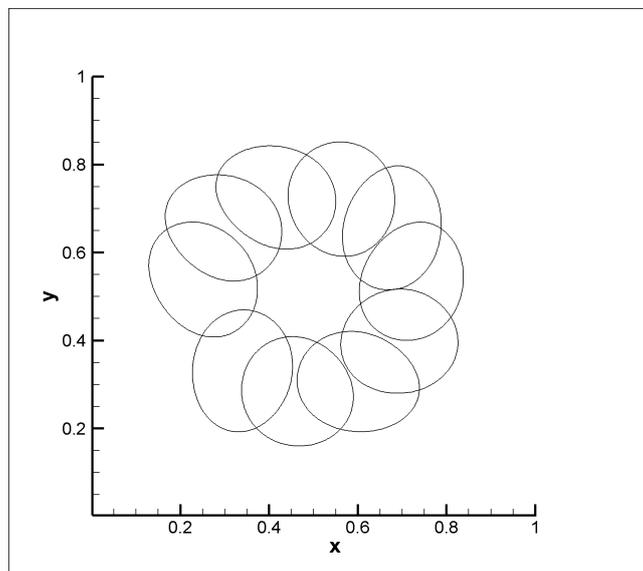


Figura 3.29 – Um período da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$

E seu movimento na cavidade:

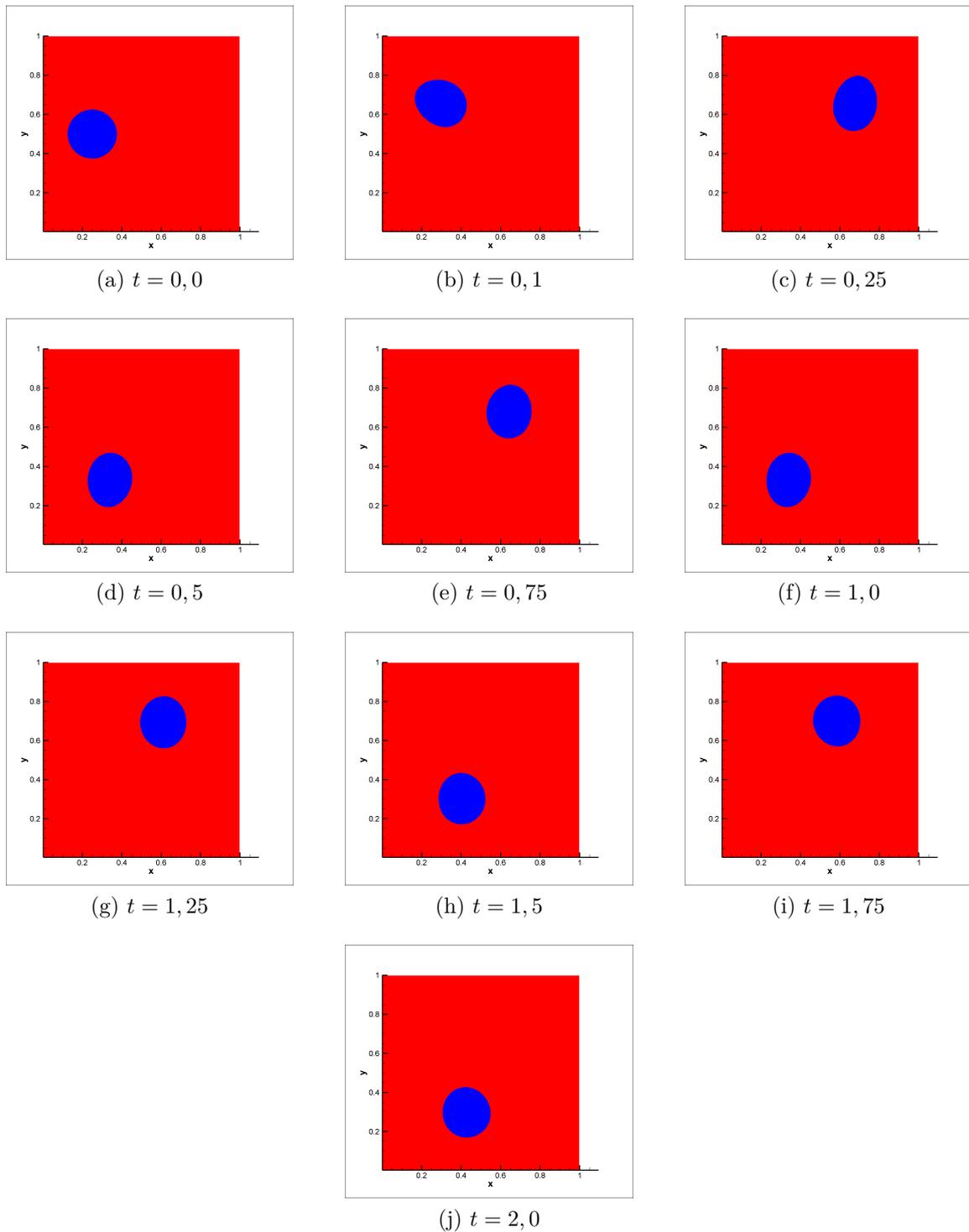


Figura 3.30 – Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$.

Com a capilaridade menor, apesar das viscosidades serem iguais, a gota preserva muito bem o seu formato esférico, ainda melhor do que quando aumenta-se a razão de viscosidade. Ela mal chega a sofrer achatamento. Além disso, pela Fig.(3.31), já é possível ver perfeitamente bem seu formato no campo de pressão do escoamento:

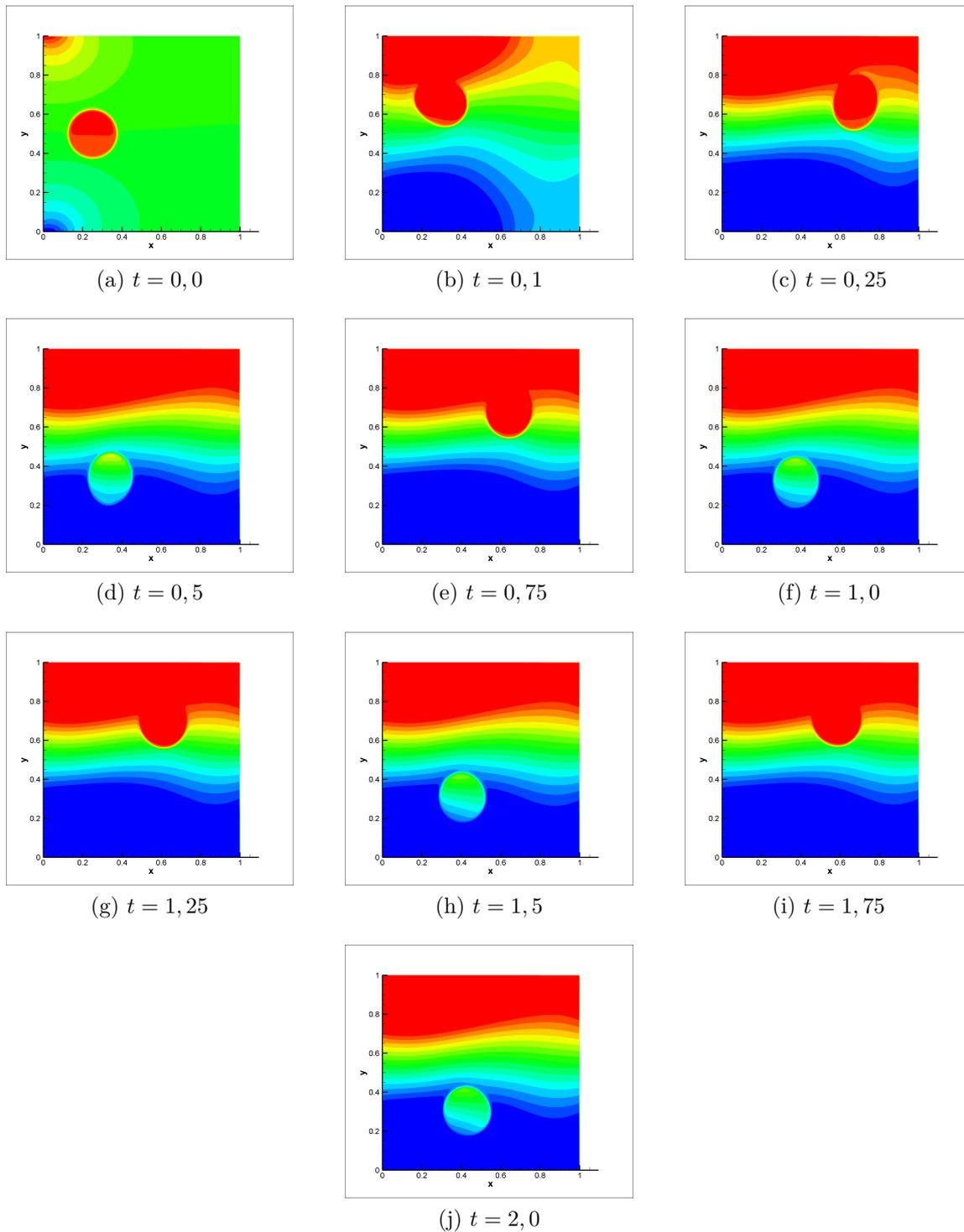


Figura 3.31 – Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$.

Assim como a variação da sua área no tempo (Fig. 3.32), de apenas 0,18%. Agora, a gota sofre um aumento (apesar de muito pequeno) ao invés de uma diminuição, como nos casos anteriores:

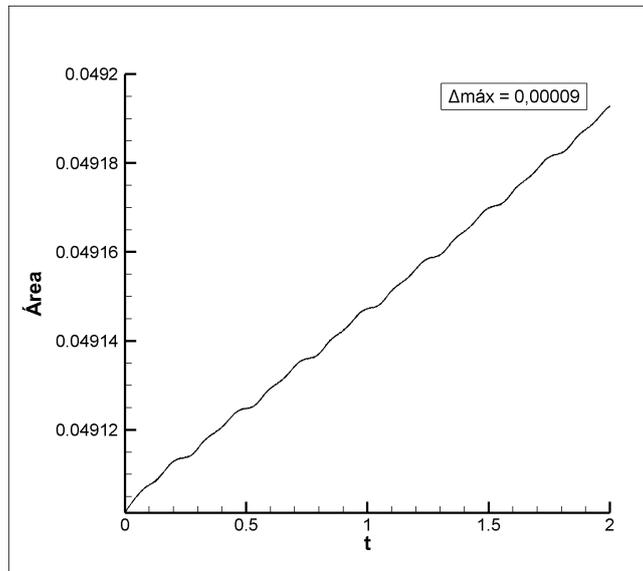


Figura 3.32 – Variação da área da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$.

Para a última análise, manteve-se a capilaridade baixa e aumentou-se novamente a razão de viscosidade para 5. Assim, espera-se que essa gota seja a mais robusta de todas, apresentando menores deformações, afetando mais fortemente o campo de pressão do escoamento convectivo e as trocas de calor no interior da cavidade. Seu primeiro período é mostrado na Fig.(3.33) e seu movimento na Fig.(3.34):

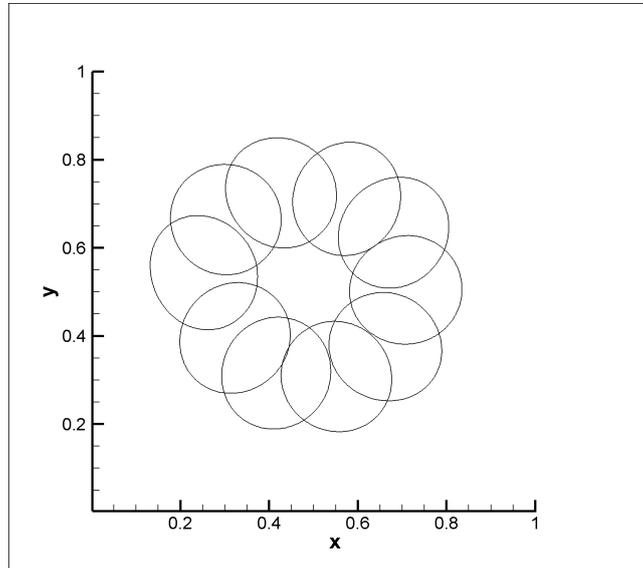


Figura 3.33 – Um período da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$

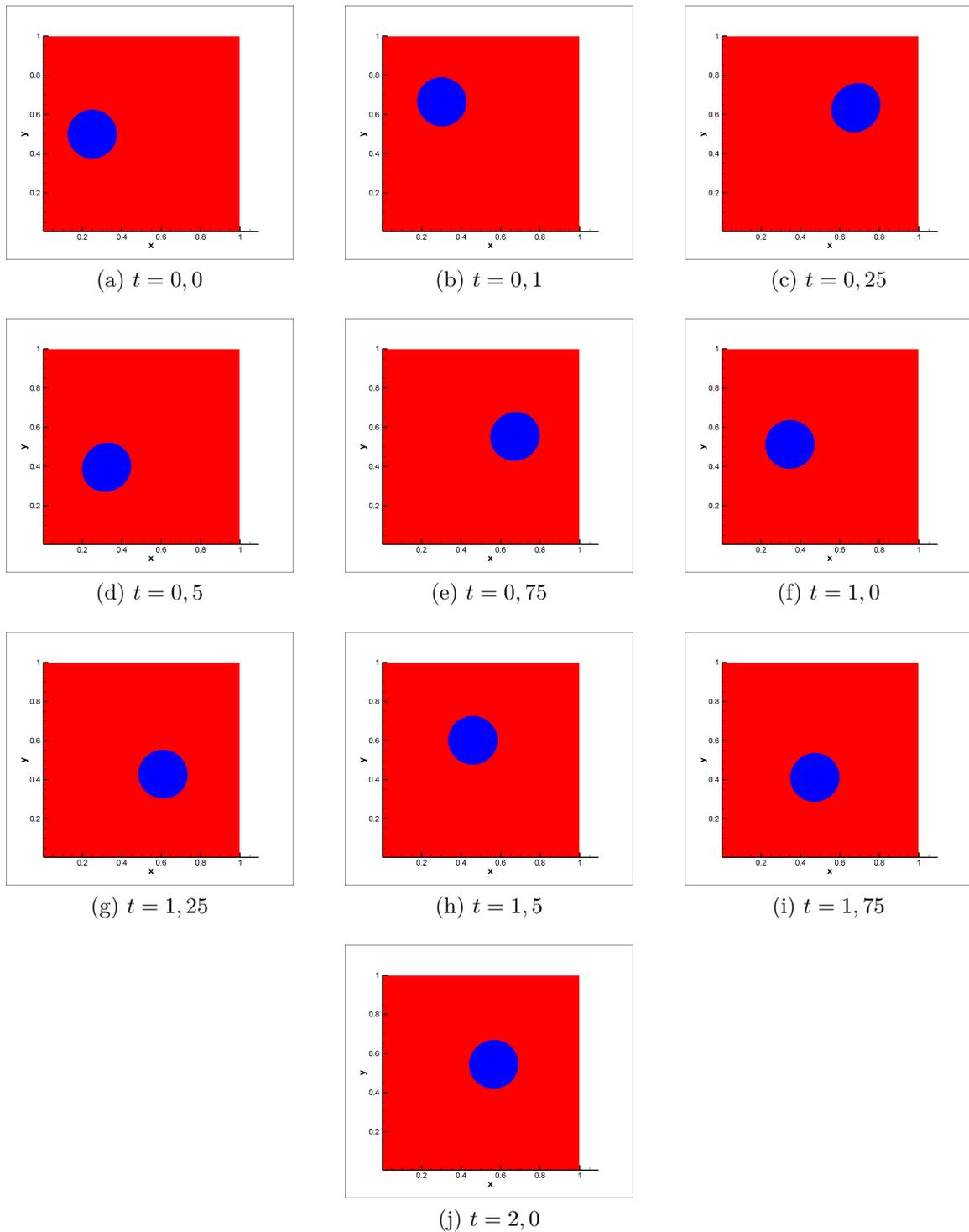


Figura 3.34 – Evolução da função level set: movimento da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$.

De longe, essa é a gota que mais conservou seu formato esférico, exatamente como previsto. É interessante notar que, apesar das mudanças nas propriedades, todas as diferentes gotas percorrem mais ou menos a mesma região no interior da cavidade quando carregadas pela convecção; ou seja, observando os mesmos tempos de análise, a interface está sempre na mesma posição, acompanhando de uma forma ou de outra as linhas de corrente do escoamento. Na Fig.(3.35), tem-se a distribuição da pressão:

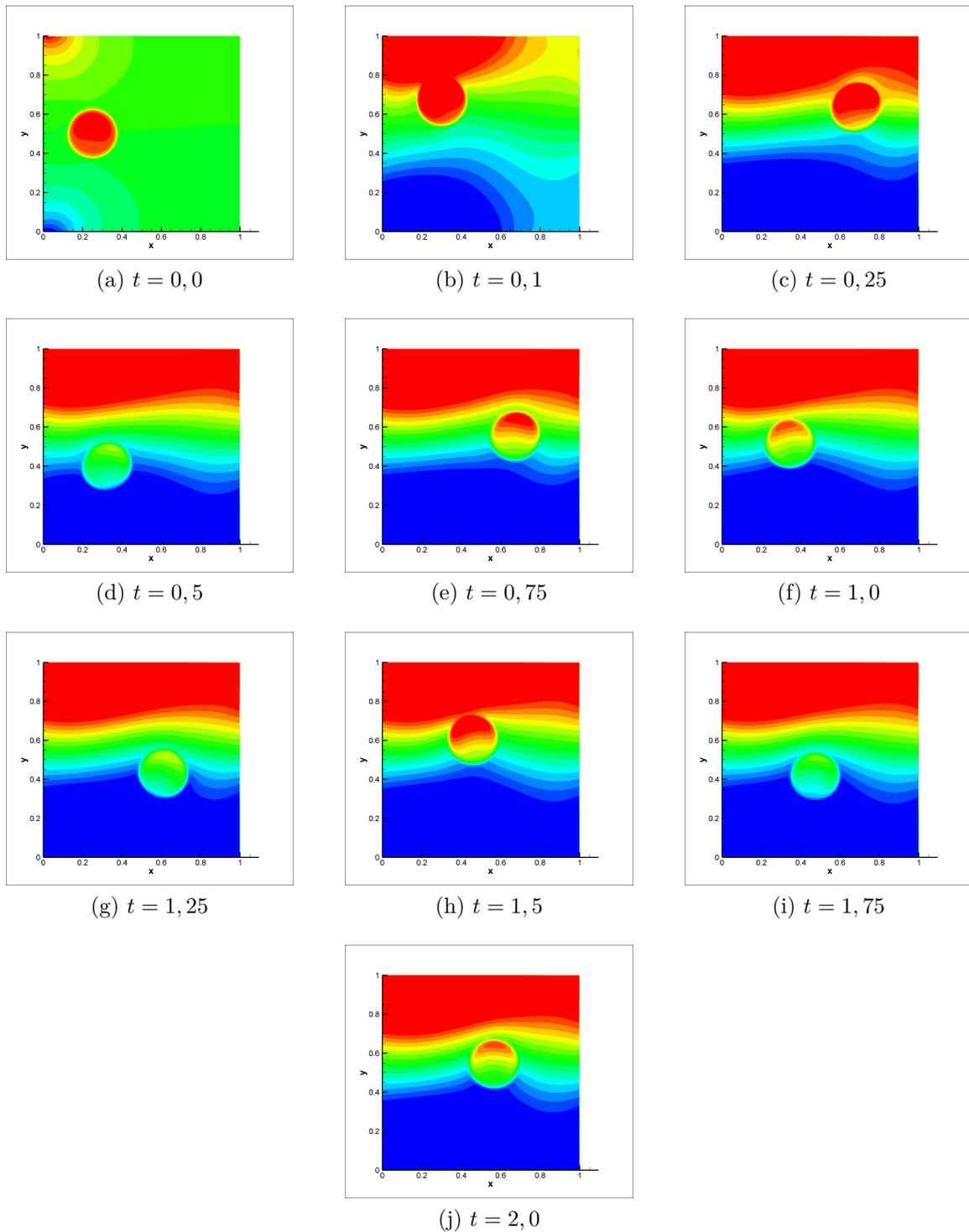


Figura 3.35 – Evolução do campo de pressão: escoamento com gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$.

Mais uma vez, a gota se destaca fortemente do fluido ao redor, pela diferença de pressão gerada na interface. Por último, o gráfico da variação da sua área, Fig.(3.36), resultando na menor variação encontrada, 0,016%:

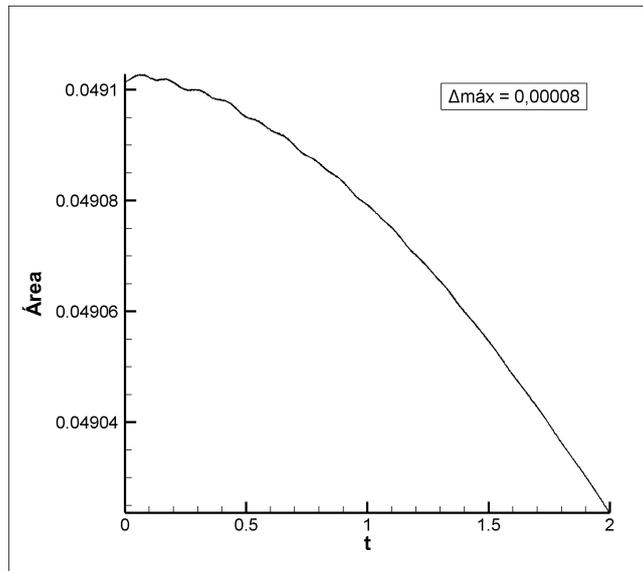
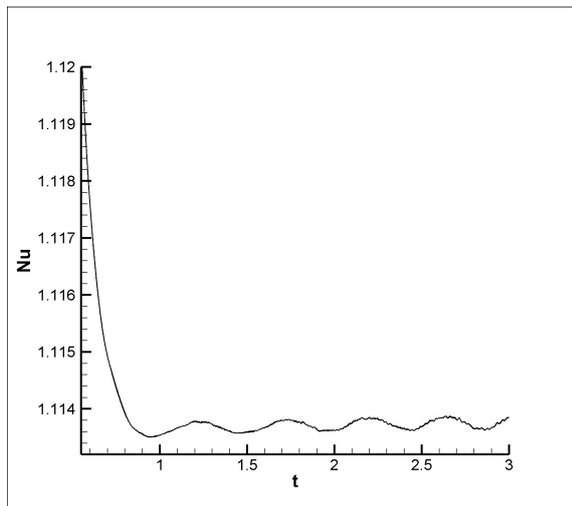


Figura 3.36 – Variação da área da gota de $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$.

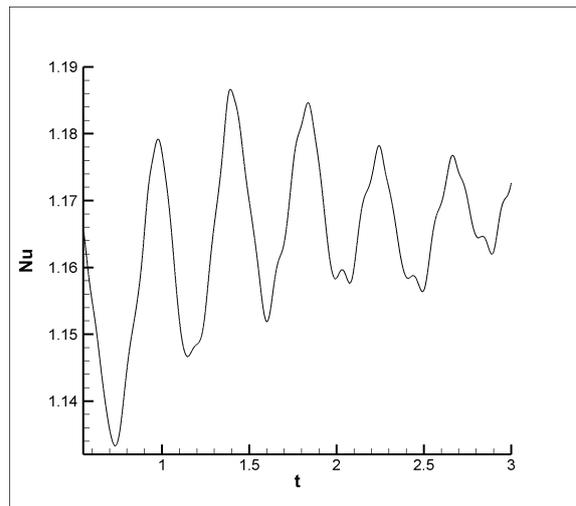
Não existe nenhum estudo igual a este na literatura para ser usado como referência e ter-se uma validação real. Porém, física- e matematicamente falando, os resultados gerados foram bem condizentes com o que se esperava para esta etapa do trabalho. No relatório não é possível observar muito bem o movimento das gotas, mas esta parte será tratada de forma mais clara durante a apresentação oral. Agora, resta apenas a análise do gráfico do número de Nusselt pelo tempo, para cada um dos casos, pra ver se a gota influencia de alguma forma os fenômenos de troca de calor.

3.3.2 Influência no número de Nusselt

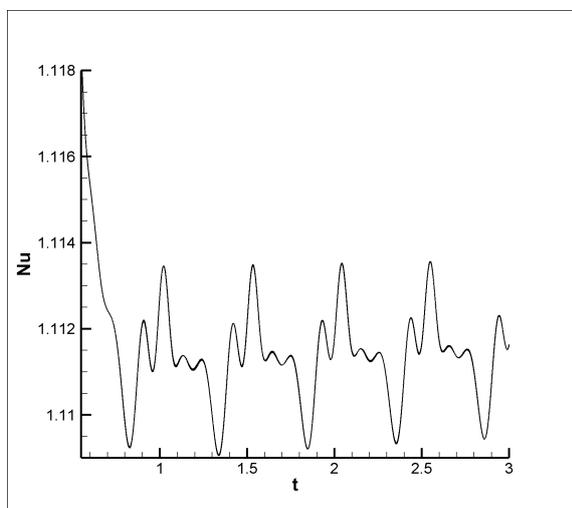
Para saber como, e se, as trocas de calor no interior da cavidade são afetadas pela presença da interface, traçou-se novamente os gráficos da variação do número de Nusselt com o passar do tempo na região da parede quente. Tendo como referência o do escoamento uniforme com $Pr = 0,71$ e $Ra = 10^3$, Fig.(3.20), são criadas e apresentadas, na Fig.(3.37), as curvas relativas a cada um dos casos apresentados na subseção anterior:



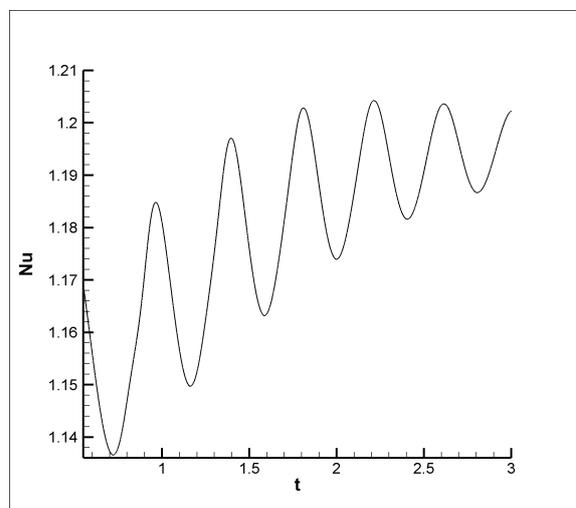
(a) $Ca = 1,0$ e $\lambda = 1,0$



(b) $Ca = 1,0$ e $\lambda = 5,0$



(c) $Ca = 0,01$ e $\lambda = 1,0$



(d) $Ca = 0,01$ e $\lambda = 5,0$

Figura 3.37 – Número de Nusselt na parede quente para a mistura bifásica.

Olhando em uma escala macro, os gráficos pareceram ser exatamente iguais ao do fluido uniforme. Porém, ao utilizar-se uma escala mais refinada, foi possível ver claramente que cada tipo de gota entrou em um regime estacionário diferente. Logo nota-se que as gotas com viscosidade igual à do fluido causam um efeito mais periódico na mudança de Nusselt, provavelmente porque elas são carregadas e acompanham bem as linhas de corrente, mantendo o número médio bem próximo ao do escoamento uniforme ($= 1,116$). As gotas mais viscosas, por sua vez, geram uma variação que diminui gradualmente de amplitude, mas leva o Nusselt médio para valores mais altos, consequência das perturbações mais intensas sentidas pelo escoamento.

O aumento ou diminuição da tensão superficial, relacionada ao número de capilaridade, é sentido mais fortemente pela gota menos viscosa, tendo uma influência mais fraca sobre a gota mais viscosa por já ser naturalmente mais robusta. Nas imagens é possível ver ainda os momentos onde as gotas de maior capilaridade começam a sofrer grandes deformações: a curva, que vem seguindo um caminho mais ou menos uniforme, de repente

descreve oscilações menores e mais agudas.

Pelo fato da gota ter as mesmas propriedades térmicas que o fluido ao seu redor, já era de se esperar que as variações no número de Nusselt não fossem tão expressivas. A interface atua simplesmente como um obstáculo a ser superado pelo escoamento em volta. Variando as propriedades deste obstáculo, ele se torna apenas mais fácil ou difícil de ser transposto pela onda de calor. Sendo assim, os resultados obtidos fazem perfeito sentido.

4 CONCLUSÕES

Considerando o objetivo geral e os objetivos específicos propostos no início deste projeto, é seguro dizer que todos eles foram alcançados e que os resultados gerados estão totalmente de acordo com a literatura disponível. Foi possível se desenvolver um estudo aprofundado e completo dos assuntos que foram aqui tratados, criando uma simulação totalmente própria, com um código de base escrito do zero até se chegar no estudo da convecção natural da mistura bifásica.

A primeira etapa do trabalho consistiu em programar a equação de Navier-Stokes para um fluido incompressível e resolvê-la numericamente, por meio do método de projeção, para um caso considerado simples e tradicional na mecânica dos fluidos, o escoamento cisalhante ("shear driven flow") no interior de uma cavidade quadrada e fechada. Foram gerados gráficos para os perfis de velocidade, das linhas de corrente e da distribuição de vorticidade para diferentes números de Reynolds e, pela comparação dos dados obtidos com os de Ghia, Ghia e Shin (1982), a equação foi validada.

Em seguida, adicionou-se ao programa a Equação da Energia e condições de contorno de temperatura para, a partir da variação do número de Rayleigh, gerar diferentes modos de transferência de calor no fluido uniforme. Para baixos números de Rayleigh, o calor se difunde majoritariamente por condução, mudando gradualmente para um regime de convecção conforme Rayleigh cresce. As linhas de isoterma, que são inicialmente verticais, sofrem desvios e se tornam horizontais no núcleo da cavidade, criando gradientes intensos de temperatura na região adjacente às paredes aquecidas. Os resultados para os campos de temperatura, linhas de corrente e números de Nusselt foram validados utilizando-se como referência o artigo de Barakos, Mitsoulis e Assimacopoulos (1994) e o de Berkovsky e Polevikov (1977).

Por fim, com o uso do método de Level Set e inserção de uma interface com propriedades térmicas iguais às da fase já existente na cavidade, transformou-se o fluido que era, em um primeiro momento, uniforme, em uma mistura bifásica. Mudando as características da gota, capilaridade e razão de viscosidade, estudou-se o movimento descrito por ela quando carregada pelo fluido em convecção ao redor e, por meio do comportamento do campo de flutuação de pressão e das variações do número de Nusselt na parede quente, o efeito causado por sua presença no escoamento e nas trocas de calor.

Referências

- BARAKOS, G.; MITSOULIS, E.; ASSIMACOPOULOS, D. Natural convection flow in a square cavity revisited: Laminar and turbulent models with wall functions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 18, p. 695–719, 1994. Citado 9 vezes nas páginas vi, 3, 7, 48, 49, 50, 51, 52 e 70.
- BASSANO, E. Numerical simulation of thermo-solutal-capillary migration of a dissolving drop in a cavity. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, v. 41, p. 765–788, 2003. Citado na página 8.
- BATCHELOR, G. K. Heat transfer by free convection across a closed cavity between vertical boundaries at different temperatures. *Quart. Appl. Math.*, v. 12, p. 209–233, 1954. Citado 3 vezes nas páginas iv, 6 e 7.
- BEJAN, A. *Convection Heat Transfer*. 4. ed. Hoboken: John Wiley and Sons Inc., 2013. Citado 3 vezes nas páginas iv, 5 e 6.
- BERKOVSKY, B. M.; POLEVIKOV, V. K. Numerical study of problems on high-intensive free convection. p. 443–445, 1977. Citado 6 vezes nas páginas vi, x, 51, 52, 53 e 70.
- BROWN, D. L.; CORTEZ, R.; MINION, M. L. Accurate projection methods for the incompressible navier–stokes equations. *J. of Computational Physics*, v. 168, p. 464–499, 2001. Citado na página 3.
- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Math. Comp.*, v. 22, p. 745–762, 1968. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 16.
- CORMACK, D. E.; LEAL, L. G.; IMBERGER, J. Natural convection in a shallow cavity with differentially heated end walls. part 1. asymptotic theory. *J. Fluid Mechanics*, v. 65, p. 209–229, 1974. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 7.
- CORMACK, D. E.; LEAL, L. G.; SEINFELD, J. H. Natural convection in a shallow cavity with differentially heated end walls. part 2. numerical solutions. *J. Fluid Mechanics*, v. 65, p. 231–246, 1974. Citado na página 7.
- DAVIS, G. D. V. Natural convection of air in a square cavity a bench mark numerical solution. *Int. J. for Numerical Methods in Fluids*, v. 3, p. 249–264, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 7.
- ECKERT, E. R. G.; CARLSON, W. O. Natural convection in an air layer enclosed between two vertical plates with different temperatures. *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 2, p. 106–120, 1961. Citado na página 7.
- ELDER, J. W. Laminar free convection in a vertical slot. *J. Fluid Mechanics*, v. 23, p. 77–98, 1965. Citado na página 6.

- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. ed. [S.l.]: Springer, 2002. Citado na página 13.
- GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. T. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *J. of Computational Physics*, v. 48, p. 387–411, 1982. Citado 6 vezes nas páginas v, 3, 19, 42, 43 e 70.
- GILL, A. E. The boundary-layer regime for convection in a rectangular cavity. *J. Fluid Mechanics*, v. 26, p. 515–536, 1966. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 7.
- KAZUFUMI, I.; ZHONGHUA, Q. A high order compact mac finite difference scheme for the stokes equations: Augmented variable approach. *J. of Computational Physics*, v. 227, p. 8177–8190, 2008. Citado 2 vezes nas páginas iv e 19.
- LEWIS, J. A. *Free Convection in Commercial Insulating Materials*. Tese (Doutorado) — Brown University, Providence, RI, 1950. Citado na página 6.
- OLIVEIRA, A. G. et al. Microemulsões: estrutura e aplicações como sistema de liberação de fármacos. *Quím. Nova*, v. 7, p. 131–138, 2004. Citado na página 4.
- OSHER, S.; FEDKIW, R. P. Level set methods: An overview and some recent results. *J. of Computational Physics*, v. 169, p. 463–502, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.
- OSHER, S.; SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Comput. Phys.*, v. 79, p. 12–49, 1988. Citado na página 25.
- OSTRACH, S. Natural convection in enclosures. *Journal of Heat Transfer*, v. 110, p. 1175–1190, 1988. Citado na página 5.
- PATTERSON, J.; IMBERGER, J. Unsteady natural convection in a rectangular cavity. *J. Fluid Mechanics*, v. 100, p. 65–86, 1980. Citado 3 vezes nas páginas 5, 7 e 8.
- PINHO, J. J. R. G.; STORPIRTIS, S. Formação e estabilidade física de emulsões. *Cosmetics and Toiletries*, v. 10, n. 6, p. 44–56, 1998. Citado na página 4.
- PRISTA, L. N. *Tecnologia farmacêutica*. Lisboa: Fundação Calouste Gulbekian, 1995. v. 1. Citado na página 5.
- ROMANÒ, F.; KUHLMANN, H. C. Numerical investigation of the interaction of a finite-size particle with a tangentially moving boundary. *Int. J. of Heat and Fluid Flow*, v. 62, p. 75–82, 2016. Citado na página 8.
- ROMANÒ, F.; KUHLMANN, H. C. Particle-boundary interaction in a shear-driven cavity flow. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, v. 31, p. 427–445, 2017. Citado na página 8.
- ROMANÒ, F. et al. Limit cycles for the motion of finite-size particles in axisymmetric thermocapillary flows in liquid bridges. *Physics of Fluids*, v. 29, p. 093303, 2017. Citado na página 8.
- SALAC, D.; MIKSIS, M. J. Reynolds number effects on lipid vesicles. *J. Fluid Mechanics*, v. 711, p. 122–146, 2012. Citado na página 20.
- SHEWCHUK, J. R. An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain. *Technical Report*, 1994. Citado 4 vezes nas páginas iv, 31, 32 e 33.

SHI, X.; KHODADADI, J. M. Laminar natural convection heat transfer in a differentially heated square cavity due to a thin fin on the hot wall. *Asme Digital Collection*, v. 125, p. 624–634, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 31.

TRITTON, D. J. *Physical Fluid Dynamics*. 2. ed. Oxford: Oxford University Press Inc., 1988. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.

WEINAN, E.; LIU, J.-G. Projection method iii: Spatial discretization on the staggered grid. *Mathematics of Computation*, v. 237, p. 27–47, 2001. Citado na página 18.

ZHANG, J.; MIKSYS, M. J.; BANKOFF, S. G. Nonlinear dynamics of a two-dimensional viscous drop under shear flow. *Physics of fluids*, v. 18, p. 122–146, 2006. Citado na página 8.