

PROJETO DE GRADUAÇÃO

**ESTUDO NUMÉRICO DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO
ATRAVÉS DE TUBULAÇÕES**

Por,

Marcos Paulo Monteiro Sulczinski

Brasília, Dezembro de 2020

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
Faculdade de Tecnologia
Departamento de Engenharia Mecânica

PROJETO DE GRADUAÇÃO

**ESTUDO NUMÉRICO DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO
ATRAVÉS DE TUBULAÇÕES**

Por,

Marcos Paulo Monteiro Sulczinski

Relatório submetido ao Departamento de Engenharia Mecânica como
requisito parcial para obtenção do grau de Engenheiro Mecânico

Banca Examinadora

Prof. Taygoara Felamingo de Oliveira, ENM/UnB
Orientador

Prof. Rafael Castilho Faria Mendes, LEA/UnB
Examinador interno

Prof. André Von Borries Lopes, ENM/UnB
Examinador interno

RESUMO

O objetivo principal deste projeto foi desenvolver ferramentas numéricas para simular um escoamento multifásico entre duas placas planas paralelas, gerado pela ação de um campo de pressão uniforme. Esse tipo de escoamento é relevante em várias áreas do conhecimento incluindo o transporte de petróleo através de tubulações, escoamentos na indústria de processos químicos, na indústria farmacêutica e no estudo do escoamento de sangue, especialmente em vasos capilares. A metodologia numérica é uma combinação do método de diferenças finitas para a discretização espacial, método de projeção para a simulação das equações de Navier-Stokes em escoamentos incompressíveis e o método de *Level Set* para modelar a presença de gotas no escoamento. Os principais desafios enfrentados ao longo da pesquisa foram o desenvolvimento analítico e a implementação de condições de contorno adequadas para a simulação de um escoamento gerado pela ação de um campo de pressão, porém em domínios em que as seções de entrada e saída do fluido são periódicas e a criação de estruturas de dados que permitissem que gotas no escoamento sejam transportadas através da condição periódica. Essas duas funcionalidades combinadas permitem simular o escoamento multifásico entre placas paralelas ao longo de um trecho virtualmente tão longo quanto se queira (em razão da periodicidade das fronteiras), mas sem a necessidade de empregar domínios computacionais muito longos. Dessa forma, processos como migração de gotas e desenvolvimento de camadas limites de concentração, que podem acontecer ao longo de trechos de tubulação com comprimento mais de uma centena de vezes maior do que o espaçamento entre as placas, podem ser simulados em domínios em que o comprimento é igual (ou mesmo menor) do que dez vezes a distância entre as placas. Ao final do projeto, todos os objetivos inicialmente traçados foram atingidos e uma versão do código pronta para ser empregada na simulação de escoamentos multifásicos entre planas paralelas está disponível para o estudo de problemas como os mencionados anteriormente.

Como ponto de partida, simulou-se o escoamento transiente em uma cavidade com fluxo conduzido pela tampa, conhecido como "*Lid-Driven Cavity Flow*", e comparou-se os resultados com outros encontrados na literatura, de modo a validá-los. Em seguida, adaptou-se a rotina a fim de transformar a cavidade em um canal onde o escoamento possui entrada e saída para, com a utilização de condições de contorno periódicas, simular o escoamento de Hagen-Poiseuille, um escoamento em tubulação fechada circular. Por conseguinte, foi implementado o módulo do escoamento multifásico às simulações utilizando o método *Level Set*, possibilitando a simulação de uma gota em cisalhamento simples, conhecido como "*Simple-Shear*". Por fim, foram aplicadas condições de contorno periódicas com o intuito de promover a transposição de gotas entre superfícies periódicas e permitir a análise do comportamento de gotas dispersas através de tubulações.

Palavras-chaves: Escoamentos Multifásicos, Método de Projeção, Método de Level Set, Método de Diferenças Finitas.

ABSTRACT

The main objective of this project was to develop numerical tools to simulate a multiphase flow between two parallel flat plates, generated by the action of a uniform pressure field. This type of flow is relevant in several areas of knowledge including the transportation of oil through pipes, flows in the chemical process industry, in the pharmaceutical industry and in the study of blood flow, especially in capillaries. The numerical methodology is a combination of the finite difference method for spatial discretization, a projection method for the simulation of Navier-Stokes equations in incompressible flows and the *Level Set* method for modeling the presence of drops in the flow. The main challenges faced during the research were the analytical development and the implementation of suitable boundary conditions for the simulation of a flow generated by the action of a pressure field, however in domains where the fluid inlet and outlet sections are periodic and the creation of data structures that would allow drops in the flow to be carried through the periodic condition. These two functionalities combined allow to simulate the multiphase flow between parallel plates along a stretch virtually as long as desired (due to the periodicity of the borders), but without the need to employ very long computational domains. In this way, processes such as migration of droplets and the development of concentration limit layers, which can occur along stretches of pipe more than a hundred times greater than the spacing between the plates, can be simulated in domains where length is equal (or even less) than ten times the distance between the plates. At the end of the project, all the objectives initially set were achieved and a version of the code ready to be used in the simulation of multiphase flows between parallel planes is available for the study of problems such as those mentioned above.

As a starting point, the transient flow in a cavity with transient flow by the lid, known as "*Lid-Driven Cavity Flow*", was simulated, and the results were compared with others found in the literature, in order to validate. Then, adapt the routine in order to transform the cavity into a channel where the flow has inlet and outlet to, with the use of periodic boundary conditions, simulate the flow of Hagen-Poiseuille, a flow in closed circular pipe. Therefore, the module of the multiphase flow to the simulations was implemented using the *Level Set* method, allowing the simulation of a single shear drop, known as "*Simple-Shear*". Finally, periodic boundary conditions were applied to promote the transposition of droplets between the periodic surfaces and to allow the analysis of the behavior of dispersed droplets through pipes.

Key-words: Multiphase Flow, Projection Method, Level Set Method, Finite Difference Method.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Padrões de escoamento horizontal e vertical comumente encontrados em escoamentos multifásicos [12].	1
1.2	Etapas da desestabilização da emulsão de óleo em escoamento vertical [27].	2
3.1	Discretização do domínio bidimensional em uma grade cartesiana [10].	8
3.2	Ilustração do stencil numérico, que representa os pontos visitados no cálculo de um ponto genérico (i, j) . [10]	10
3.3	Exemplo de malha bidimensional com dimensão $Lx \times Ly$.	10
3.4	Problema inicial resolvido para garantir um bom funcionamento do programa e alterando-o, alcançar a simulação desejada.	11
3.5	Escoamento entre placas paralelas.	13
3.6	Esquema mostrando uma malha defasada completa, para um exemplo de 5 intervalos em cada direção. Triângulo: componente u . Quadrado: componente v . Círculo: pressão p .	19
3.7	Região aberta representada por Ω , delimitada pelo contorno da função level set [21].	21
3.8	Função Heaviside $H(\phi)$ e da função Heaviside difusa $H_\varepsilon(\phi)$.	22
3.9	Função delta de Dirac $\delta(\phi)$ e da função delta de Dirac difusa $\delta_\varepsilon(\phi)$.	23
3.10	Região interfacial criada pela função Heaviside $H(\phi)$ e pela função Heaviside difusa $H_\varepsilon(\phi)$ com uma largura de banda $\varepsilon = 0.0375$.	24
3.11	Estrutura de tubos, ou máscaras, representada pela função m .	27
4.1	Convergência das variáveis u , v e p para diferentes números de pontos para a malha.	32
4.2	Distribuição do campo de velocidade u para diferentes quantidades de pontos na malha.	33
(a)	Malha 20 x 20.	33
(b)	Malha 33 x 33.	33
(c)	Malha 65 x 65.	33
(d)	Malha 129 x 129.	33
(e)	Malha 257 x 257.	33
(f)	Malha 513 x 513.	33
4.3	Distribuição do campo de velocidade v para diferentes quantidades de pontos na malha.	34
(a)	Malha 20 x 20.	34
(b)	Malha 33 x 33.	34
(c)	Malha 65 x 65.	34
(d)	Malha 129 x 129.	34
(e)	Malha 257 x 257.	34
(f)	Malha 513 x 513.	34
4.4	Distribuição do campo de pressão p para diferentes quantidades de pontos na malha.	35
(a)	Malha 20 x 20.	35
(b)	Malha 33 x 33.	35
(c)	Malha 65 x 65.	35

(d)	Malha 129 x 129.....	35
(e)	Malha 257 x 257.....	35
(f)	Malha 513 x 513.....	35
4.5	Perfis de velocidade u para o centro geométrico da cavidade e centro do vórtice primário encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].	36
4.6	Perfis de velocidade v para o centro geométrico da cavidade e centro do vórtice primário encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].	37
4.7	Legendas utilizadas nas figuras 4.5 e 4.6 dos perfis de velocidade de Ghia, Ghia e Shin [9]. .	37
4.8	Comparação dos perfis de velocidade u encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].	38
(a)	$Re = 100$	38
(b)	$Re = 400$	38
(c)	$Re = 1000$	38
4.9	Comparação dos perfis de velocidade v encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].	39
(a)	$Re = 100$	39
(b)	$Re = 400$	39
(c)	$Re = 1000$	39
4.10	Comparação dos perfis de velocidade u e v encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para diferentes números de Reynolds.....	40
(a)	Perfis de velocidade u	40
(b)	Perfis de velocidade v	40
4.11	Comparação das linhas de corrente encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para $Re = 100$	41
(a)	Linhas de corrente encontradas por Ghia, Ghia e Shia [9].	41
(b)	Linhas de corrente encontradas no presente trabalho.	41
4.12	Comparação das linhas de corrente encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para $Re = 400$	41
(a)	Linhas de corrente encontradas por Ghia, Ghia e Shia [9].	41
(b)	Linhas de corrente encontradas no presente trabalho.	41
4.13	Comparação das linhas de corrente encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para $Re = 1000$	42
(a)	Linhas de corrente encontradas por Ghia, Ghia e Shia [9].	42
(b)	Linhas de corrente encontradas no presente trabalho.	42
4.14	Comparação do perfil de velocidade u encontrado neste trabalho (malha 129 x 129 pontos) com o encontrado por Kim e Moin (malha 21 x 21 e 31 x 31 pontos) [14] para $Re = 400$	43
4.15	Região de desenvolvimento hidrodinâmico no escoamento de Hagen-Poiseuille [35].	44
4.16	Análise do desenvolvimento do campo de velocidade u gerado no escoamento de Hagen-Poiseulli com $Re = 1$, em diferentes instantes de tempo.	45
(a)	$t = 0$	45
(b)	$t = 0,032$	45
(c)	$t = 0,052$	45

(d)	$t = 0,132$.	45
(e)	$t = 0,212$.	45
(f)	$t = 1,292$.	45
4.17	Comparação do perfil de velocidade u encontrado no presente trabalho com a solução analítica.	46
4.18	Análise do comprimento de desenvolvimento hidrodinâmico na tubulação, comparando-se o resultado numérico encontrado com a solução analítica.	47
4.19	Representação da região interfacial representada pela função ϕ no escoamento de cisalhamento simples, em diferentes tempos de simulação, para $Re = 0,01$ e $Ca = 2$.	48
(a)	$t = 0$.	48
(b)	$t = 0,1$.	48
(c)	$t = 0,2$.	48
(d)	$t = 0,3$.	48
(e)	$t = 0,4$.	48
(f)	$t = 0,5$.	48
4.20	Deformações na região interfacial com o aumento do número de capilaridade, Ca , no cisalhamento simples apresentado na Figura 4.21	49
4.21	Representação da região interfacial representada pela função ϕ no escoamento de cisalhamento simples, com $Re = 0,01$ e um mesmo tempo de simulação $t = 1,2$, para diferentes números de capilaridade, Ca .	50
(a)	$Ca=5,0$.	50
(b)	$Ca=2,0$.	50
(c)	$Ca=1,0$.	50
(d)	$Ca=0,5$.	50
(e)	$Ca=0,1$.	50
(f)	$Ca=0,01$.	50
4.22	Representação da interface pela função ϕ para $Re = 1$ e $Ca = 1000$, em diferentes instantes de tempo, no escoamento de Hagen-Poiseuille bifásico.	52
(a)	$t = 0$.	52
(b)	$t = 0,413$.	52
(c)	$t = 0,580$.	52
(d)	$t = 0,709$.	52
(e)	$t = 0,867$.	52
(f)	$t = 0,958$.	52
4.23	Campo de pressão do escoamento de Hagen-Poiseuille bifásico, para $Re = 1$ e $Ca = 1000$, em diferentes instantes de tempo.	53
(a)	$t = 0$.	53
(b)	$t = 0,413$.	53
(c)	$t = 0,580$.	53
(d)	$t = 0,709$.	53
(e)	$t = 0,867$.	53
(f)	$t = 0,958$.	53

LISTA DE TABELAS

4.1	Comparação dos valores de u , v e p para diferentes quantidades de pontos na malha.....	32
-----	---	----

LISTA DE SÍMBOLOS

Δ	Varição entre duas grandezas similares
ρ	Densidade
∇	Gradiente
∇^2	Laplaciano
σ	Tensão superficial
μ	Viscosidade dinâmica
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)
\mathbf{u}^*	Vetor velocidade tentativa com componentes (u,v)
p	Pressão
P	Pressão modificada
χ	Pressão tentativa
t	Tempo
τ	Tensão cisalhante
\mathbf{F}	Vetor de forças
\mathbf{a}	Vetor aceleração
m	Função máscara

α	Parâmetro da estrutura de tubos
β	Parâmetro da estrutura de tubos
γ	Parâmetro da estrutura de tubos
Θ	Região delimitada pelas fronteiras da cavidade
\mathbf{F}_c	Força de contato na interface
$\hat{\mathbf{n}}$	Vetor unitário
ϕ	Função level set
δ	Delta de Dirac
δ_ε	Delta de Dirac difusa
H	Função Heaviside
H_ε	Função Heaviside difusa
Υ	Interface
Ω	Região delimitada pela interface
κ	Curvatura da interface
a	Raio da gota
r_a	Razão de aspecto da gota

LISTA DE ABREVIATURAS

<i>NS</i>	Navier Stokes
<i>Re</i>	Número de Reynolds
<i>Ca</i>	Número de Capilaridade

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação	1
1.2	Objetivos	3
1.2.1	Gerais	3
1.2.2	Específicos	3
1.3	Revisão Bibliográfica	3
1.3.1	Método de Projeção	3
1.3.2	Método Level Set	4
1.3.3	Escoamento Multifásico	5
2	Fundamentos Teóricos	6
2.1	Equações Governantes	6
3	Metodologia	8
3.1	Método de Diferenças Finitas	8
3.2	Adimensionalização das Equações	11
3.2.1	Cavidade	11
3.2.2	Escoamento entre placas paralelas	12
3.3	Método de Projeção	15
3.3.1	Método de projeção de primeira ordem	15
3.3.2	Método de projeção de segunda ordem	17
3.3.3	Implementação com malha defasada - MAC	19
3.4	Level Set	20
3.4.1	Implementação da equação evolutiva de ϕ	24
3.4.2	Cálculo dos termos convectivos	25
3.4.3	Reinicialização de ϕ	26
3.4.4	Implementação da Força de Contato na Equação de Navier-Stokes	28
3.5	Condições de Contorno	28

3.5.1	Cavidade com tampa deslizante	29
3.5.2	Escoamento de Hagen-Poiseuille	29
3.5.3	Cisalhamento simples em escoamento multifásico	30
3.5.4	Escoamento multifásico em tubulação fechada circular - Hagen-Poiseuille Multifásico	30
4	Resultados	31
4.1	Cavidade	31
4.1.1	Estudo de convergência de malha	31
4.1.2	Validação dos resultados	36
4.2	Escoamento em tubulações: Hagen-Poiseuille	44
4.2.1	Validação dos resultados	46
4.3	Mistura bifásica - Simple shear	47
4.3.1	Efeito da Capilaridade	49
4.4	Escoamento multifásico em tubulações	51
5	Conclusões	54
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	55

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

O termo escoamento multifásico denota o fluxo simultâneo de duas ou mais fases com propriedades diferentes em um mesmo meio. Por fase subentende-se uma região do espaço delimitada por uma interface de espessura infinitesimal que encerra em seu interior um material com composição química homogênea [26].

Esse escoamento é comumente encontrado em inúmeras aplicações industriais complexas, tais como indústrias de produção de petróleo e de gás natural, evaporadores, condensadores e reatores nucleares na indústria de energia, condicionadores de ar e bombas de calor, reatores químicos e unidades de destilação, sistemas de combustão e células de combustível, aplicações na área médica como o escoamento sanguíneo em artérias, dentre outras.

Dentre os diversos tipos de escoamento multifásico existem os escoamentos bifásicos de líquido-gás, que são comumente encontrados em operações de extração de petróleo. Neste tipo de escoamento, as fases líquida e gasosa se arranjam na tubulação de forma a gerar diferentes configurações espaciais, conhecidos como padrões de escoamento [12]. Os padrões de escoamentos bifásicos são algo bastante estudados e já consolidados, devido ao grande interesse industrial. A Figura 1.1 mostra alguns desses arranjos.

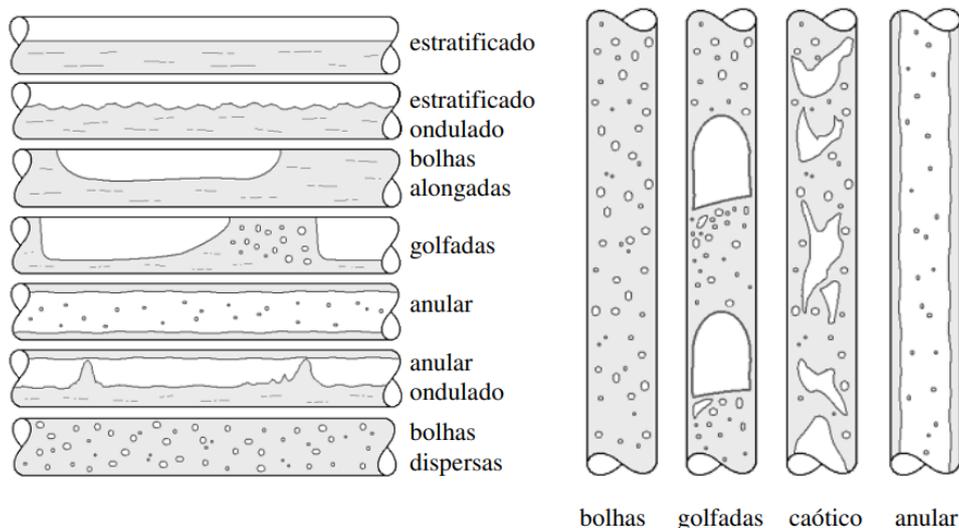


Figura 1.1: Padrões de escoamento horizontal e vertical comumente encontrados em escoamentos multifásicos [12].

Dentre os arranjos conhecidos, o de principal interesse deste trabalho é o do escoamento laminar horizontal de bolhas dispersas, ou gotas dispersas. A metodologia utilizada pode, com pequenas modificações, simular também um escoamento vertical.

A formação de um padrão de escoamento específico depende das propriedades dos fluidos tais como

massa específica, viscosidade, tensão superficial, das condições de operação, como pressão e temperatura, e das características geométricas da tubulação, tais como comprimento, inclinação, direção do escoamento e diâmetro [12].

Emulsão é um sistema de pelo menos duas fases contendo dois líquidos imiscíveis, um disperso no outro na forma de gotículas microscópicas ou submicroscópicas. As duas fases imiscíveis são denominadas genericamente como óleo e água, representando uma fase orgânica, apolar, e outra aquosa, polar, respectivamente. O escoamento de emulsões é encontrado em processos de extração de petróleo, escoamentos biológicos, dentre outras várias aplicações.

A fase que está presente na forma de gotas, finamente divididas, denomina-se fase dispersa ou interna e a que forma a matriz onde as gotas estão suspensas, fase contínua ou externa. A distinção entre os tipos diferentes de emulsão consiste em notar qual meio é o contínuo e qual é a fase dispersa. A nomenclatura das emulsões inicia-se sempre com a fase dispersa e depois com a fase contínua, portanto, elas podem ser denominadas como água/óleo (a/o), óleo/água (o/a), ou ainda emulsões múltiplas [5].

Normalmente as emulsões, não se formam espontaneamente e suas propriedades dependem não apenas de condições termodinâmicas como também das características, do método de preparação e ordem de adição de cada componente. São sistemas estabilizados pela adição de agentes tensoativos que são capazes não apenas de diminuir a tensão interfacial do sistema como também de formar um filme interfacial com propriedades estéricas e eletrostáticas em torno dos glóbulos da fase interna [32]. A Figura 1.2 mostra as etapas da desestabilização da emulsão.

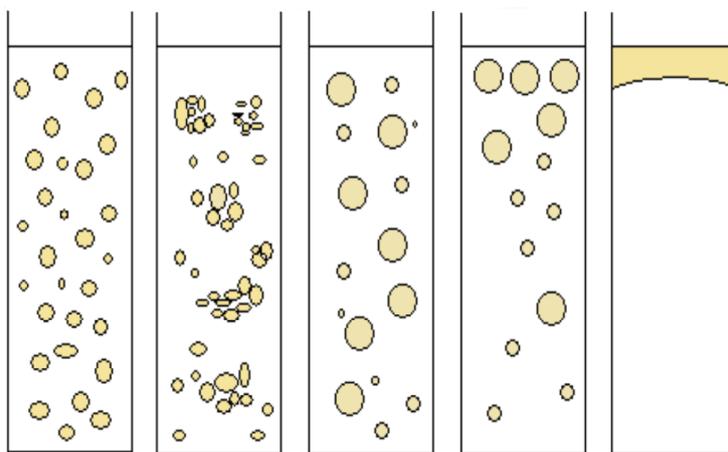


Figura 1.2: Etapas da desestabilização da emulsão de óleo em escoamento vertical [27].

Existem muitas dúvidas sobre o que realmente ocorre e quais as regras que regem a estabilidade e o comportamento reológico das emulsões. Ainda não foram desenvolvidas teorias totalmente aceitas que descrevam e prevejam as características de muitas das formulações encontradas na prática [15].

O grande interesse em emulsões e a elevada aceitação em suas múltiplas aplicações tem levado a diversos novos estudos sobre a estrutura e previsão de estabilidade destes sistemas [32].

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Gerais

Este trabalho tem como finalidade simular o escoamento de Hagen-Poiseuille (escoamento em duto) multifásico bidimensional, em que ambas as fases são newtonianas e as interfaces são livre de surfactantes, de maneira que o coeficiente de tensão superficial seja constante. O modelo numérico será elaborado usando técnicas de Diferenças Finitas para a discretização espacial do domínio, o Método de Projeção para acoplamento pressão-velocidade na equação de Navier-Stokes e o Método de Level Set para a criação interfaces, tornando o escoamento multifásico.

1.2.2 Específicos

Os objetivos específicos do projeto são:

1. Simular o escoamento em uma cavidade quadrada (*Lid-Driven Cavity Flow*) e validar o programa comparando os resultados com a literatura.
2. Adaptar a rotina da cavidade para transformar o escoamento da cavidade em um canal com entrada e saída de fluido, implementando condições de contorno periódicas que permitam a simulação do escoamento de Hagen-Poiseuille plenamente desenvolvido ao longo de toda a malha, partindo de uma condição inicial não desenvolvida.
3. Adicionar o módulo do método *Level Set* na cavidade, implementando assim o escoamento bifásico, em um escoamento causado por cisalhamento simples (*Simple-Shear*).
4. Modificar o método *Level Set* para permitir que gotas da fase dispersa possam ser transferidas pela condição de contorno periódica, simulando um escoamento multifásico em tubulação fechada circular.

1.3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este estudo é baseado na união de metodologias já consolidadas e amplamente utilizadas no estudo da dinâmica dos fluidos. A seguir são apresentadas algumas referências pertinentes ao desenvolvimento desses métodos e trabalhos correlatos aos temas.

1.3.1 Método de Projeção

O método de projeção foi proposto por Chorin [6] anos atrás e ideias semelhantes foram publicadas por Temam [30], como forma de calcular com eficiência as soluções das equações de Navier-Stokes. Com condições de contorno periódicas, o desempenho do método de projeção é bem compreendido a partir do

trabalho de Chorin [7]. Ao longo dos anos, o método de projeção tem desempenhado um papel predominante no cálculo de fluxos incompressíveis viscosos, com base na formulação de variáveis primitivas.

Entre uma das conhecidas formulações do método de projeção com variáveis primitivas está a de Kim e Moin [14]. O ponto interessante é a utilização de sofisticadas condições de contorno para o campo de velocidade intermediária, as quais incluem uma aproximação para a pressão, obtendo um método de segunda ordem temporal e espacial.

Weinan e Liu [33] desenvolveram procedimentos para estudar separadamente os efeitos de diferentes componentes do método de projeção, esclarecendo a estrutura de camadas limites numéricas e obtiveram ótimas estimativas de convergência e erro para a velocidade e a pressão até o limite.

Recentemente, há um grande interesse na aplicação de métodos de projeção para a simulação direta de fluxos incompressíveis viscosos em moderados números de Reynolds. Destacam-se nessas aplicações as várias discretizações espaciais usadas, incluindo método de diferenças finitas [2, 3].

1.3.2 Método Level Set

Em escoamentos que contém a presença de interfaces móveis e deformáveis, existem basicamente duas técnicas usadas em simulações: Captura (*Capturing*) ou Acompanhamento (*Tracking*). No método de captura, a interface é tratada como uma região com variação acentuada, mas com algumas propriedades mantendo-se contínuas. A desvantagem é que há uma difusão da interface sobre várias células, resultando numa perda de precisão. O Level Set é um exemplo desse método, assim como a técnica denominada Volume-of-Fluid [23], na qual rasteia-se o volume ocupado de cada fase em cada célula a cada passo de tempo e estes volumes são usados para reconstruir uma aproximação da frente ou interface. No método de acompanhamento, por sua vez, a interface é tratada explicitamente movendo-se de forma independente sobre a malha na qual está inserida. Este método oferece uma melhor precisão do que o método anterior, contudo há uma maior complexidade. Como exemplos destacam-se os métodos *Volume-Tracking*, *Boundary-Integral* e *Immersed Boundary* (Fronteira Imersa).

O método Level Set para a propagação de interfaces surgiu na formulação feita por Osher e Sethian [22] em 1988, e desde então vem sendo amplamente utilizado em simulações numéricas e em processamento de imagens. Mulder e Osher [18] apresentaram estudos sobre a implementação desse método para escoamentos compressíveis, analisando um escoamento com ar e hélio.

Sussman et al. [29] propuseram a aplicação do Level Set com escoamentos incompressíveis bifásicos, realizando simulações com água e ar. Desde então, diversos autores o utilizaram para tal aplicação [1, 8, 16]. O método proposto por Sussman et al. utiliza uma função distância sinalizada para representar a interface. Contudo, conforme a interface é movimentada, ocorre o surgimento de gradientes muito altos (ou muito baixos) nas proximidades da interface, fazendo com que a função Level Set perca a sua propriedade de função distância. Isso acarreta em imprecisões no cálculo da força devido à tensão superficial [8].

Com a evolução da interface, aplicam-se técnicas periódicas para manter a função Level Set aproximadamente igual a distância sinalizada. Com esse intuito, Sussman et al. [29] propuseram uma reinicialização por EDP (equação diferencial parcial) e consiste em resolver uma nova equação de advecção a cada passo

de tempo da equação de transporte da interface. Essa reinicialização segue bem utilizada até os dias de hoje como, por exemplo, nos trabalhos de Croce et al. [8] e Lalanne et al. [16].

1.3.3 Escoamento Multifásico

Alguns trabalhos envolvendo o escoamento de gotas são pertinentes ao desenvolvimento deste trabalho, como o de Zhang, Miksis e Bankoff [37] que analisa numericamente o deslizamento de uma gota sobre a parede inferior de um canal retangular bidimensional, quando submetida a um escoamento cisalhante. São verificados casos de instabilidade na interface da gota, casos em que a gota se separa da parede e segue o escoamento e outros em que ela apenas desliza sobre a parede, quase sem se deformar. Esses casos são encontrados pela modificação de parâmetros como o número de Reynolds, o número de capilaridade, a razão da viscosidade e a densidade.

Romanó e Kuhlmann [24,25] obtiveram resultados da interação entre uma partícula de tamanho finito e a parede da cavidade com tampa deslizante, a partir de estudos numéricos sobre a interação entre duas fases fluidas (um fluido e uma fase particulada) como tempestades de areia e transporte de cinzas vulcânicas.

Olbricht e Leal [19] simularam o escoamento bifásico de um gota através de um tubo capilar de diâmetro periodicamente variável (gargantas), verificando oscilações de pressão. A análise dos resultados foi efetuada para regimes de baixo e elevado número de capilaridade (que avalia o grau de "rigidez" da interface), observando-se um alto grau de dependência da queda de pressão com a relação entre viscosidades de ambas as fases.

Em busca de examinar os efeitos de deformações das bolhas, Bunner e Tryggvason [4] trabalharam em dois conjuntos de simulações utilizando 27 bolhas. Em um dos casos as bolhas eram esféricas e em outro as bolhas se deformam em elipsóides. As bolhas esféricas permaneceram uniformemente distribuídas, enquanto que as bolhas deformáveis inicialmente se comportaram da mesma forma, mas posteriormente se acumularam em linhas verticais. Tryggvason et al. [31] discorrem sobre resultados a altos números de Reynolds onde observa-se um regime oscilatório com instabilidades no escoamento. Smolianski et al. [28] apresentam diversos resultados para esse regime oscilatório com a coalescência de bolhas, levando à formação de golfadas em um canal vertical.

Lu et al. [17] examinaram escoamentos laminares de bolhas em canais verticais. Os autores relatam que para um escoamento ascendente, as bolhas são atraídas para as paredes e para escoamentos descendentes, ocorre o contrário.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES

No estudo da mecânica dos fluidos são fundamentais as equações de conservação da massa, de conservação da quantidade de movimento e de conservação da energia. Essa última, entretanto, não é relevante ao propósito deste trabalho.

A equação de conservação da massa, conhecida por equação da continuidade, é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.1)$$

onde ρ é a massa específica do fluido e \mathbf{u} é o campo vetorial de velocidade.

No caso de fluidos incompressíveis, a massa específica não varia no tempo nem no espaço. Assim, a equação da continuidade se torna simplesmente

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.2)$$

Fluido newtoniano é um fluido em que cada componente da velocidade é proporcional ao gradiente de velocidade na direção normal a essa componente. A constante de proporcionalidade é a viscosidade, como mostra a equação (2.3). O comportamento newtoniano indica que a viscosidade do fluido é independente da taxa de deformação a que ele está submetido.

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y} = \mu \nabla \mathbf{u}, \quad (2.3)$$

onde τ é a tensão cisalhante.

A matriz $\nabla \mathbf{u}$ pode ser reescrita em termos da sua parte simétrica, \mathbf{D} , e da sua parte anti-simétrica, \mathbf{W} , como mostrado na equação (2.4).

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (2.4)$$

em que

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T), \quad (2.5)$$

e

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T). \quad (2.6)$$

Mas como a parte anti-simétrica \mathbf{W} relacionada a rotação não impõe tensão no fluido, então pode-se escrever τ apenas em termos de \mathbf{D} . Assim, tem-se:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\mathbf{D} = \mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T). \quad (2.7)$$

Considerando-se um fluxo incompressível de um fluido newtoniano com massa específica, ρ , e viscosidade dinâmica, μ , constantes, a equação de conservação da quantidade de movimento é representada por

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + \rho\mathbf{g} + \mu\nabla^2\mathbf{u}, \quad (2.8)$$

onde P é o campo escalar de pressão e \mathbf{g} a força gravitacional. Essa equação é conhecida como *equação de Navier-Stokes*.

A equação (2.8) pode ser reescrita como

$$\rho \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \rho\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} = -\nabla P + \rho\mathbf{g} + \mu\nabla^2\mathbf{u}. \quad (2.9)$$

Considerando um campo gravitacional uniforme, o termo $\rho\mathbf{g}$ representa um potencial gravitacional e, assim, pode-se agrupá-lo com o gradiente da pressão e com isso, define-se o gradiente da pressão modificada, ou gradiente da pressão dinâmica, como mostra a equação (2.10).

$$\nabla p = \nabla P - \rho\mathbf{g}. \quad (2.10)$$

Com isso, reescrevendo a equação (2.9), tem-se

$$\rho \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \rho\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} = -\nabla p + \mu\nabla^2\mathbf{u}. \quad (2.11)$$

3 METODOLOGIA

3.1 MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS

Segundo Wrobel et al. [36], o princípio do método é a discretização do domínio de uma equação diferencial em uma malha e aproximação das derivadas pelas diferenças correspondentes, respeitando as condições de contorno do problema.

O método das diferenças finitas consiste em 4 etapas [11]:

1. Discretizar o domínio.
2. Aproximar as derivadas usando séries de Taylor.
3. Substituir essas derivadas aproximadas na equação diferencial original.
4. Resolver o sistema de equações algébricas resultante.

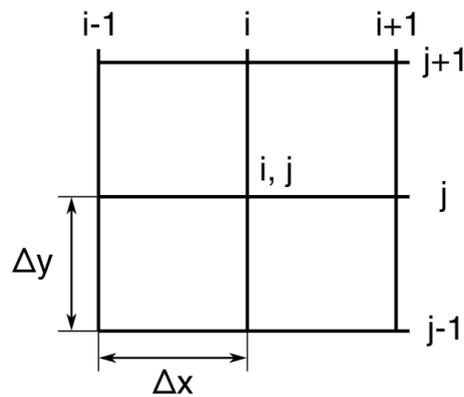


Figura 3.1: Discretização do domínio bidimensional em uma grade cartesiana [10].

A Figura 3.1 mostra como é a discretização um domínio bidimensional por diferenças finitas. Esta pode ser representada como a seguir.

$$x_i = x_0 + i \cdot \Delta x, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

$$y_j = y_0 + j \cdot \Delta y, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

Sendo u uma função contínua e diferenciável, sua expansão por série de Taylor é da seguinte forma.

$$u(x) = u(x_i) + (x - x_i) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(x - x_i)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \dots + \frac{(x - x_i)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i + \dots \quad (3.1)$$

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

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u(x) - u(x_i)}{(x - x_i)} - \frac{(x - x_i)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \dots - \frac{(x - x_i)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i + \dots \quad (3.2)$$

Reescrevendo de modo simplificado

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u(x) - u(x_i)}{(x - x_i)} + O(h), \quad (3.3)$$

onde h é a distância na malha entre dois pontos consecutivos e $O(h)$ representa o erro de truncamento associado à expansão. Nesse 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.

A aproximação pode ser feita utilizando pontos a frente, atrás ou pontos simultaneamente à frente e atrás em relação ao ponto x_i . Essas aproximações são nomeadas como diferenças à frente, diferenças atrás e diferenças centradas, respectivamente. Sendo representadas por:

- Diferenças à frente:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} + O(h), \quad (3.4)$$

- Diferenças atrás:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + O(h), \quad (3.5)$$

- Diferenças centradas:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + O(h^2). \quad (3.6)$$

As expansões da série de Taylor à frente e atrás podem ser combinadas, gerando expansões que tenham apenas termos de ordens ímpares ou ordens pares. Daí obtém-se as equações de diferenças centradas, onde tem-se aproximações de segunda ordem para a primeira derivada, como mostrado na equação (3.6). Desse modo também obtém-se aproximações para a segunda derivada, onde são também de segunda ordem, como mostra a equação (3.7). Conforme maior é a ordem da aproximação, mais rápida se dá a convergência dos resultados.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + O(h^2). \quad (3.7)$$

Para a discretização bidimensional de uma função usa-se o conceito de stencil, que representa os pontos ao redor de um ponto genérico (i, j) . Para as aproximações de derivadas nesse ponto, as equações de diferenças finitas são formuladas utilizando um stencil para cada ponto da malha. A Figura 3.2 mostra o stencil em um ponto genérico.

Uma malha bidimensional com dimensões $Lx = 1$ e $Ly = 1$, como mostrado na Figura 3.3, representa a discretização por diferenças finitas do domínio físico.

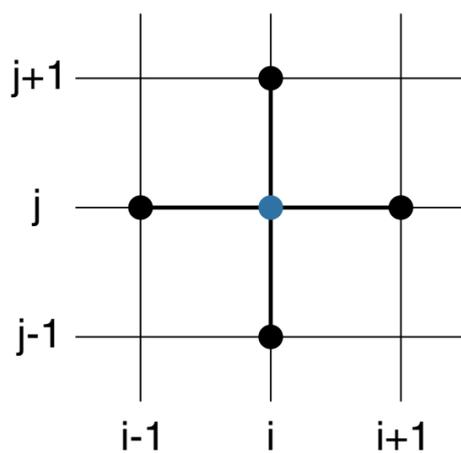


Figura 3.2: Ilustração do stencil numérico, que representa os pontos visitados no cálculo de um ponto genérico (i, j) . [10]

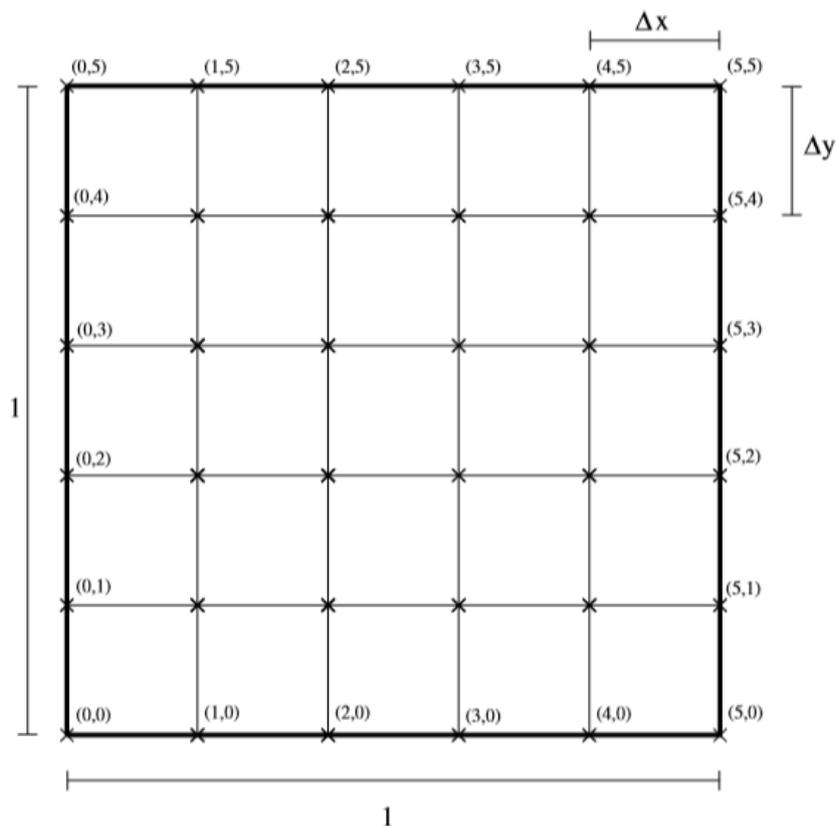


Figura 3.3: Exemplo de malha bidimensional com dimensão $Lx \times Ly$.

O comprimento Lx da malha representa a quantidade de intervalos Δx presentes na malha na direção x , e o mesmo serve para o comprimento Ly na direção y .

3.2 ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

3.2.1 Cavidade

O problema inicial a ser resolvido é o do escoamento em uma cavidade fechada com velocidade $U = 1$ na tampa superior, com as paredes laterais e inferior paradas, como mostra a Figura 3.4. Essa simulação é conhecida como *Lid-Driven Cavity Flow*.

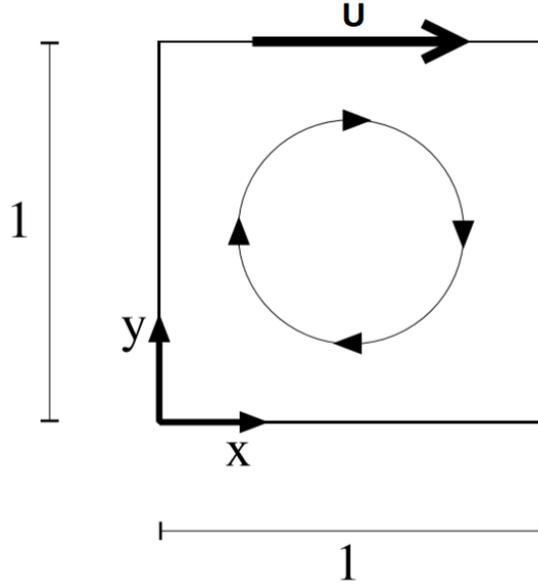


Figura 3.4: Problema inicial resolvido para garantir um bom funcionamento do programa e alterando-o, alcançar a simulação desejada.

Para facilitar o processo de simulação numérica reescreve-se as equações, que são dimensionais, na sua forma adimensional. Assim diminui-se o número de parâmetros variáveis durante a análise.

As equações governantes podem ser adimensionalizadas com um comprimento característico L (tamanho da cavidade) e uma velocidade característica U (velocidade máxima na parede superior da cavidade), criando as seguintes variáveis adimensionais:

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U}, \quad x^* = \frac{x}{L}, \quad y^* = \frac{y}{L}, \quad t^* = t \frac{U}{L}, \quad p^* = \frac{p}{\rho U^2}, \quad \nabla^* = L \nabla.$$

Reescrevendo a equação de Navier-Stokes e fazendo algumas manipulações algébricas, tem-se que:

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* = -\nabla^* p^* + \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \mathbf{u}^*, \quad (3.8)$$

em que

$$Re = \frac{\rho U L}{\mu} \quad (3.9)$$

é o número de Reynolds, que representa a razão entre as forças de inércia (ρU) e as forças de viscosidade ($\frac{\mu}{L}$), tratando-se de um número adimensional.

Analogamente, para a equação da continuidade, tem-se

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0. \quad (3.10)$$

Retirando os * das variáveis, para evitar excesso de notação, tem-se as seguintes equações adimensionais

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3.11)$$

e

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.12)$$

Tratando-se de um escoamento bidimensional, o campo vetorial de velocidade é

$$\mathbf{u} = u(x, y, t)\hat{\mathbf{e}}_x + v(x, y, t)\hat{\mathbf{e}}_y, \quad (3.13)$$

e o campo escalar de pressão é dado por

$$p = p(x, y, t). \quad (3.14)$$

As equações governantes, em duas dimensões, se reduzem a

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (3.16)$$

e

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \quad (3.17)$$

3.2.2 Escoamento entre placas paralelas

Para o escoamento bidimensional entre placas paralelas com campo de pressão imposto (*Escoamento de Hagen-Poiseuille*), separa-se o gradiente de pressão em dois, de modo que o primeiro, ∇P_1 seja responsável por garantir a incompressibilidade do fluido e o outro $\nabla P_2 = -G$ seja responsável por impor um campo de pressão externo, assim como a pressão provocada por uma bomba em uma tubulação. Dessa maneira, partindo da equação de Navier-Stokes representada na equação (2.9), tem-se:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P_1 + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - G \hat{\mathbf{e}}_x. \quad (3.18)$$

Em seguida, utilizando o gradiente da pressão modificada, assim como definido na equação (2.10), resulta-se em:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - G \hat{\mathbf{e}}_x. \quad (3.19)$$

Alterando-se as condições de contorno da cavidade em suas fronteiras laterais de modo a retirar as paredes laterais e mantendo-se as duas fronteiras horizontais paradas, esta transforma-se em um canal com

entrada e saída de fluido, como mostrado na Figura 3.5. Com a implementação de condições de contorno periódicas e um campo de pressão imposto, faz-se possível simular um escoamento monofásico em uma tubulação.

Para a adimensionalização das equações do escoamento plenamente desenvolvido entre placas paralelas, considere uma distância H entre as placas, como mostrado na figura 3.5.

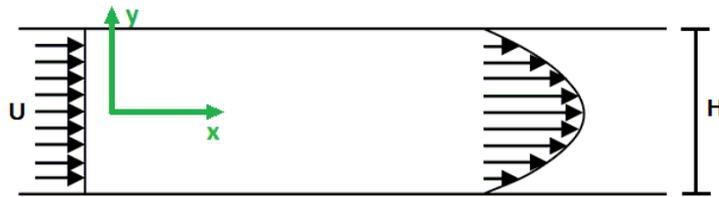


Figura 3.5: Escoamento entre placas paralelas.

Tem-se as seguintes hipóteses para este escoamento:

- Escoamento permanente, ou seja, $\frac{\partial}{\partial t} = 0$;
- Escoamento unidirecional, ou seja, $\mathbf{u} = u(x, y, z)\hat{e}_x$;
- Escoamento unidimensional, ou seja, $\mathbf{u} = u(y)$.

Nesse caso, a equação de Navier-Stokes se reduz a:

$$\mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial p}{\partial x} = G. \quad (3.20)$$

As condições de contorno são:

$$\begin{aligned} u(y = \frac{1}{2}H) &= 0; \\ u(y = -\frac{1}{2}H) &= 0; \\ \frac{\partial u}{\partial y}(y = 0) &= 0. \end{aligned}$$

Integrando a equação (3.20) em função de variável y , tem-se:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{Gu}{\mu} + C_0 \quad (3.21)$$

E integrando mais uma vez, tem-se:

$$u(y) = \frac{Gy^2}{2\mu} + C_1 \quad (3.22)$$

em que C_0 e C_1 são constantes.

Pelas condições de contorno, sabe-se que $C_0 = 0$ e $C_1 = -\frac{GH^2}{8\mu}$.

Portanto, a equação do campo de velocidade u , é dada por:

$$u(y) = \frac{GH^2}{8\mu} \left[\left(\frac{2y}{H} \right)^2 - 1 \right]. \quad (3.23)$$

A vazão Q pode ser calculada como:

$$2 \int_0^{\frac{H}{2}} u(y) w dy \quad (3.24)$$

em que w é a profundidade característica.

Assim, pela equação (3.23), tem-se:

$$Q = \frac{-GH^3 w}{12\mu}. \quad (3.25)$$

A velocidade característica U_c é dada por:

$$U_c = \frac{Q}{Hw} = -\frac{GH^2}{12\mu}. \quad (3.26)$$

Por fim, dividindo a equação do perfil de velocidade $u(y)$ pela velocidade característica U_c , tem-se o perfil de velocidade adimensional $\mathbf{u}^*(y^*)$:

$$\mathbf{u}^*(y^*) = \frac{3}{2}(1 - 4y^{*2}). \quad (3.27)$$

Reescrevendo a equação de Navier-Stokes mostrada na equação (3.19) e fazendo algumas manipulações algébricas, tem-se que:

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* = \frac{GH}{\rho U_c^2} \nabla^* p^* + \frac{\mu}{H \rho U_c} \nabla^{*2} \mathbf{u}^* - \frac{GH}{\rho U_c^2} \hat{\mathbf{e}}_x. \quad (3.28)$$

em que

$$\frac{\mu}{H \rho U_c} = \frac{1}{Re}, \quad (3.29)$$

e

$$\frac{GH}{\rho U_c^2} = \frac{GH^2}{\mu U_c} \frac{1}{Re} = -\frac{12}{Re}. \quad (3.30)$$

Com isso, a equação adimensional pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{12}{Re} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{12}{Re} \hat{\mathbf{e}}_x. \quad (3.31)$$

As equações governantes, em duas dimensões, se reduzem a

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{12}{Re} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{12}{Re}, \quad (3.33)$$

e

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{12}{Re} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \quad (3.34)$$

3.3 MÉTODO DE PROJEÇÃO

Resolver o sistema das equações governantes que foram adimensionalizadas do modo que foram apresentadas envolve grande complexidade no acoplamento das variáveis de pressão e velocidade numa mesma equação, gerando sistemas que, muitas vezes, não chegam nem a convergir. De modo alternativo, Alexandre Joel Chorin [6], em 1968, propôs um método conhecido como Método de Projeção que desacopla essas variáveis e facilita de modo rápido e simples a solução das equações da dinâmica dos fluidos.

3.3.1 Método de projeção de primeira ordem

Em vez de tentar satisfazer simultaneamente a restrição de incompressibilidade e a equação de Navier-Stokes, o método de projeção consiste em dois passos. Primeiramente, a restrição de incompressibilidade é ignorada e uma velocidade intermediária \mathbf{u}^* é calculada usando a equação de Navier-Stokes (sem o termo de pressão). Depois, essa velocidade \mathbf{u}^* é projetada de volta no espaço de campos vetoriais incompressíveis, e com isso obtém-se \mathbf{u}^{n+1} e p^{n+1} . Em resumo, o método de projeção desacopla o cálculo de \mathbf{u}^{n+1} e p^{n+1} .

O procedimento pode ser esquematizado como:

$$\text{Passo 1} \begin{cases} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n = \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^n, \\ \mathbf{u}^* = \mathbf{u}_w \quad \text{em } \partial\Theta. \end{cases} \quad (3.35)$$

$$\text{Passo 2} \begin{cases} \mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla p^{n+1}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \\ \nabla p^{n+1} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0 \quad \text{em } \partial\Theta. \end{cases} \quad (3.36)$$

Aqui, $\partial\Theta$ representa a fronteira do domínio. Esse é o método de projeção explícito de primeira ordem no tempo.

A combinação dos dois passos apresentados nas equações (3.35) e (3.36) equivale à discretização por diferenças finitas das equações governantes mostrada nas equações (3.37) e (3.38).

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n = -\nabla p^{n+1} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^n, \quad (3.37)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0. \quad (3.38)$$

Para mostrar isso, basta substituir a relação

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla p^{n+1}, \quad (3.39)$$

na equação (3.35), tendo como resultado a própria equação (3.37).

Para calcular a nova pressão, aplica-se o divergente à equação (3.39) como na equação (3.40).

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} + \nabla \cdot (\Delta t \nabla p^{n+1}). \quad (3.40)$$

O objetivo principal do método de projeção é garantir que \mathbf{u}^{n+1} seja soleinoidal. Assim, impondo $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$ na equação (3.40), resulta em

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad (3.41)$$

ou seja, a imposição de que o novo campo vetorial de velocidade seja soleinoidal fornece uma equação de Poisson para a pressão, cujo termo fonte é o divergente do campo de velocidade intermediário \mathbf{u}^* .

Com isso, o método de projeção se resume a:

1. calcular \mathbf{u}^* usando a equação (3.35) juntamente com as condições de contorno para a velocidade aplicadas à \mathbf{u}^* .
2. calcular a nova pressão p^{n+1} usando a equação (3.41) e as condições de contorno de Neumann homogêneas, dadas em (3.36).
3. calcular a nova velocidade \mathbf{u}^{n+1} com a equação (3.39).

O método explícito apresenta instabilidades numéricas que geram restrições quanto ao tamanho do passo de tempo Δt e do incremento espacial Δx , pois é calculado no tempo anterior, n . Para contornar as instabilidades usa-se um método implícito no tempo, ou seja, as variáveis (fora o termo convectivo) serão calculadas sempre no tempo presente, $n + 1$.

No método implícito, tem-se o seguinte procedimento.

$$\text{Passo 1} \begin{cases} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n = \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^*, \\ \mathbf{u}^* = \mathbf{u}_w \quad \text{em } \partial\Theta. \end{cases} \quad (3.42)$$

$$\text{Passo 2} \begin{cases} \mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla \chi^{n+1}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \\ \nabla \chi^{n+1} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0 \quad \text{em } \partial\Theta. \end{cases} \quad (3.43)$$

Onde χ é a pressão tentativa, que corresponde a uma falsa pressão. Procedendo como feito no caso explícito e aplicando o divergente à equação

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla \chi^{n+1}, \quad (3.44)$$

tem-se

$$\nabla^2 \chi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.45)$$

A pressão verdadeira é calculada como

$$p^{n+1} = \chi^{n+1} - \frac{\Delta t}{Re} \nabla^2 \chi^{n+1}, \quad (3.46)$$

ou, analogamente,

$$p^{n+1} = \chi^{n+1} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{Re}. \quad (3.47)$$

Assim, o método de projeção implícito de 1ª ordem no tempo e 2ª ordem no espaço pode ser reescrito como:

1. calcular \mathbf{u}^* usando a equação (3.42) juntamente com as condições de contorno para a velocidade aplicadas à \mathbf{u}^* .
2. calcular a pressão tentativa χ^{n+1} usando a equação (3.45) e as condições de contorno de Neumann homogêneas, dadas em (3.43).
3. calcular a nova velocidade \mathbf{u}^{n+1} com a equação (3.44).
4. calcular a pressão verdadeira p^{n+1} com a equação (3.46) ou (3.47).

3.3.2 Método de projeção de segunda ordem

Para tornar o método de segunda ordem para todas as variáveis, avalia-se as variáveis não só nos instantes n e $n + 1$, mas também nos instantes intermediários $n + \frac{1}{2}$. As equações (3.37) e (3.38) são reescritas como

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+\frac{1}{2}} = -\nabla p^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2Re} (\nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} + \nabla^2 \mathbf{u}^n), \quad (3.48)$$

e

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0. \quad (3.49)$$

O termo difusivo (termo do laplaciano) passa a ser calculado como uma média dos seus valores nos instantes n e $n + 1$, ou seja, em $n + \frac{1}{2}$. No cálculo do termo convectivo, Weinan e Liu [34] propõem uma

extrapolação utilizando um polinômio de Lagrange, resultando na fórmula de Adams-Bashforth descrita como

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2}(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^n - \frac{1}{2}(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n-1}. \quad (3.50)$$

O procedimento para resolução do método de segunda ordem é

$$\text{Passo 1} \begin{cases} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + [\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2Re} [\nabla^2 \mathbf{u}^* + \nabla^2 \mathbf{u}^n], \\ \mathbf{u}^* = \mathbf{u}_w \quad \text{em } \partial\Theta. \end{cases} \quad (3.51)$$

$$\text{Passo 2} \begin{cases} \mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla \chi^{n+\frac{1}{2}}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \\ \nabla \chi^{n+\frac{1}{2}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0 \quad \text{em } \partial\Theta. \end{cases} \quad (3.52)$$

Analogamente ao método de primeira ordem, aplicando o divergente à equação de correção para a velocidade

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla \chi^{n+\frac{1}{2}}, \quad (3.53)$$

tem-se a equação de Poisson para a pressão tentativa

$$\nabla^2 \chi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.54)$$

A equação para a pressão verdadeira é

$$p^{n+\frac{1}{2}} = \chi^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2Re} \nabla^2 \chi^{n+\frac{1}{2}}, \quad (3.55)$$

ou, analogamente,

$$p^{n+\frac{1}{2}} = \chi^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{2Re}. \quad (3.56)$$

Por fim, o método de projeção implícito de segunda ordem para todas as variáveis pode ser reescrito como:

1. calcular \mathbf{u}^* usando a equação (3.51) juntamente com as condições de contorno para a velocidade aplicadas à \mathbf{u}^* .
2. calcular a pressão tentativa $\chi^{n+\frac{1}{2}}$ usando a equação (3.54) e as condições de contorno de Neumann homogêneas, dadas em (3.52).
3. calcular a nova velocidade \mathbf{u}^{n+1} com a equação (3.53).
4. calcular a pressão verdadeira $p^{n+\frac{1}{2}}$ com a equação (3.55) ou (3.56).

Para o escoamento de Hagen-Poiseuille, a equação de correção para a velocidade é dada por

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{12}{Re} \Delta t \nabla \chi^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.57)$$

Aplicando o divergente à equação de correção para a velocidade tem-se a equação de Poisson para a pressão tentativa, como na equação (3.58).

$$\nabla^2 \chi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{Re}{12} \frac{(\nabla \cdot \mathbf{u}^*)}{\Delta t}. \quad (3.58)$$

A equação para a pressão verdadeira é

$$p^{n+\frac{1}{2}} = \chi^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2Re} \nabla^2 \chi^{n+\frac{1}{2}}, \quad (3.59)$$

ou, analogamente,

$$p^{n+\frac{1}{2}} = \chi^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{24}. \quad (3.60)$$

3.3.3 Implementação com malha defasada - MAC

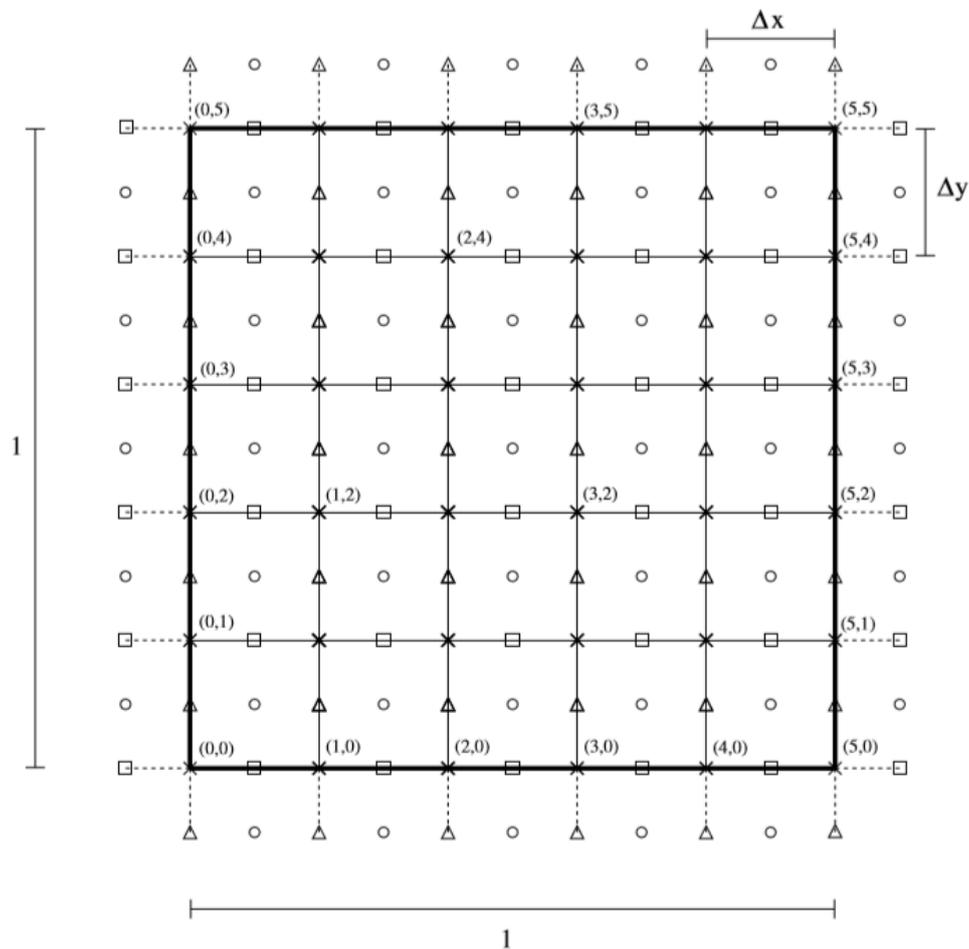


Figura 3.6: Esquema mostrando uma malha defasada completa, para um exemplo de 5 intervalos em cada direção. Triângulo: componente u . Quadrado: componente v . Círculo: pressão p .

Quando o método de projeção utiliza uma malha simples como a da figura 3.3, a equação discretizada resultante para o cálculo da pressão tem um stencil muito grande (usa dois pontos para frente e dois pontos para trás). Além disso, os pontos pares ficam desacoplados dos pontos ímpares, o que leva a oscilações na pressão que não são físicas. Uma maneira de resolver esse problema é utilizando uma malha defasada, como mostrada na Figura 3.6.

Na malha defasada, u , v , e p são posicionados em posições diferentes da malha para um mesmo ponto (i, j) . Essa discretização espacial faz com que seja maximizada a precisão do método, e é chamada de "staggered grid" ou malha de MAC.

3.4 LEVEL SET

O método Level Set cria uma interface a partir de uma função implícita definida como função level set e busca acompanhar o movimento dessa interface, que aqui representa uma gota imersa em outro fluido, quando submetida a um campo de velocidade \mathbf{u} . Baseado no trabalho de Osher e Fedkiw [20], apresenta-se a forma como o escoamento convectivo, que inicialmente era uniforme e monofásico, é afetado.

Dada uma interface Υ e uma função distância $\phi(x, t)$ dessa interface, denominada função level set, criada para representá-la, o contorno da função level set delimita uma região aberta representada por Ω . A equação (3.61) caracteriza a função $\phi(x, t)$.

$$\begin{cases} \phi(x, t) > 0 & \text{para } x \in \Omega, \\ \phi(x, t) < 0 & \text{para } x \notin \Omega, \\ \phi(x, t) = 0 & \text{para } x \in \partial\Omega = \Upsilon(t). \end{cases} \quad (3.61)$$

Ou seja, ela assume valores negativos para pontos no exterior da interface Υ , valores positivos para pontos no interior e, nos pontos da interface, se iguala a zero.

A gota, representada pela interface, é transportada como um escalar no escoamento convectivo sem sofrer difusão. A equação (3.62) é a derivada material do campo escalar $\phi(x, t)$ e representa a taxa de variação em relação ao tempo do valor da função distância que está sendo transportada convectivamente pelo campo de velocidade \mathbf{u} , que varia no espaço e no tempo. Ou seja, é a taxa de variação de $\phi(x, t)$ vista por um observador seguindo o movimento.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (3.62)$$

A equação (3.62), se resolvida a todo passo de tempo, identifica a posição atual da gota na cavidade. Com isso, pode-se obter o vetor direção normal e a curvatura em certa região da interface, representados por $\hat{\mathbf{n}}$ e κ , respectivamente. As equações (3.63) e (3.64) definem estes parâmetros.

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}, \quad (3.63)$$

e

$$\kappa = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}, \quad (3.64)$$

ou, analogamente,

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right). \quad (3.65)$$

A Figura 3.7 ilustra uma interface criada pela função level set.

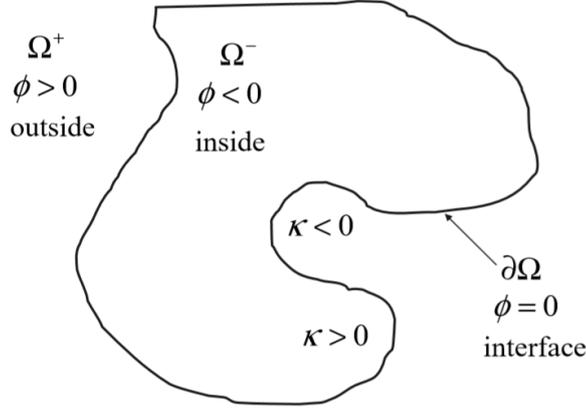


Figura 3.7: Região aberta representada por Ω , delimitada pelo contorno da função level set [21].

Muitas vezes, é útil ter apenas regiões internas e externas à interface para que não seja necessário tratamento especial para os limites. Assim, define-se a função Heaviside, $H(\phi)$, como uma ferramenta do tipo função característica do domínio.

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi \leq 0, \\ 1 & \text{se } \phi > 0. \end{cases} \quad (3.66)$$

Por definição, a derivada direcional da função Heaviside H na direção normal $\hat{\mathbf{n}}$ é a função delta de Dirac, $\delta(\phi)$.

$$\delta(\phi) = \nabla H(\phi) \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (3.67)$$

Essa distribuição é diferente de zero apenas na interface $\partial\Omega$, onde $\phi = 0$. A Função delta de Dirac pode ser representada como um impulso, ou uma força de impacto, onde a integral da função vale 1.

Usando a regra da cadeia para obter o gradiente de H , a definição do vetor direção normal $\hat{\mathbf{n}}$ na equação (3.63) e o fato de que $\nabla \phi \cdot \nabla \phi = |\nabla \phi|^2$ pode-se reescrever a equação (3.67) como na equação (3.68).

$$\delta(\phi) = H'(\phi) |\nabla \phi|. \quad (3.68)$$

Em uma dimensão espacial, a função delta de Dirac, $\delta(\phi)$, define-se como a derivada unidimensional da função Heaviside [22]. Portanto tem-se

$$\delta(\phi) = H'(\phi). \quad (3.69)$$

Desse modo, pode-se representar a equação para a força de contato F_c que aparece na equação de Navier-Stokes devido ao efeito da tensão superficial. Essa força é normal à superfície e é uma função da curvatura e da distância do ponto do escoamento até ela. De modo a garantir que a força de contato exista somente nos pontos tais quais $\phi = 0$, usa-se a função delta de Dirac $\delta(\phi)$, já que esta é diferente de zero apenas na interface. A equação (3.70) mostra a dependência da força de contato.

$$F_c = \sigma \kappa \delta(\phi) \hat{\mathbf{n}}, \quad (3.70)$$

onde σ é a tensão superficial.

Quando assim utilizada, essa função cria uma descontinuidade muito grande na região adjacente à interface. Por esse motivo, Osher e Fedkiw [21] recomendam a utilização da função Heaviside difusa $H_\varepsilon(\phi)$, de modo que esta seja suave.

A Figura 3.8 mostra a diferença entre as funções Heaviside $H(\phi)$ e Heaviside difusa $H_\varepsilon(\phi)$.

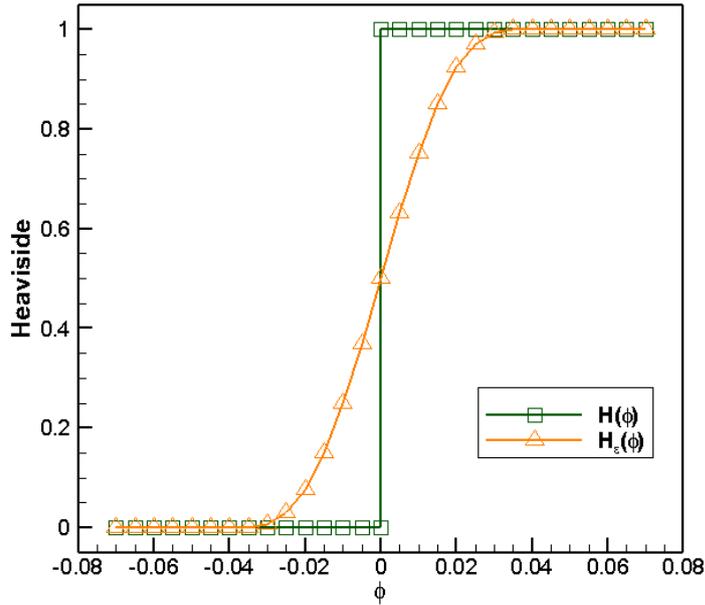


Figura 3.8: Função Heaviside $H(\phi)$ e da função Heaviside difusa $H_\varepsilon(\phi)$.

A função Heaviside difusa é calculada como

$$H_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi < -\varepsilon, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\varepsilon}\right) \right] & \text{se } |\phi| \leq \varepsilon, \\ 1 & \text{se } \phi > \varepsilon, \end{cases} \quad (3.71)$$

em que ε é o parâmetro que determina a largura de banda de difusão numérica ao redor da interface, dado por $\varepsilon = 1,5h$.

Com isso, obtém-se também uma função $\delta_\varepsilon(\phi)$ suave, onde define-se como Delta de Dirac difusa, como mostra a equação (3.72), fazendo com que não haja descontinuidades na região adjacente à interface.

$$\delta_\varepsilon(\phi) = \frac{\partial H_\varepsilon(\phi)}{\partial \phi}. \quad (3.72)$$

Consequentemente, a função delta de Dirac difusa será

$$\delta_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{se } |\phi| > \varepsilon, \\ \frac{1}{2\varepsilon} [1 + \cos(\frac{\pi\phi}{\varepsilon})] & \text{se } |\phi| \leq \varepsilon. \end{cases} \quad (3.73)$$

A Figura 3.9 mostra a função delta de Dirac $\delta(\phi)$, que representa um impulso de área unitária, e a função delta de Dirac difusa $\delta_\varepsilon(\phi)$, que é uma versão suavizada da função delta de Dirac, utilizada para evitar a presença de descontinuidades na interface.

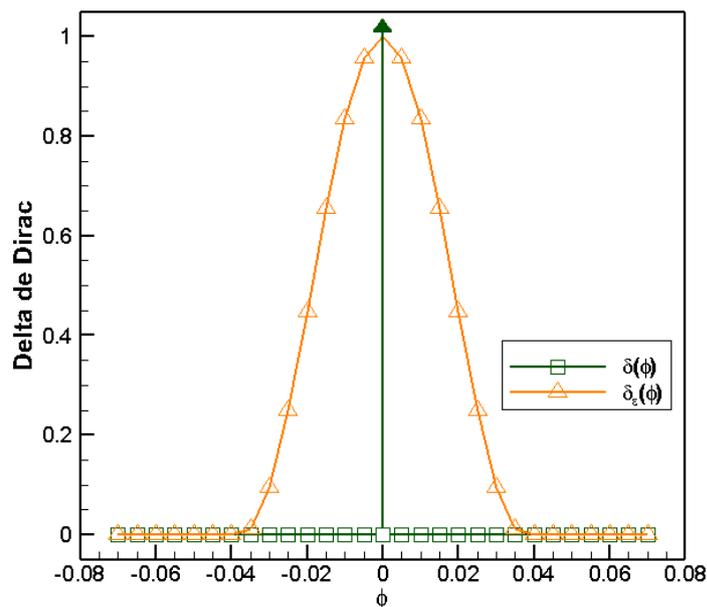


Figura 3.9: Função delta de Dirac $\delta(\phi)$ e da função delta de Dirac difusa $\delta_\varepsilon(\phi)$.

A Figura 3.10 mostra a diferença do contorno interfacial da gota com a utilização de uma função Heaviside $H(\phi)$ e com a função Heaviside difusa $H_\varepsilon(\phi)$. O uso da função Heaviside difusa cria uma espessura de 2ε para a interface e garante um contorno suave para a gota. Com isso, a força de contato entre a fase dispersa do fluido e a interface se torna bem definida e pode ser adicionada nas equações que regem o escoamento, como mostrado na seção 3.4.4.

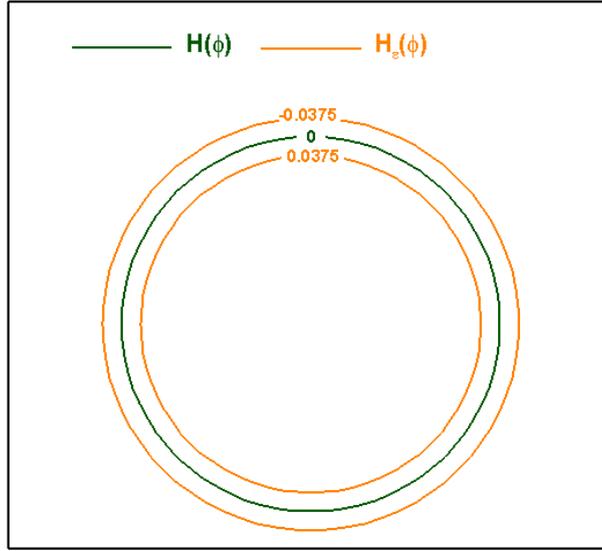


Figura 3.10: Região interfacial criada pela função Heaviside $H(\phi)$ e pela função Heaviside difusa $H_\varepsilon(\phi)$ com uma largura de banda $\varepsilon = 0.0375$.

3.4.1 Implementação da equação evolutiva de ϕ

Em busca de uma maior precisão dos resultados, por meio de um deslocamento mais suave da gota pelo escoamento, foram utilizados métodos de alta ordem para o cálculo da equação evolutiva da função distância usando, inicialmente, o método de Runge-Kutta com diminuição da variação total (TVD) para a discretização temporal da equação, resultando em uma formulação de terceira ordem no tempo.

Segundo Osher et al. [21], o método conta com cinco etapas, em que a primeira é dada por uma interpolação simples feita pelo *Método de Euler Explícito* para um valor provisório de ϕ^{n+1} , como mostrado na equação (3.74).

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t[\mathbf{u} \cdot \nabla \phi]^n. \quad (3.74)$$

Partindo dessa aproximação inicial, definem-se expressões igualmente explícitas para as interpolações de ϕ^{n+2} , $\phi^{n+\frac{1}{2}}$ e $\phi^{n+\frac{3}{2}}$, como mostrado nas equações (3.75), (3.76) e (3.77), respectivamente.

$$\phi^{n+2} = \phi^{n+1} - \Delta t[\mathbf{u} \cdot \nabla \phi]^{n+1}, \quad (3.75)$$

$$\phi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{4}\phi^n + \frac{1}{4}\phi^{n+2}, \quad (3.76)$$

$$\phi^{n+\frac{3}{2}} = \phi^{n+\frac{1}{2}} - \Delta t[\mathbf{u} \cdot \nabla \phi]^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.77)$$

Dessa maneira, a quinta etapa é uma interpolação de terceira ordem no tempo para ϕ , mostrada equação (3.78).

$$\phi^{n+1} = \frac{1}{3}\phi^n + \frac{2}{3}\phi^{n+\frac{3}{2}}. \quad (3.78)$$

3.4.2 Cálculo dos termos convectivos

Visando uma maior precisão dos termos convectivos da equação de movimento, Osher et al. [21] recomendam a utilização de dois métodos numéricos adicionais à equação: o *Upwinding* de primeira ordem, o qual leva em consideração a direção do escoamento no cálculo desses termos, e o método de Hamilton-Jacobi para a interpolação polinomial essencialmente não oscilatória (ENO) de segunda ordem da solução numérica das leis de conservação.

Considerando que

$$D^- \mathbf{u} = \frac{\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(i-1)}{\Delta x}, \quad (3.79)$$

e

$$D^+ \mathbf{u} = \frac{\mathbf{u}(i+1) - \mathbf{u}(i)}{\Delta x}, \quad (3.80)$$

podem-se definir as primeiras diferenças divididas, como nas equações (3.81) e (3.82).

$$D_{i+\frac{1}{2}}^1 \mathbf{u} = (D^+ \mathbf{u}). \quad (3.81)$$

$$D_{i-\frac{1}{2}}^1 \mathbf{u} = (D^- \mathbf{u}). \quad (3.82)$$

Assim, as segundas diferenças divididas são definidas como

$$D_i^2 \mathbf{u} = \frac{D_{i+\frac{1}{2}}^1 - D_{i-\frac{1}{2}}^1}{2\Delta x}. \quad (3.83)$$

Por consequência, as diferenças divididas são utilizadas para reconstruir um polinômio de segundo grau, como na equação (3.84).

$$\mathbf{u}(x) = Q_0(x) + Q_1(x) + Q_2(x), \quad (3.84)$$

em que $Q_0(x)$ é o termo constante, $Q_1(x)$ é o termo de primeiro grau e $Q_2(x)$ o termo de segundo grau.

Diferenciando a equação (3.84) em x , tem-se que

$$\mathbf{u}_x(x_i) = Q_1'(x_i) + Q_2'(x_i). \quad (3.85)$$

Sendo possível, por meio da equação (3.81), calcular $(\mathbf{u}_x^+)_i$ e $(\mathbf{u}_x^-)_i$, sendo

$$Q'_1(x_i) = D_{k+\frac{1}{2}}^1 \mathbf{u}, \quad (3.86)$$

e

$$Q'_2(x_i) = D_k^2 \mathbf{u}, \quad (3.87)$$

em que $k = i$ para $(\mathbf{u}_x^+)_i$ e $k = i - 1$ para $(\mathbf{u}_x^-)_i$.

Para o cálculo da função ϕ , implementou-se a metodologia de Hamilton-Jacobi WENO, a qual consiste em uma combinação ponderada das derivadas provenientes do método de HJ-ENO de terceira ordem, em que a soma dos pesos resulta em 1. Assim, analogamente ao cálculo dos termos convectivos da equação de movimento mostrado anteriormente, utilizou-se o método *Upwinding* juntamente com o WENO para obter uma ordem superior, alcançando um método de quinta ordem.

A formulação utilizada para a implementação do método de HJ-WENO é apresentada como

$$\phi_x^1 = \frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6}, \quad (3.88)$$

$$\phi_x^2 = -\frac{v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{3}, \quad (3.89)$$

$$\phi_x^3 = \frac{v_3}{3} + \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6}, \quad (3.90)$$

em que $v_1 = D^- \phi_{i-2}$, $v_2 = D^- \phi_{i-1}$, $v_3 = D^- \phi_i$, $v_4 = D_{i+1}^-$ e $v_5 = D^- \phi_{i+2}$.

Com isso, tem-se

$$\phi_x^- = w_1 \phi_x^1 + w_2 \phi_x^2 + w_3 \phi_x^3. \quad (3.91)$$

Ainda segundo Osher et al. [21], para obter uma precisão de alta ordem em regiões suaves, os coeficientes $w_1 = 0, 1$, $w_2 = 0, 6$ e $w_3 = 0, 3$ são os quais otimizam a solução.

3.4.3 Reinicialização de ϕ

Como dito anteriormente, a equação (3.62) representa a taxa de variação em relação ao tempo do valor da função distância que está sendo transportada convectivamente pelo campo de velocidade \mathbf{u} , e esta deve ser resolvida a todo passo de tempo para identificar a posição da interface. Como a função distância é diferente para cada passo de tempo, esta deve ser constantemente atualizada. A reinicialização da função distância faz-se necessária com a evolução da interface a fim de evitar que esta perca suas propriedades e afete a estabilidade numérica da simulação. Osher e Fedkiw [20] recomendam que a função $\phi(x, t)$ seja regularmente redefinida como mostra a equação (3.92).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t_v} + S(\phi)(1 - |\nabla \phi|) = 0, \quad (3.92)$$

onde t_v é um tempo virtual e $S(\phi)$ é o sinal da função ϕ . Para isso, utiliza-se a propriedade de que, para $t_v \rightarrow \infty$, $|\nabla \phi| = 1$. Assim, para cada passo de tempo, faz-se pelo menos três iterações de reinicialização para se obter os valores corrigidos da função distância, ϕ .

Como a reinicialização é mais importante nas proximidades da interface, utilizam-se estruturas de tubos ao seu redor, ou máscaras, de modo a separar o domínio em diferentes intervalos. Isso contribui para a localização dos pontos nos quais a função distância será reinicializada, em relação à interface, de modo a evitar cálculos desnecessários. Assim, denomina-se m a função que representa cada um desses intervalos, ou tubos. Uma representação dessa função é mostrada na Figura 3.11.

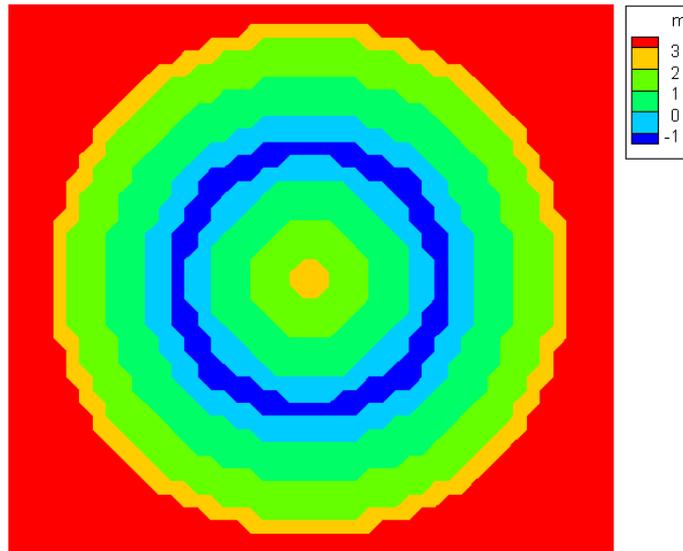


Figura 3.11: Estrutura de tubos, ou máscaras, representada pela função m .

A estrutura de tubos é definida como:

- Inicialmente, define-se $m = 4$ para todos os pontos da malha;
- Todos os cálculos por diferenças finitas da função distância que atravessam a interface: $m = -1$;
- Pontos nos quais $|\phi| \leq \alpha$ e $m \neq -1$: $m = 0$;
- Pontos nos quais $|\phi| > \alpha$ e $|\phi| \leq \beta$: $m = 1$;
- Pontos nos quais $|\phi| > \beta$ e $|\phi| \leq \gamma$: $m = 2$;
- Pontos nos quais $m = 4$ e $|\phi| > \gamma$: $m = 3$.

onde os parâmetros α , β e γ representam as larguras das estruturas de tubos e são definidos como:

$$\begin{aligned}\alpha &= 3,0 \cdot \text{máximo}\{\Delta x, \Delta y\}; \\ \beta &= 6,0 \cdot \text{máximo}\{\Delta x, \Delta y\}; \\ \gamma &= 9,0 \cdot \text{máximo}\{\Delta x, \Delta y\}.\end{aligned}$$

3.4.4 Implementação da Força de Contato na Equação de Navier-Stokes

Implementando o método Level Set, adiciona-se a componente da força de contato da interface, $\mathbf{F}_c = \sigma\kappa\delta(\phi)\hat{\mathbf{n}}$, na equação de Navier-Stokes aplicada ao escoamento de Hagen-Poiseuille, resultando em

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - G \hat{\mathbf{e}}_x + \sigma\kappa\delta(\phi)\hat{\mathbf{n}}. \quad (3.93)$$

Reescrevendo a equação (3.93) de maneira adimensional, tem-se

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{12}{Re} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{12}{Re} \hat{\mathbf{e}}_x + \frac{r_a \kappa}{Re Ca} \delta(\phi) \hat{\mathbf{n}}, \quad (3.94)$$

onde Ca é o número de capilaridade, que representa o efeito relativo entre a viscosidade e a tensão superficial que atua através da interface, como mostra a equação (3.95). E r_a é a razão de aspecto (raio da gota, a , dividido pela distância entre as placas, H).

$$Ca = \frac{\mu a U}{\sigma H}. \quad (3.95)$$

A velocidade adimensional U é dada por

$$U = \frac{\|G\| H^2}{12\mu}, \quad (3.96)$$

onde $\|G\|$ é a intensidade do gradiente de pressão gerador do escoamento.

Para o escoamento de Hagen-Poiseuille multifásico bidimensional, a equação (3.94) se reduz a

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{12}{Re} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{12}{Re} + \frac{r_a \kappa}{Re Ca} \delta(\phi), \quad (3.97)$$

e

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{12}{Re} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{r_a \kappa}{Re Ca} \delta(\phi). \quad (3.98)$$

3.5 CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno pelo método de projeção são:

- Condições de contorno de Dirichlet:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_w^* \cdot \hat{n} = \mathbf{u}_w \cdot \hat{n} & \text{em } \partial\Theta, \\ \mathbf{u}_w^* \cdot \hat{t} = \mathbf{u}_w \cdot \hat{t} + \Delta t \nabla \chi_w^{n+\frac{1}{2}} \cdot \hat{t} & \text{em } \partial\Theta. \end{cases}$$

- Condições de contorno de Neumann:

$$\left\{ \nabla \chi^{n+\frac{1}{2}} \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{em } \partial\Theta. \right.$$

3.5.1 Cavidade com tampa deslizante

Para o problema da cavidade com velocidade deslizante na tampa superior, tem-se as seguintes condições de contorno especificadas:

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

$$\begin{cases} u = 1, \\ v = 0, \\ dp/dy = 0. \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} u = 0, \\ v = 0, \\ dp/dy = 0. \end{cases}$$

- Parede esquerda ($\forall y$ em $x = x_{min}$) e parede direita ($\forall y$ em $x = x_{max}$)

$$\begin{cases} u = 0, \\ v = 0, \\ dp/dx = 0. \end{cases}$$

3.5.2 Escoamento de Hagen-Poiseuille

Já para o escoamento de Hagen-Poiseuille monofásico, utilizam-se condições de contorno periódicas para as velocidades u e v , como mostrado a seguir:

- Parede superior ($\forall x$ em $y = y_{max}$) e parede inferior ($\forall x$ em $y = y_{min}$)

$$\begin{cases} u = 0, \\ v = 0, \\ dp/dy = 0. \end{cases}$$

- Parede esquerda ($\forall y$ em $x = x_{min}$) e parede direita ($\forall y$ em $x = x_{max}$)

$$\begin{cases} u(x=0) = u(x=x_{max}), \\ v(x=0) = v(x=x_{max}), \\ p(x=0) = p(x=x_{max}). \end{cases}$$

3.5.3 Cisalhamento simples em escoamento multifásico

No cisalhamento simples de escoamento multifásico, tem-se:

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

$$\begin{cases} u = 1, \\ v = 0, \\ dp/dy = 0. \end{cases}$$

- parede inferior ($\forall x$ em $y = y_{min}$)

$$\begin{cases} u = -1, \\ v = 0, \\ dp/dy = 0. \end{cases}$$

- Parede esquerda ($\forall y$ em $x = x_{min}$) e parede direita ($\forall y$ em $x = x_{max}$)

$$\begin{cases} u(x = 0) = u(x = x_{max}), \\ v(x = 0) = v(x = x_{max}), \\ p(x = 0) = p(x = x_{max}). \end{cases}$$

3.5.4 Escoamento multifásico em tubulação fechada circular - Hagen-Poiseuille Multifásico

Por fim, para o escoamento multifásico em tubulação, no qual a gota é transportada pela fronteira periódica do domínio computacional, tem-se:

- Parede superior ($\forall x$ em $y = y_{max}$) e parede inferior ($\forall x$ em $y = y_{min}$)

$$\begin{cases} u = 0, \\ v = 0, \\ dp/dy = 0. \end{cases}$$

- Parede esquerda ($\forall y$ em $x = x_{min}$) e parede direita ($\forall y$ em $x = x_{max}$)

$$\begin{cases} u(x = 0) = u(x = x_{max}), \\ v(x = 0) = v(x = x_{max}), \\ p(x = 0) = p(x = x_{max}), \\ \phi(x = 0) = \phi(x = x_{max}), \\ m(x = 0) = m(x = x_{max}). \end{cases}$$

4 RESULTADOS

4.1 CAVIDADE

A resolução do problema da cavidade foi o ponto de partida para adaptar este problema e incluir o módulo do método Level Set e condições de contorno periódicas. Na primeira etapa do trabalho, foi concluída a resolução do problema da cavidade bidimensional, de lado unitário, com tampa superior deslizante conhecido como Lid-Driven Cavity Flow, onde foi feita uma discretização por diferenças finitas, alcançando o método de projeção de segunda ordem tanto no tempo, quanto no espaço. O problema da cavidade já é consolidado na literatura e por isso, simulações são feitas partindo desta para garantir um bom funcionamento comparando os resultados encontrados com os da literatura como meio de validar a simulação.

Os resultados do problema inicial da cavidade são apresentados a seguir. Foram feitas análises de convergência de malha, custo computacional associado e comparações com resultados da literatura como modo de validar os resultados obtidos.

4.1.1 Estudo de convergência de malha

A fim de estabelecer um refinamento padrão para a malha, que será utilizada em todas as simulações posteriores, é necessário analisar a convergência dos resultados dependentes do refinamento da malha. Portanto, foram comparados resultados para diferentes quantidades de pontos (nx, ny) na discretização da malha.

Na comparação utilizou-se um número de Reynolds igual a 100 (de modo que o escoamento seja mais espressivo) e, um tempo de análise igual a 20,0. Dessa forma, gerou-se imagens dos campos de velocidade e de pressão para malhas com 20, 33, 65, 129, 257 e 513 pontos em cada um dos seus eixos. Nas Figuras 4.2 encontram-se os resultados para o campo de velocidade u . Da mesma forma, nas Figuras 4.3 encontram-se os resultados para o campo de velocidade v e nas Figuras 4.4 os resultados para o campo de pressão p .

Os campos de velocidades u e v mostrados na Figura 4.2 e 4.3, respectivamente, representam o valor das velocidades em cada ponto da malha e os resultados ilustram bem a reação do campo de velocidade com o cisalhamento causado pela tampa se movendo com velocidade $U = 1$, onde os extremos superiores da cavidade tem a maior variação de velocidade e ilustram também nos pontos inferiores a geração de vórtices secundários e terciários, além do vórtice principal na região central da cavidade.

O campo escalar de pressão p mostrado na Figura 4.3 representa o valor da pressão em cada ponto da malha e ilustra claramente os pontos de maior e menor pressão onde há o cisalhamento nas extremidades superiores, onde representa o contato com as extremidades superiores das paredes laterais e inclusive são pontos críticos que podem haver conflitos nas condições de contorno se não forem bem definidas.

Baseado nas Figuras 4.2, 4.3 e 4.4, é possível notar pela aparência das regiões de recirculação de fluido e pela suavidade dos contornos das imagens 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 conver-

gência do programa aumentou consideravelmente, gerando um maior custo computacional.

Além da análise qualitativa feita anteriormente a partir da comparação das figuras, considera-se importante uma verificação quantitativa da variação numérica das velocidades u e v , e da pressão p , em algum ponto específico da cavidade para as diferentes quantidades de pontos utilizados na discretização da malha. O ponto escolhido para a análise foi o centro geométrico da cavidade e a Tabela 4.1 mostra os valores de u , v e p encontrados. De forma compacta, os resultados são mostrados no gráfico da Figura 4.1.

Malha utilizada	u	v	p
20x20	-0,13160833	0,01957576	-0,01280928
33x33	-0,13459663	0,01866091	-0,01436124
65x65	-0,13623964	0,01844710	-0,01608672
129x129	-0,13661957	0,01842809	-0,01744402
257x257	-0,13670432	0,01852193	-0,01792842
513x513	-0,13671940	0,01846212	-0,01870138

Tabela 4.1: Comparação dos valores de u , v e p para diferentes quantidades de pontos na malha.

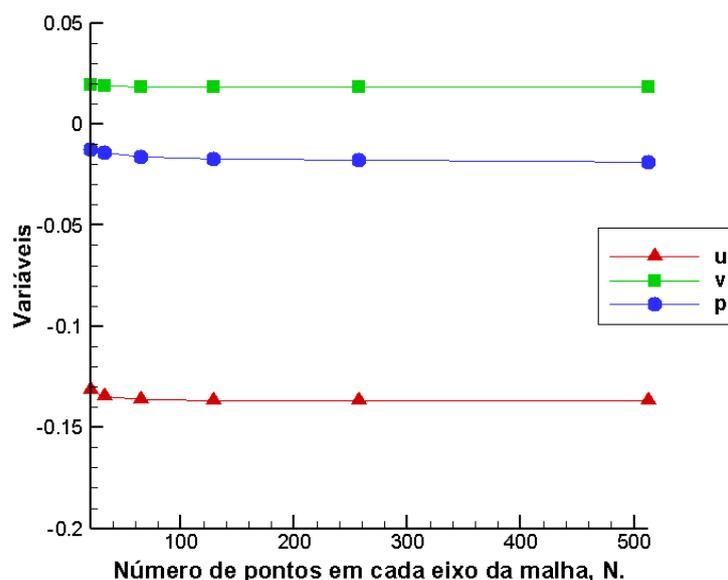
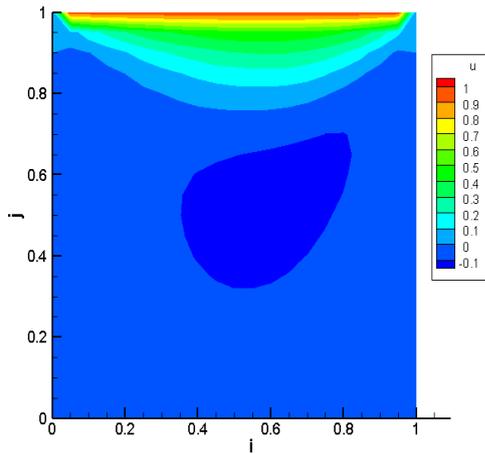
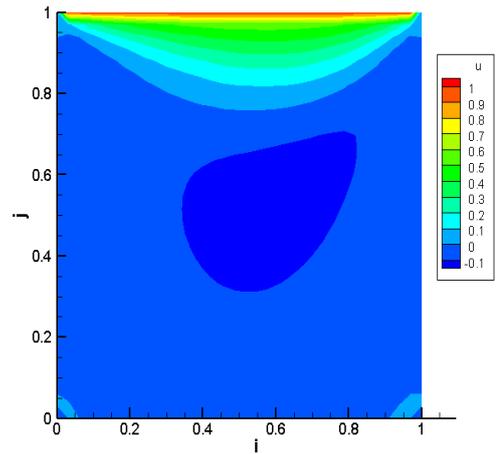


Figura 4.1: Convergência das variáveis u , v e p para diferentes números de pontos para a malha.

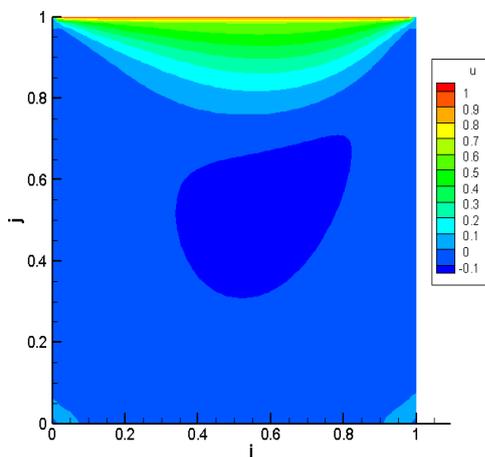
Na comparação numérica de diferentes malhas utilizadas verifica-se que, assim como na comparação visual dos campos de velocidade e de pressão, da malha 129 x 129 em diante os valores tendem a variar muito pouco, enquanto o custo computacional associado a um grande aumento na quantidade de pontos da malha pode resultar em um longo tempo de processamento para a convergência dos resultados. Assim, a malha padrão utilizada daqui em diante para o escoamento cisalhante será a de 129 x 129.



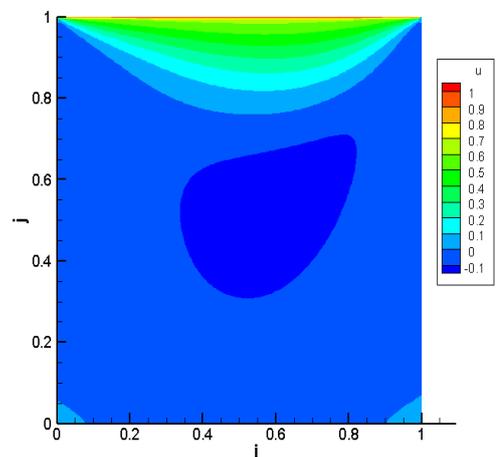
(a) Malha 20 x 20.



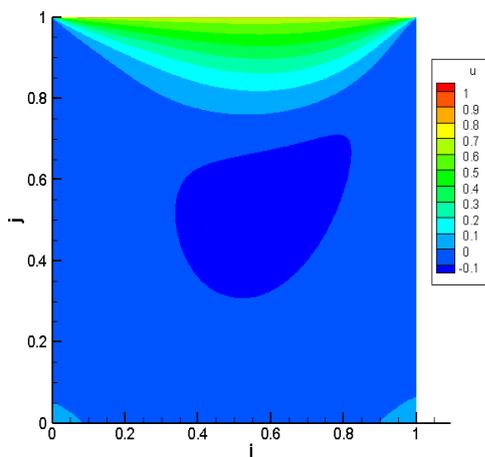
(b) Malha 33 x 33.



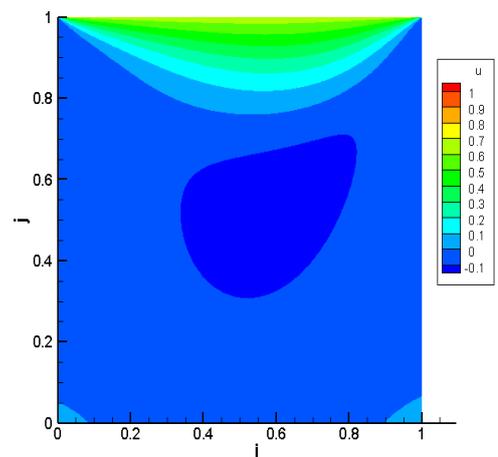
(c) Malha 65 x 65.



(d) Malha 129 x 129.

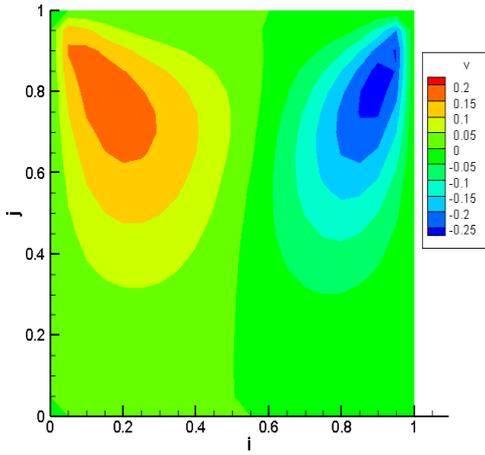


(e) Malha 257 x 257.

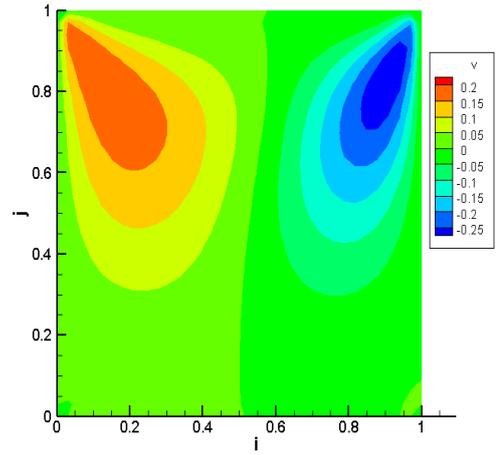


(f) Malha 513 x 513.

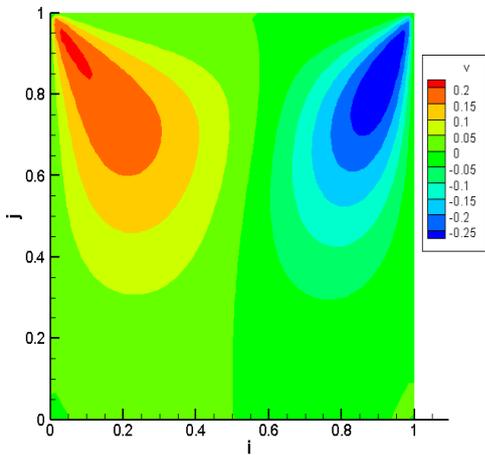
Figura 4.2: Distribuição do campo de velocidade u para diferentes quantidades de pontos na malha.



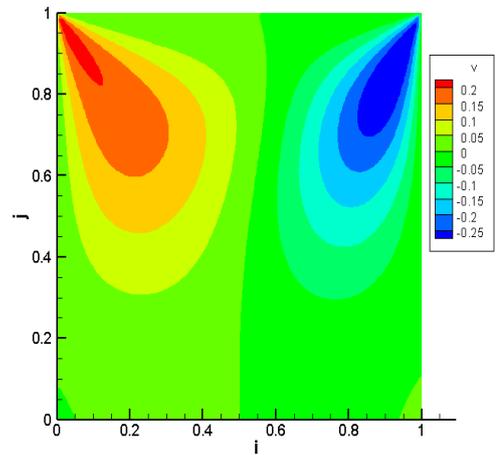
(a) Malha 20 x 20.



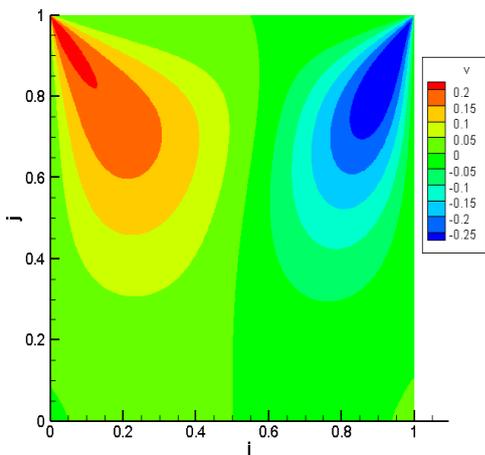
(b) Malha 33 x 33.



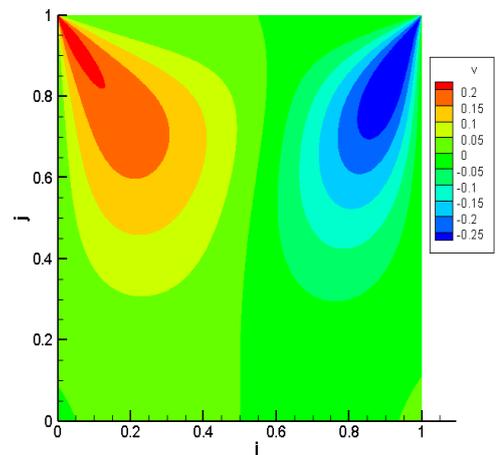
(c) Malha 65 x 65.



(d) Malha 129 x 129.

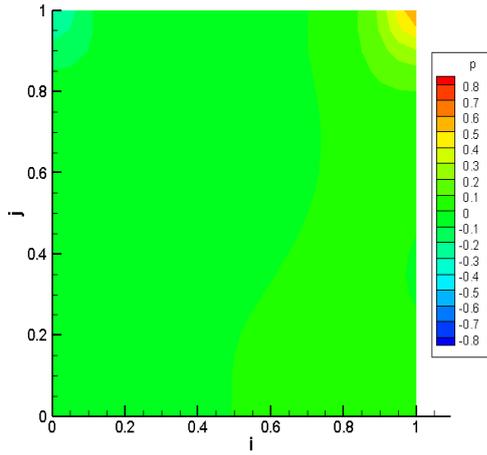


(e) Malha 257 x 257.

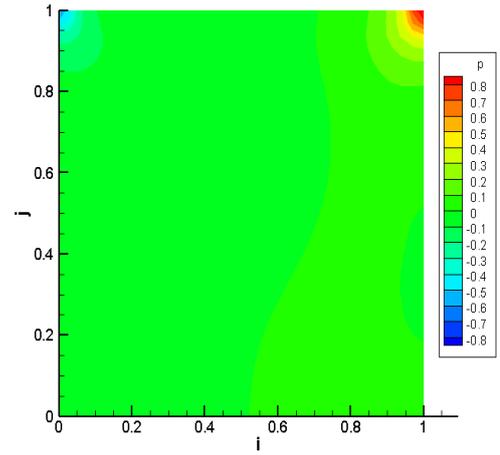


(f) Malha 513 x 513.

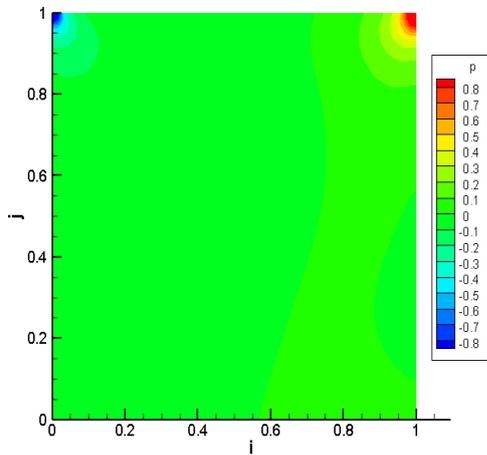
Figura 4.3: Distribuição do campo de velocidade v para diferentes quantidades de pontos na malha.



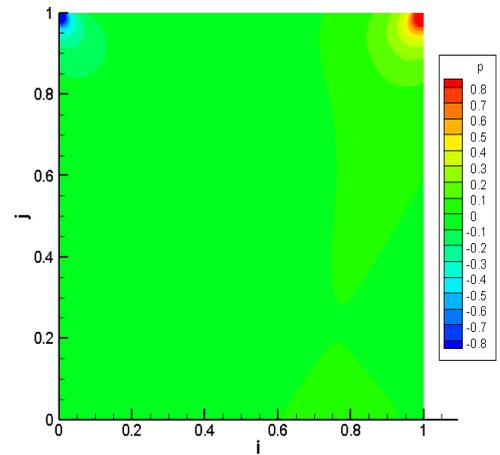
(a) Malha 20 x 20.



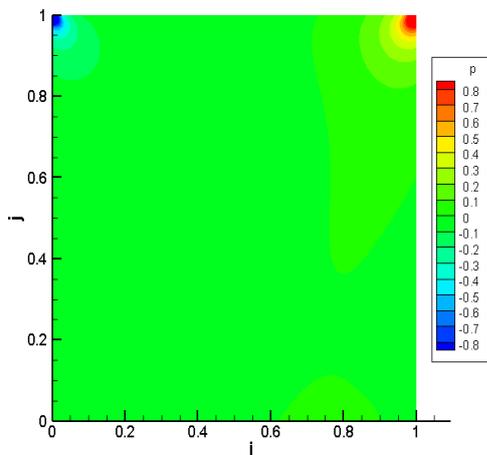
(b) Malha 33 x 33.



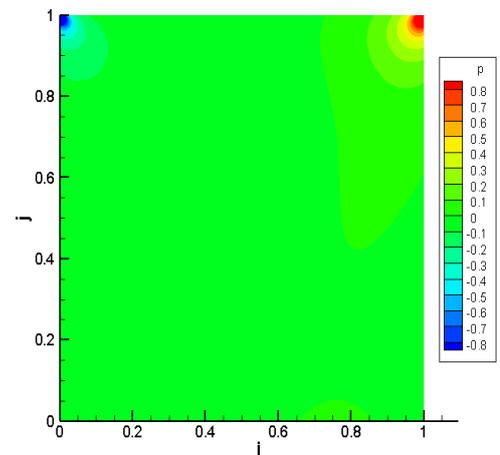
(c) Malha 65 x 65.



(d) Malha 129 x 129.



(e) Malha 257 x 257.



(f) Malha 513 x 513.

Figura 4.4: Distribuição do campo de pressão p para diferentes quantidades de pontos na malha.

4.1.2 Validação dos resultados

Como forma de validar os resultados obtidos na simulação da cavidade, gerou-se dados para o perfil de velocidade e linhas de corrente do escoamento para diferentes números de Reynolds, da mesma forma feita por Ghia, Ghia e Shin [9]. Os autores tinham como objetivo obter a solução do problema do escoamento cisalhante para o maior número de Reynolds possível, onde chegaram até o valor de $Re = 10^4$, usando o método de multigrid. A fim de manter a análise do escoamento dentro do padrão de interesse deste trabalho, comparou-se os resultados gerados com os obtidos por esses autores para números de Reynolds de 100, 400 e 1000, onde considera-se o escoamento em regime laminar.

Em seu trabalho, Ghia, Ghia e Shin [9] fornecem tabelas e gráficos contendo o perfil das velocidades u e v do escoamento na malha 129×129 , 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 Figuras 4.5 e 4.6 são mostrados os seus resultados para os perfis encontrados das velocidades u e v , respectivamente. Na Figura 4.7 são mostradas as legendas utilizadas nas Figuras 4.5 e 4.6.

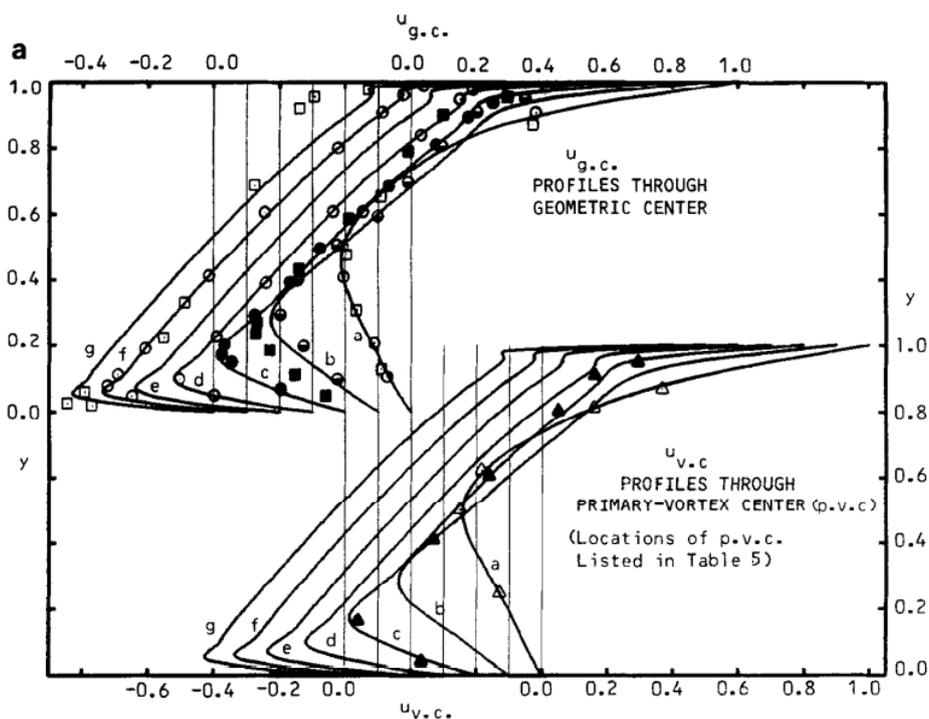


Figura 4.5: Perfis de velocidade u para o centro geométrico da cavidade e centro do vórtice primário encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].

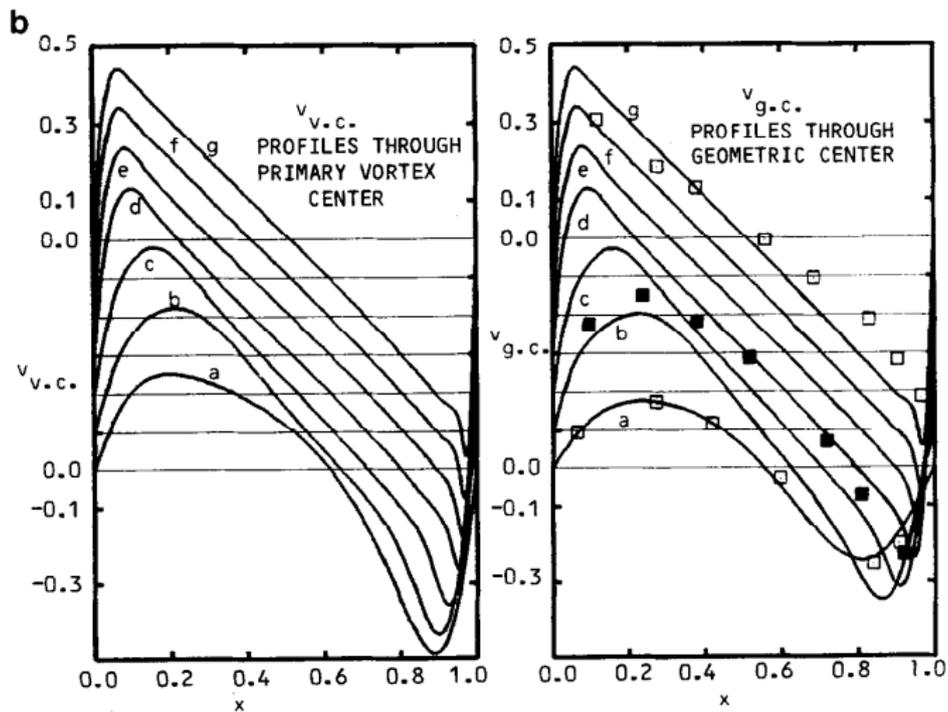
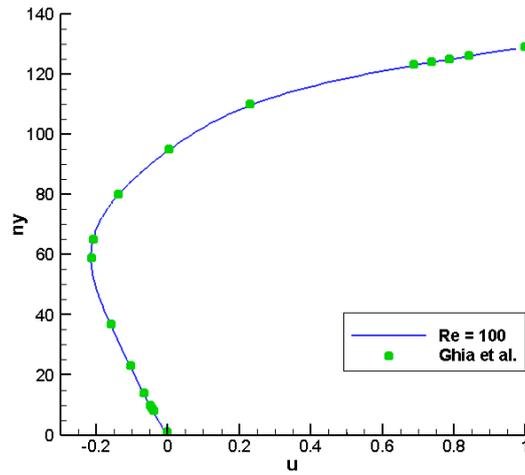


Figura 4.6: Perfis de velocidade v para o centro geométrico da cavidade e centro do vórtice primário encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].

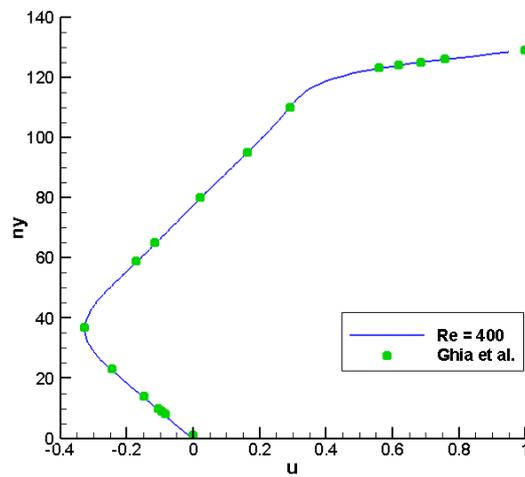
		LEGEND						
Re		100	400	1000	3200	5000	7500	10000
Source		a	b	c	d	e	f	g
Present		—	—	—	—	—	—	—
Rubin and Khosla [1977]		△		▲				
Nallasamy & Prasad [1977]		□		■				□
Agarwal [1981]		○	◐	●	○		○	

Figura 4.7: Legendas utilizadas nas figuras 4.5 e 4.6 dos perfis de velocidade de Ghia, Ghia e Shin [9].

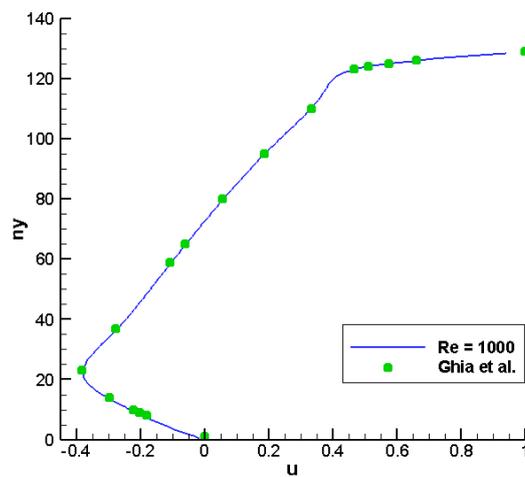
Os perfis encontrados para u e v no centro geométrico da cavidade na simulação feita neste trabalho com uma malha também de 129×129 foram comparados com os de Ghia, Ghia e Shin [9]. As Figuras 4.8(a), 4.8(b) e 4.8(c) mostram a comparação dos perfis de velocidade u feita para números de Reynolds de 100, 400 e 1000, respectivamente. As linhas contínuas representam os perfis encontrados neste presente trabalho e as linhas tracejadas os perfis encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9]. Já as Figuras 4.9(a), 4.9(b) e 4.9(c) mostram a comparação dos perfis de velocidade v feita para números de Reynolds de 100, 400 e 1000, respectivamente.



(a) $Re = 100$.

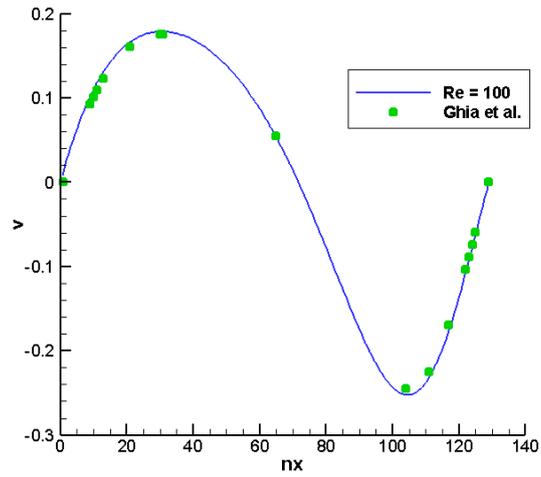


(b) $Re = 400$.

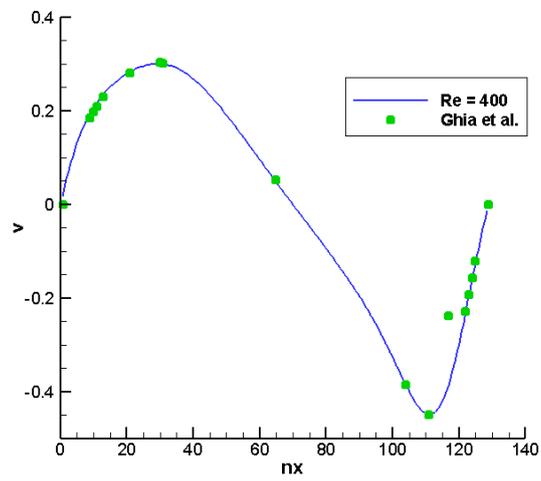


(c) $Re = 1000$.

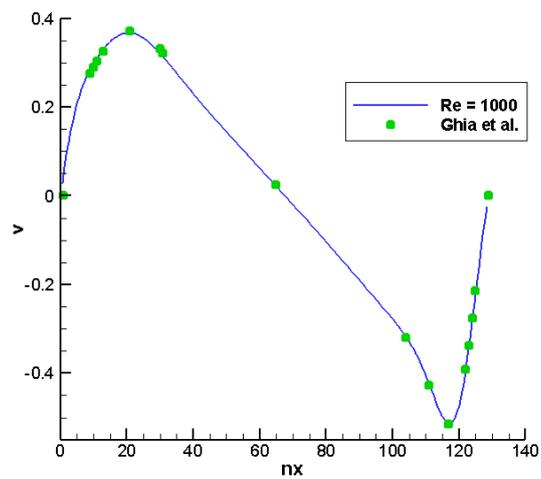
Figura 4.8: Comparação dos perfis de velocidade u encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].



(a) $Re = 100$.

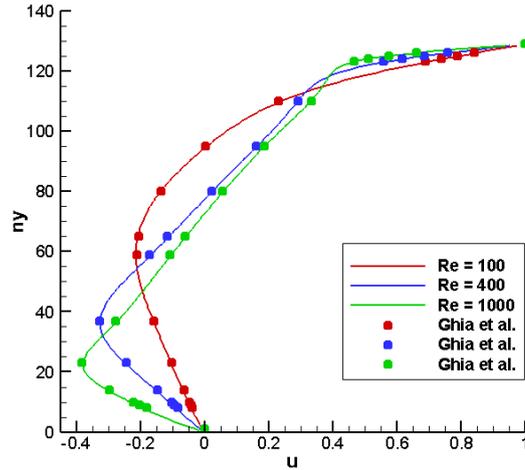


(b) $Re = 400$.

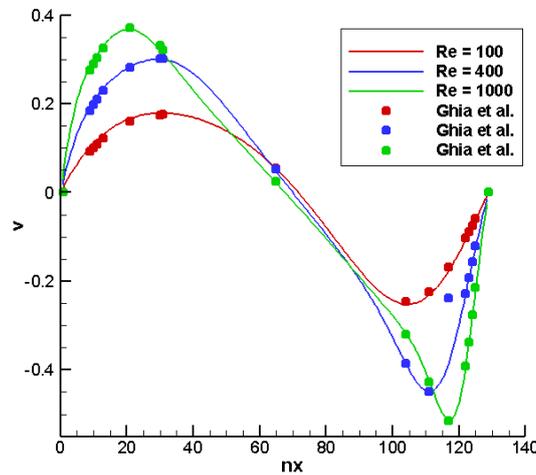


(c) $Re = 1000$.

Figura 4.9: Comparação dos perfis de velocidade v encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].



(a) Perfis de velocidade u .

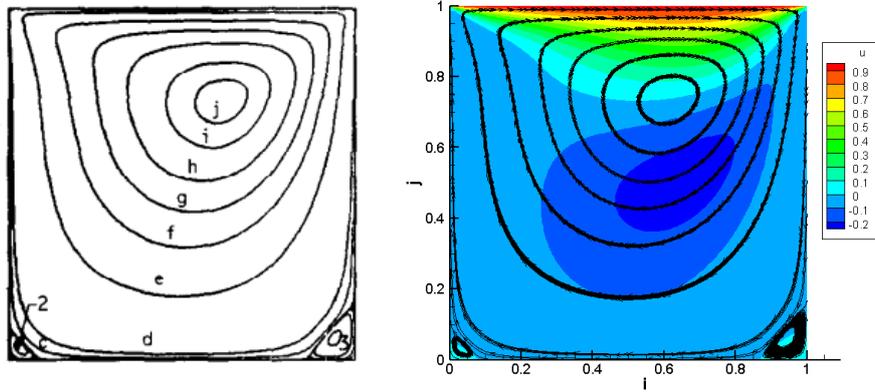


(b) Perfis de velocidade v .

Figura 4.10: Comparação dos perfis de velocidade u e v encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para diferentes números de Reynolds.

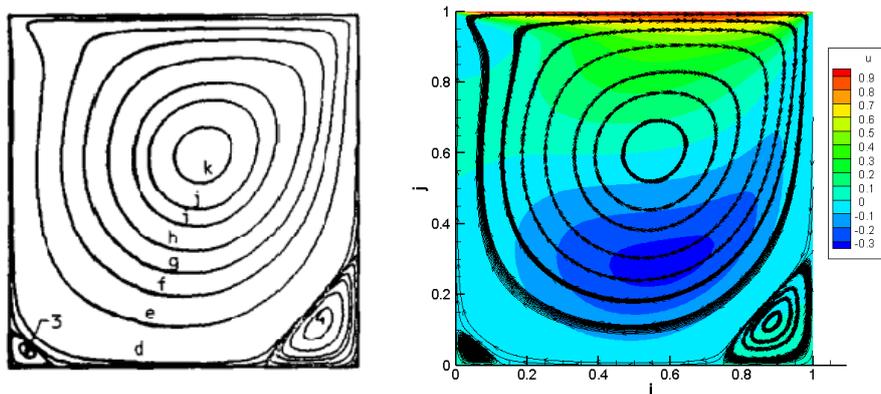
Como nas Figuras 4.5 e 4.6, as quais mostram as comparações dos perfis de velocidades para diferentes números de Reynolds feitas pelos autores do artigo usado para comparação [9], as Figuras 4.10(a) e 4.10(b) mostram a comparação, para diferentes números de Reynolds, dos perfis de velocidade u e v gerados no centro geométrico da cavidade da simulação aqui feita.

Além dos perfis de velocidade no centro geométrico da cavidade, considera-se importante a comparação das linhas de corrente a fim de validar os resultados da simulação. Portanto, as Figuras 4.11, 4.12 e 4.13 comparam os resultados gerados para as linhas de corrente, para números de Reynolds de 100, 400 e 1000, com os resultados de linhas de corrente encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9].



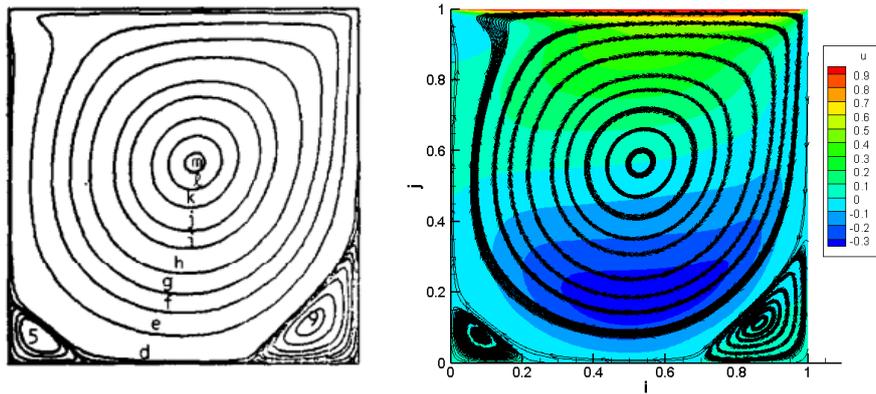
(a) Linhas de corrente encontradas por (b) Linhas de corrente encontradas no presente trabalho, Ghia, Ghia e Shia [9].

Figura 4.11: Comparação das linhas de corrente encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para $Re = 100$.



(a) Linhas de corrente encontradas por (b) Linhas de corrente encontradas no presente trabalho, Ghia, Ghia e Shia [9].

Figura 4.12: Comparação das linhas de corrente encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para $Re = 400$.



(a) Linhas de corrente encontradas por Ghia, Ghia e Shia [9]. (b) Linhas de corrente encontradas no presente trabalho.

Figura 4.13: Comparação das linhas de corrente encontrados neste trabalho com os encontrados por Ghia, Ghia e Shin [9] para $Re = 1000$.

As linhas de corrente para diferentes números de Reynolds apresentadas nas Figuras 4.11, 4.12 e 4.13 ilustram a presença de um vórtice principal na região central da cavidade, onde este é o maior vórtice encontrado, um vórtice secundário na região inferior direita e um vórtice terciário na região inferior esquerda da cavidade. Conforme há um aumento do número de Reynolds, o vórtice principal tende a ficar cada vez mais centralizado na cavidade e há tendência de um crescimento substancial dos vórtices secundário e terciário. Normalmente, neste problema estudado, também surgem outros vórtices na região lateral esquerda superior e lateral direita superior, porém estes fenômenos ocorrem apenas para números de Reynolds bem maiores do que os aqui apresentados, os quais não são de grande relevância para o desenvolvimento deste trabalho.

Kim e Moin [14] geraram o perfil da velocidade u em função da variável j , que corresponde ao comprimento lateral da cavidade em cisalhamento simples, para o plano vertical médio da malha ($j = 0.5L$). Também como modo de validação dos resultados, a Figura 4.14 mostra a comparação feita do perfil de velocidade aqui gerado com o perfil de velocidade encontrado por Kim e Moin [14].

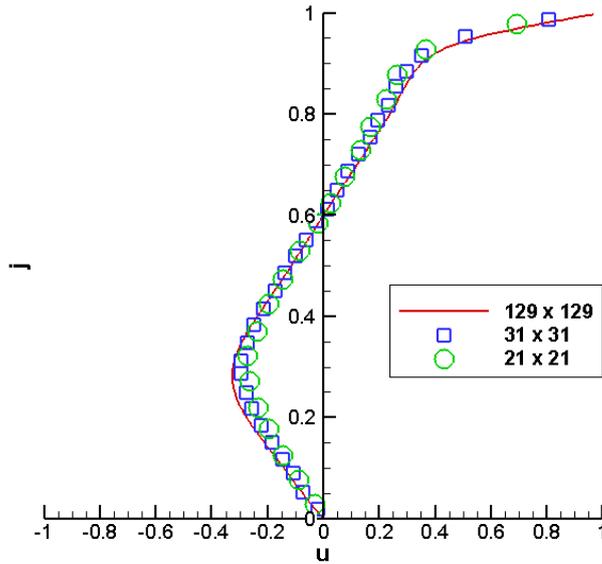


Figura 4.14: Comparação do perfil de velocidade u encontrado neste trabalho (malha 129 x 129 pontos) com o encontrado por Kim e Moin (malha 21 x 21 e 31 x 31 pontos) [14] para $Re = 400$.

O perfil de velocidade foi encontrado mantendo-se as condições de malha 129 x 129 pontos, enquanto no perfil gerado por Kim e Moin [14] utilizou-se malhas de 21 x 21 e 31 x 31 pontos, ambos com $Re = 400$.

A comparação dos perfis de velocidade gerados no centro geométrico da cavidade são satisfatórios quando comparados aos resultados da literatura aqui apresentados. Além disso, a comparação feita das linhas de corrente também apresentam coerência com os resultados da literatura, considerando-se os resultados como válidos. Portanto, utilizando esta simulação como ponto válido de partida deste trabalho, outras simulações surgem a partir desta de modo a investigar o escoamento de gotas partindo de um regime não desenvolvido, até ser plenamente desenvolvido, com a utilização de condições de contorno adequadas.

A simulação foi feita com uma tolerância de 10^{-15} e com o intervalo de tempo para discretização temporal $\Delta t = 0,001$, pois o método é implícito e por isso, não tem restrição no intervalo de tempo como no método explícito, em que calcula-se o intervalo de tempo em função do CFL (Courant-Friedrichs-Lewy), como mostrado na equação (4.1).

$$\Delta t = \frac{h CFL}{u_{max}}. \quad (4.1)$$

Os métodos implícitos não têm essa restrição no intervalo de tempo, porém exigem mais processamento do computador por passo de tempo.

4.2 ESCOAMENTO EM TUBULAÇÕES: HAGEN-POISEUILLE

Como mostra a Figura 4.15, a região a partir da entrada da tubulação até o ponto onde o escoamento se desenvolve plenamente é chamada região de desenvolvimento hidrodinâmico e o seu comprimento é chamado de comprimento de desenvolvimento hidrodinâmico, L_e . Como nesse caso o escoamento é laminar, o campo de velocidade parte de um perfil de velocidade não desenvolvido até um perfil parabólico devido ao campo de pressão imposto ao escoamento.

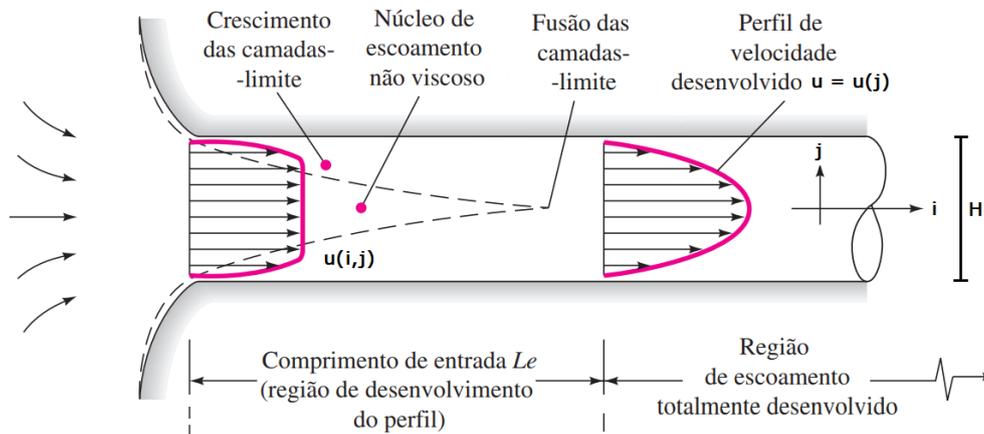
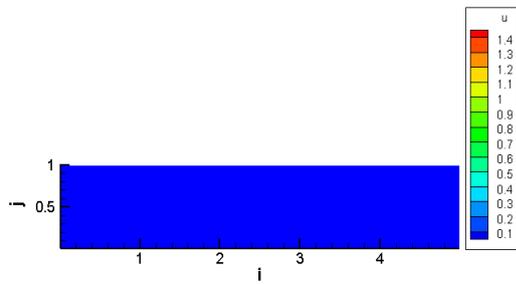
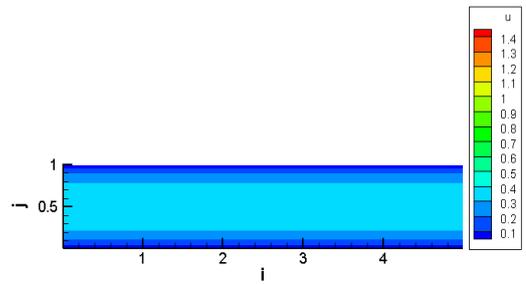


Figura 4.15: Região de desenvolvimento hidrodinâmico no escoamento de Hagen-Poiseuille [35].

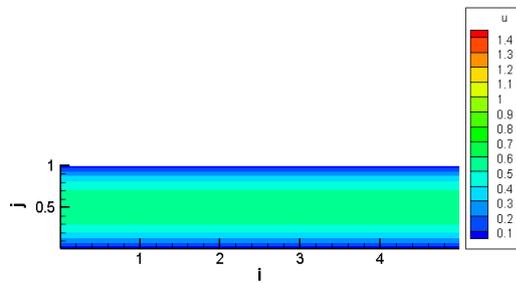
A Figura 4.16 mostra alguns resultados do campo de velocidade u da tubulação em diferentes instantes da simulação com número de Reynolds $Re = 1$, partindo de uma velocidade inicial zero até o pleno desenvolvimento do escoamento. Nessa simulação foi utilizada uma malha de 250×50 pontos, com altura H e largura $L = 5H$, visto que a razão de aspecto da tubulação exigiria uma malha muito robusta, e conseqüentemente um alto custo computacional, para utilizar uma malha com 129 pontos no eixo j , já que a malha utilizada é proporcional ao tamanho da tubulação simulada. A velocidade na linha média do escoamento tem como valor máximo $U = 1,5$ e, como forma de validar esses resultados, algumas comparações com resultados analíticos e da literatura são apresentadas na seção 4.2.1.



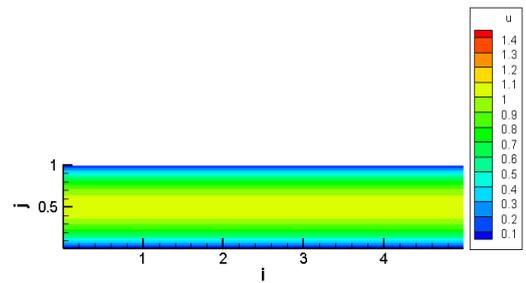
(a) $t = 0$.



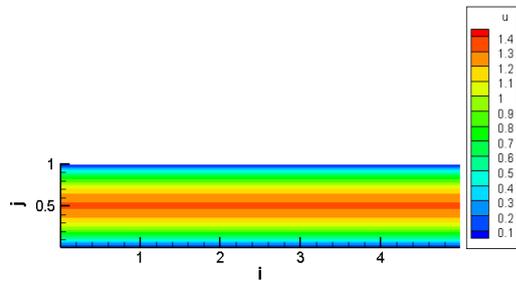
(b) $t = 0,032$.



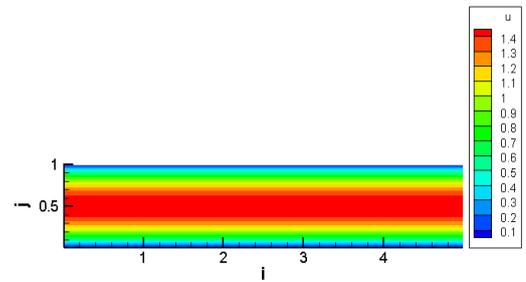
(c) $t = 0,052$.



(d) $t = 0,132$.



(e) $t = 0,212$.



(f) $t = 1,292$.

Figura 4.16: Análise do desenvolvimento do campo de velocidade u gerado no escoamento de Hagen-Poiseulli com $Re = 1$, em diferentes instantes de tempo.

4.2.1 Validação dos resultados

A fim de validar a simulação do escoamento de Hagen-Poiseuille mostrado na Figura 4.16 aqui apresentada, compara-se o perfil de velocidade do escoamento plenamente desenvolvido obtido na simulação com a solução analítica do perfil de velocidade adimensional na seção transversal da tubulação. A equação que representa essa solução analítica é mostrada na equação (4.2). A Figura 4.17 mostra a comparação do resultado numérico encontrado na simulação com a solução analítica.

$$u(j) = 6(j - j^2) \quad (4.2)$$

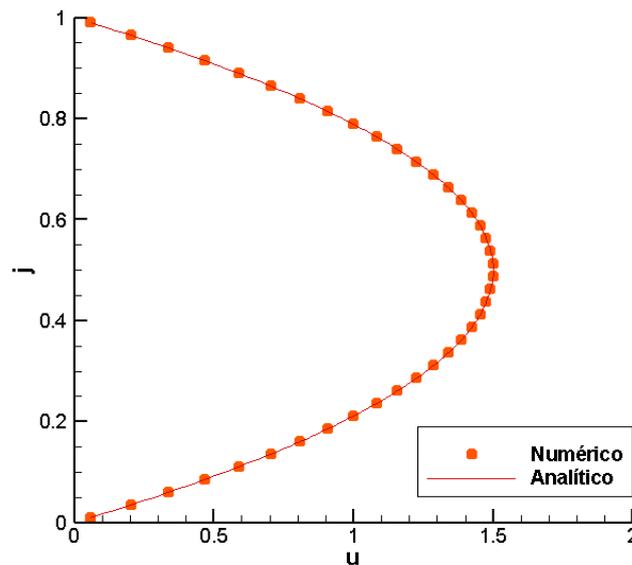


Figura 4.17: Comparação do perfil de velocidade u encontrado no presente trabalho com a solução analítica.

Assim, pela convergência entre os perfis parabólicos apresentados, percebe-se a eficácia da metodologia utilizada e das devidas condições de contorno aplicadas. Além disso, como outro meio de validar os resultados aqui apresentados, foi feita uma comparação com a literatura do comprimento de desenvolvimento hidrodinâmico, o qual foi simulado utilizando a velocidade média do escoamento, onde a velocidade inicial é zero e se desenvolve com a imposição de uma pressão constante, a qual é responsável por gerar o escoamento. A equação (4.3) mostra a relação do comprimento de desenvolvimento hidrodinâmico com o número de Reynolds do escoamento em regime laminar apresentada por Incropera et al [13]. A Figura 4.18 mostra a comparação dos resultados numéricos encontrados com a solução analítica.

$$\frac{L_e}{H} \approx 0.05Re \quad (4.3)$$

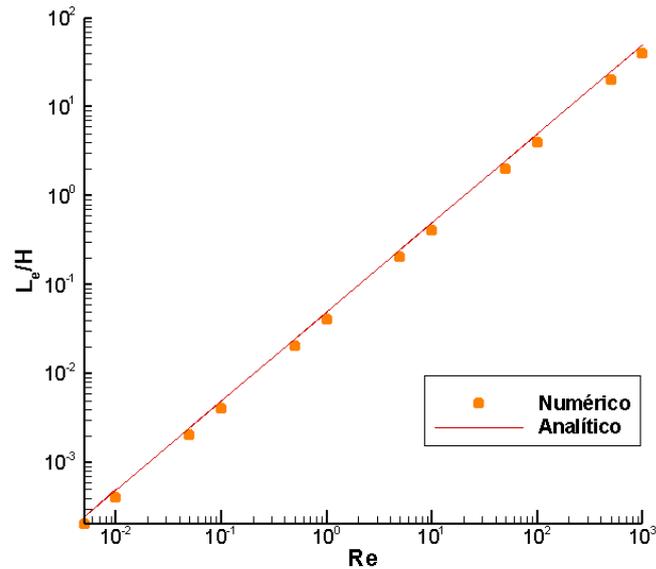
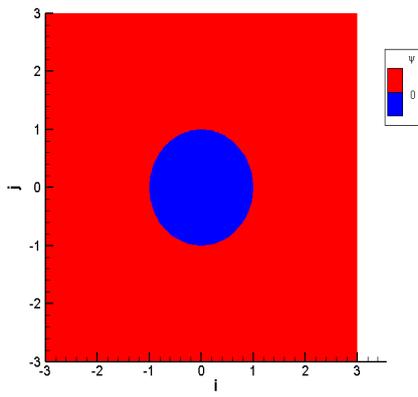


Figura 4.18: Análise do comprimento de desenvolvimento hidrodinâmico na tubulação, comparando-se o resultado numérico encontrado com a solução analítica.

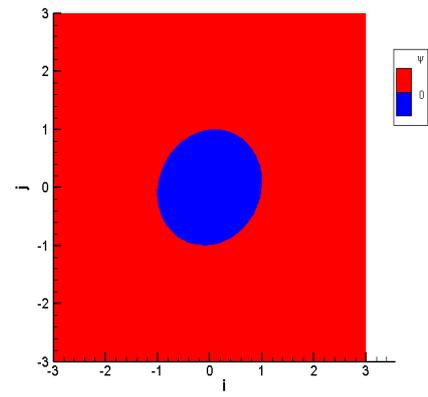
Em comparação com a equação apresentada por Incropera et al [13], o resultado obtido é satisfatório, visto que o gráfico em escala logarítmica apresenta uma pequena discrepância entre o coeficiente linear, mas possui o mesmo coeficiente angular. Essa discrepância pode ser explicada devido às condições de contorno utilizadas por Incropera et al [13] para a região de entrada de fluido na tubulação, como a região de estreitamento da seção transversal ilustrada na Figura 4.15. Enquanto na simulação aqui apresentada, considera-se uma seção transversal da tubulação constante e sem estreitamento abrupto na entrada da região de desenvolvimento hidrodinâmico.

4.3 MISTURA BIFÁSICA - SIMPLE SHEAR

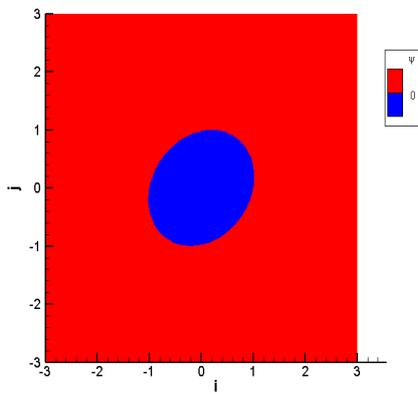
Adicionando a metodologia Level Set às simulações anteriores, obtém-se uma mistura bifásica no escoamento. Primeiramente, no caso da cavidade, foi implementada a gota de modo que essa sofra um cisalhamento simples causado pela velocidade de deslizamento imposta nas fronteiras inferior e superior do domínio da malha, escoamento conhecido como Simple Shear. Desse modo, a parede superior da cavidade se move com velocidade $U = 1$ e a inferior com velocidade $U = -1$, ou seja, em sentidos contrários. Além disso, utilizou-se uma malha de 129×129 pontos, número de Reynolds $Re = 0,01$ e um número de capilaridade $Ca = 2$. Os resultados da função Level Set ϕ , a qual representa a interface da gota, são apresentados na Figura 4.19



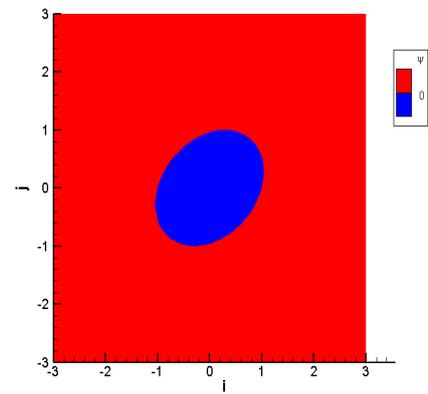
(a) $t = 0.$



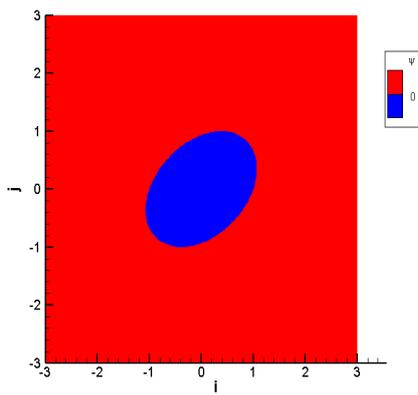
(b) $t = 0,1.$



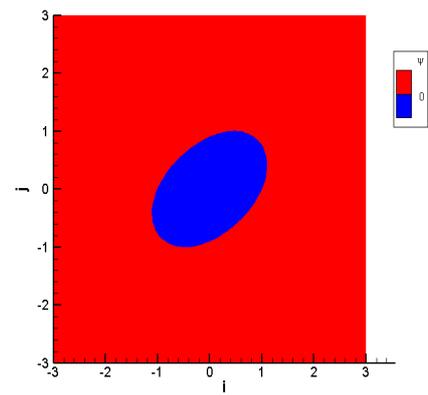
(c) $t = 0,2.$



(d) $t = 0,3.$



(e) $t = 0,4.$



(f) $t = 0,5.$

Figura 4.19: Representação da região interfacial representada pela função ϕ no escoamento de cisalhamento simples, em diferentes tempos de simulação, para $Re = 0,01$ e $Ca = 2$.

É perceptível, portanto, que a gota sofre um cisalhamento simples de modo simétrico em relação ao sentido da velocidade U . Isso ocorre porque as velocidades nas tampas superior e inferior têm a mesma intensidade, mas sentidos contrários, fazendo com que o cisalhamento cause um alongamento transversal na interface da gota.

4.3.1 Efeito da Capilaridade

A capilaridade, Ca , representa o efeito relativo entre a viscosidade e a tensão superficial que atua através da interface e, assim, significa a dureza da interface perante às forças do escoamento no qual a gota está submetida. Verifica-se que quão maior for o número de capilaridade, menor será a força resultante da tensão interfacial na partícula e, com isso, menor será a pressão no interior da interface.

Visando demonstrar esse comportamento, uma breve investigação foi feita para um número de Reynolds fixo em $Re = 0,01$, em um mesmo tempo de simulação $t = 1, 2$, para diferentes valores da capilaridade. A Figura 4.21 mostra os resultados da função Level Set ϕ , dessas simulações. Com isso, percebe-se o aumento de dureza na interface com a diminuição do número de capilaridade, de modo que com $Ca = 0,01$ a deformação na região interfacial é praticamente imperceptível para o escoamento em questão, enquanto para maiores números de capilaridade a gota tende a deformar mais. De forma compilada, esses resultados são mostrados na Figura 4.20.

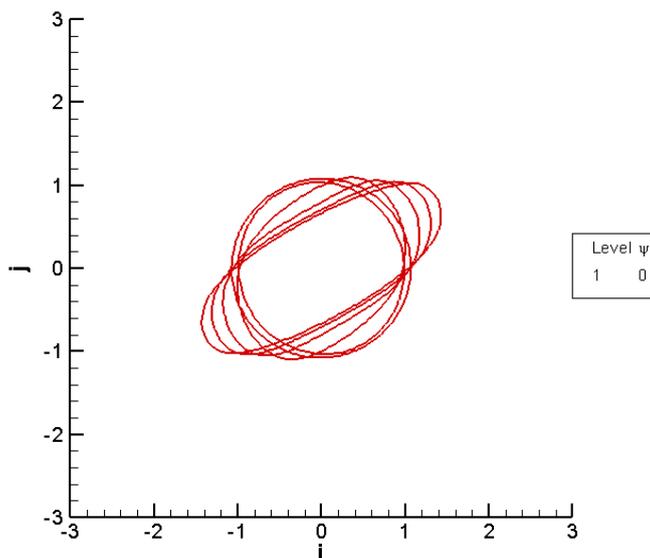
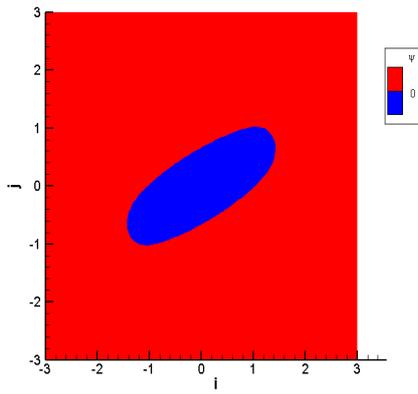
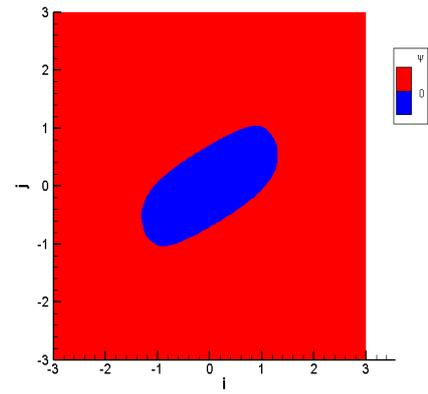


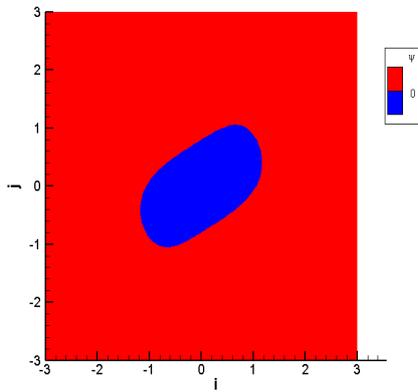
Figura 4.20: Deformações na região interfacial com o aumento do número de capilaridade, Ca , no cisalhamento simples apresentado na Figura 4.21



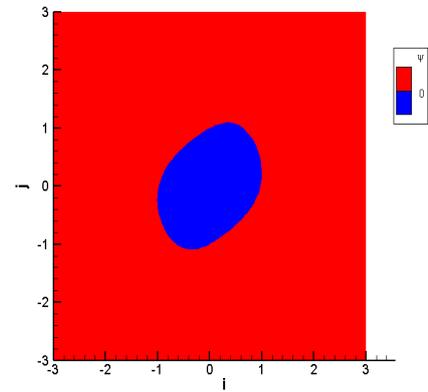
(a) $Ca=5,0$.



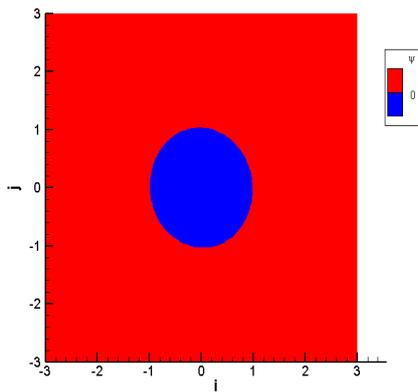
(b) $Ca=2,0$.



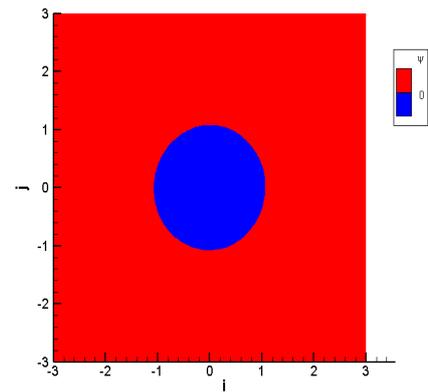
(c) $Ca=1,0$.



(d) $Ca=0,5$.



(e) $Ca=0,1$.



(f) $Ca=0,01$.

Figura 4.21: Representação da região interfacial representada pela função ϕ no escoamento de cisalhamento simples, com $Re = 0,01$ e um mesmo tempo de simulação $t = 1, 2$, para diferentes números de capilaridade, Ca .

4.4 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM TUBULAÇÕES

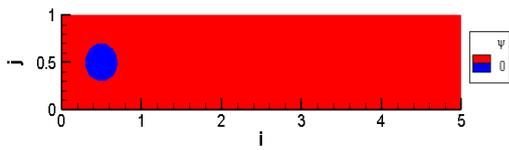
A partir dos casos anteriores, foi possível a simulação do escoamento de uma gota imersa em outro fluido, escoando em uma tubulação devido ao campo de pressão imposto, esse caso representa o escoamento de Hagen-Poiseuille bifásico.

A simulação foi feita com uma malha retangular de 250×50 pontos, com altura H e largura $L = 5H$, e com um número de Reynolds igual a 1, de modo a garantir um escoamento laminar. A tensão superficial da interface foi regulada de modo que a interface não fosse severamente comprimida pelo campo de pressão ao longo do escoamento. Assim, utilizou-se um número de capilaridade igual a 1000, visto que essa relação depende também do número de Reynolds utilizado. A Figura 4.22 mostra os resultados encontrados para a região interfacial da gota, representada pela função level set, ϕ , enquanto essa percorre a tubulação, ou seja, em diferentes instantes de tempo. O campo de pressão dessa simulação em diferentes instantes de tempo é mostrado na Figura 4.23.

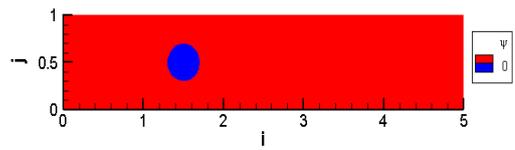
Para isso, foram implementadas condições de contorno periódicas para as funções do Método Level Set, de modo que a gota atravessasse a superfície periódica juntamente com o restante do fluido, obtendo-se um escoamento circular ininterrupto, ou seja, um escoamento considerado infinito. Esse resultado possibilita simulações em tubulações de qualquer comprimento com um domínio numérico fixo, por grandes intervalos de tempo, como em sistemas de petróleo, a fim de estudar os diversos comportamentos entre fluidos com diferentes viscosidades e massas específicas.

A gota foi posicionada na extremidade esquerda da tubulação e a pressão geradora do escoamento, G , é aplicada no sentido da esquerda para a direita. Com esses resultados, verifica-se o movimento da gota no sentido da pressão imposta, atravessando a fronteira periódica no domínio da malha criada. Analisando os campos de pressão, percebe-se a pressão interna gerada na gota pela tensão superficial da interface. Além disso, o escoamento apresenta um padrão no campo de pressão que, dependendo do comprimento do domínio periódico, a gota pode sentir a pressão dela mesma ao longo do domínio periódico, como mostrado nos tempos $t = 0,867$ e $t = 0,958$ da Figura 4.23.

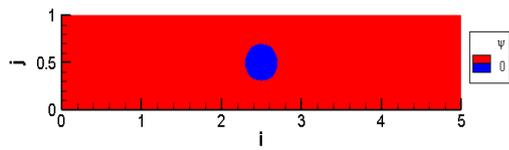
Além disso, várias gotas podem ser adicionadas à simulação e, ao longo do tempo, dependendo das configurações estipuladas ao escoamento, espera-se a dispersão das gotas pelo escoamento. Como consequência, vários padrões de escoamento podem ser encontrados e simulados, assim como os mostrados na Figura 1.1.



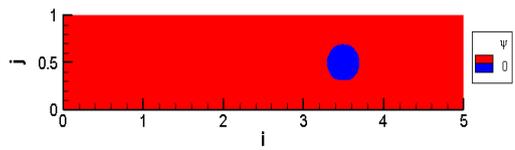
(a) $t = 0$.



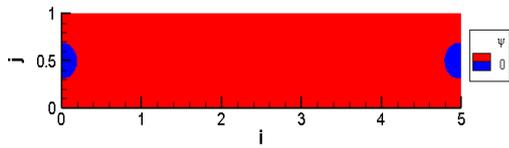
(b) $t = 0,413$.



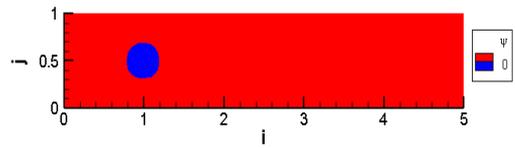
(c) $t = 0,580$.



(d) $t = 0,709$.

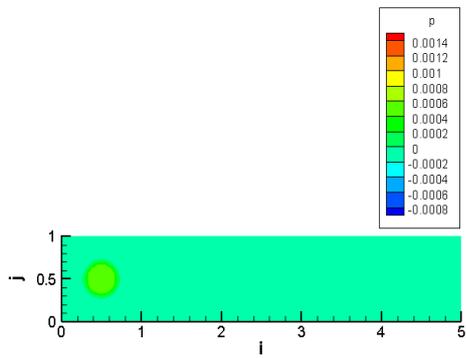


(e) $t = 0,867$.

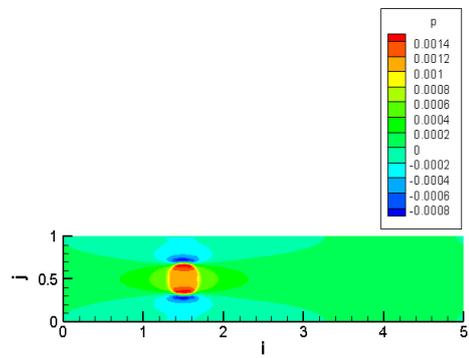


(f) $t = 0,958$.

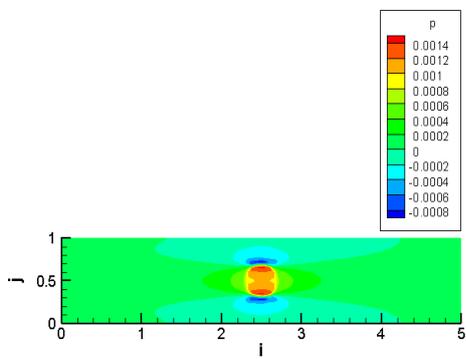
Figura 4.22: Representação da interface pela função ϕ para $Re = 1$ e $Ca = 1000$, em diferentes instantes de tempo, no escoamento de Hagen-Poiseuille bifásico.



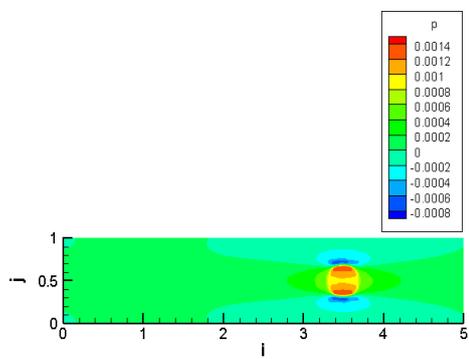
(a) $t = 0$.



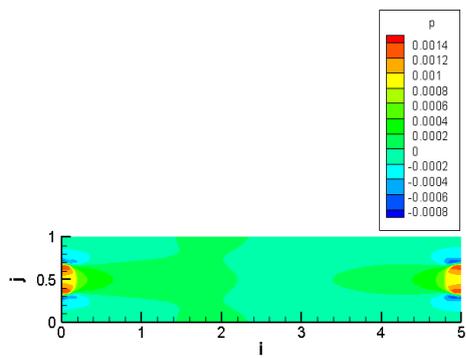
(b) $t = 0,413$.



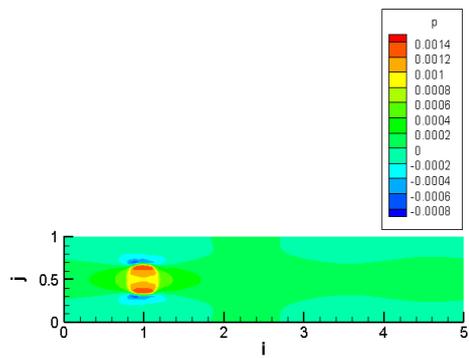
(c) $t = 0,580$.



(d) $t = 0,709$.



(e) $t = 0,867$.



(f) $t = 0,958$.

Figura 4.23: Campo de pressão do escoamento de Hagen-Poiseuille bifásico, para $Re = 1$ e $Ca = 1000$, em diferentes instantes de tempo.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho, inicialmente, foram apresentados os resultados da simulação numérica clássica da cavidade com velocidade de deslizamento na tampa superior conhecido como Lid-Driven Cavity Flow, onde os resultados foram validados quando comparados com outros disponíveis na literatura, além de toda a metodologia utilizada para tal. Além disso, foram feitas modificações na cavidade transformando-a em um canal fechado com entrada e saída de fluido, utilizando-se condições de contorno periódicas. Em seguida, foram apresentados resultados do escoamento bifásico para o cisalhamento simples conhecido como Simple Shear. Por fim, foram implementadas gotas ao escoamento em uma tubulação promovida por um campo de pressão externo, obtendo o escoamento bifásico de Hagen-Poiseuille.

Ademais, a simulação do escoamento multifásico de Hagen-Poiseuille foi aprimorada, adicionando-se condições de contorno periódicas, também, para as funções do método *Level Set*, a fim de promover o transporte da gota pelas fronteiras do domínio numérico. Desse modo, faz-se desnecessário um aumento no tamanho da malha horizontalmente a fim de representar uma tubulação de grande comprimento, que significaria um maior custo computacional e possíveis instabilidades numéricas.

Destarte, os resultados obtidos possibilitam a análise de escoamentos multifásicos em diferentes configurações, visto que o comportamento de escoamentos, verticais e horizontais, com diferentes misturas de fluidos são de interesse tanto para a área acadêmica, quanto para a indústria. Dessa maneira, com um pequeno domínio numérico, é possível simular e estudar os efeitos provenientes do campo de pressão aplicado, das configurações de tensão superficial adotadas, da razão de viscosidade entre os fluidos e da velocidade do escoamento, para comprimentos ilimitados de tubulações.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BALCÁZAR, N., JOFRE, O., LEHMKUHL, L., CASTRO, J., AND RIGOLA, J. A finite-volume/level-set method for simulating two-phase flows on unstructured grids. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 64 (2014), 55–72.
- [2] BELL, J. B., COLELLA, P., AND GLAZ, H. M. A second-order projection method for the incompressible navier stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 85 (1989), 257–283.
- [3] BELL, J. B., AND MARCUS, D. A second-order projection method for variable-density flows. *Journal of Computational Physics*.
- [4] BUNNER, B., AND TRYGGVASON, G. Effect of bubble deformation on the properties of bubbly flows. *Journal of Fluid Mechanics* v. 495 (2002), 77–118.
- [5] CALDERON, F., SCHMITT, V., AND BIBETTE, J. Emulsion science - basic principles. 2^a ed. *New York: Springer Science Business Media, LLC.* (2007).
- [6] CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, v. 22 (1968), 745–762.
- [7] CHORIN, A. J. On the convergence of discrete approximations to the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, v. 23 (1969), 341–353.
- [8] CROCE, R., GRIEBEL, M., AND SCHWEITZER, M. A. Numerical simulation of bubble and droplet deformation by a level set approach with surface tension in three dimensions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 2010 (2010), 963–993.
- [9] GHIA, U., GHIA, K. N., AND SHIN, C. T. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, v. 48 (1982), 387–411.
- [10] HELLEVIK, L. Numerical methods for engineers. *Department of Structural Engineering, NTNU* (2018), 56.
- [11] HOFFMAN, J. D. Numerical methods for engineers and scientists. *Nova Iorque: McGraw-Hill 1. ed.* (1992).
- [12] HUALLPACHOQUE, R. C. C., AND NIECKELE, A. O. Análise numérica do escoamento bifásico horizontal em padrão de golfadas estatisticamente permanente. *Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro* (2010).
- [13] INCROPERA, F. P., AND DEWITT, D. P. Fundamentals of heat and mass transfer. *New York: J. Wiley* (2002).
- [14] KIM, J., AND MOIN, P. Application of a fractional-step method to incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 59 (1985), 308–323.

- [15] KNOLTON, E. D. A microscopic and macroscopic study of dense emulsion rheology. *Tese (PhD in Chemical Engineering) – Department of Chemical Engineering, University of California, Santa Barbara* (2006).
- [16] LALANNE, B., VILLEGAS, L. R., TANGUY, S., AND RISSO, F. On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with level set/ghost fluid method. *Journal of Computational Physics*, v. 301 (2015), 289–307.
- [17] LU, J., BISWAS, S., AND TRYGGVASON, G. A dns study of laminar bubbly flows in a vertical channel. *International Journal of Multiphase Flow* v. 32 (2006), 643–660.
- [18] MULDER, W., AND OSHER, S. Computing interface motion in compressible gas dynamic. *Journal of Computational Physics*, v. 100 (1992), 209–228.
- [19] OLBRICHT, W., AND LEAL, L. The creeping motion of immiscible drops through a converging/diverging tube. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 134 (1983), 329–355.
- [20] OSHER, S., AND FEDKIW, R. P. Level set methods: An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, v. 169 (2000), 463–502.
- [21] OSHER, S., AND FEDKIW, R. P. Level set methods and dynamic implicit surfaces. *Applied Mathematical Sciences*, v. 153 (2003).
- [22] OSHER, S., AND SETHIAN, J. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, v. 79 (1988), 12–49.
- [23] PUCKETT, E. G., ALMGREN, A. S., BELL, J. B., MARCUS, D. L., AND RIDER, W. A high-order projection method for tracking fluid in variable density incompressible flows. *Journal of Computational Physics* v. 130 (1997), 269–282.
- [24] ROMANÓ, F., AND 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 (2016), 75–82.
- [25] ROMANÓ, F., AND KUHLMANN, H. C. Particle-boundary interaction in a shear-driven cavity flow. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, v. 31 (2017), 427–445.
- [26] ROSA, E. S. escoamento multifásico isotérmico: Modelos de multifluidos e de mistura. *Bookman* (2012).
- [27] SETA, G. P., AND MACHADO, L. J. Estudo do escoamento de emulsões utilizando uma ferramenta de simulação fluidodinâmica computacional (cfd) e testes experimentais. *Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para a conclusão do curso de Engenharia*. (2012).
- [28] SMOLIANSKI, A., HAARIO, H., AND LUUKKA, P. Numerical study of dynamics of single bubbles and bubble swarms. *Applied Mathematical Modeling. Manuscrito Aceito*, 10.1016/j.apm.2007.01.004 (2007).

- [29] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., AND OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, v. 114 (1994), 146–159.
- [30] TEMAM, R. Sur l’approximation de la solution des equations de navier-stokes par la methode des fractionnaires ii. *Arch. Rational Mech. Anal.*, v. 33 (1969), 377–385.
- [31] TRYGGVASON, G., ESMAELLI, A., LU, J., AND BISWAS, S. Direct numerical simulations of gas/liquid multiphase flows. *Fluid Dynamics Research* v. 38 (2006), 660–681.
- [32] VIANNA, R. P. F. Aplicação de polissacarídeo em emulsão cosmética: análise reológica. *Curitiba* (2008).
- [33] WEINAN, E., AND LIU, J.-G. Projection method i: convergence and numerical boundary layers. *SIAM Journal on Numerical Analysis archive*, v. 32 (1995), 1017–1057.
- [34] WEINAN, E., AND LIU, J. G. Projection method iii: Spatial discretization on the staggered grid. *Mathematics of Computation*, v. 237 (2001), 27–47.
- [35] WHITE, F. M. Mecânica dos fluidos. [recurso eletrônico]. Tradução: Mario Moro Fecchio, Nelson Manzanares. 6. ed. (2011), 359.
- [36] WROBEL, L. C., EIGER, S., ROSMAN, P. C., TUCCI, C. E., CIRILLO, J. A., AND CABRAL, J. P. Métodos numéricos em recursos hídricos. *Associação Brasileira de Recursos Hídricos – ABRH, Rio de Janeiro*, v. 380 (1989).
- [37] ZHANG, J., MIKSYS, M. J., AND BANKOFF, S. G. Nonlinear dynamics of a two-dimensional viscous drop under shear flow. *Physics of fluids*, v. 18 (2006), 122–146.