

PROJETO DE GRADUAÇÃO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE FLOTAÇÃO DE GOTAS

Por,

Raysa Gomes dos Santos

Brasília, 19 de novembro de 2021

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
Faculdade de Tecnologia
Departamento de Engenharia Mecânica

PROJETO DE GRADUAÇÃO

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE
FLOTAÇÃO DE GOTAS**

Por,
Raysa Gomes dos Santos

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

Banca Examinadora

Taygoara Felamingo de Oliveira, PhD (ENM-UnB)(Orientador) _____

Rodrigo Figueiredo Abdo, MSc (ENM-UnB)(Coorientador) _____

André von Borries Lopes, PhD (ENM-UnB)(Examinador) _____

Rafael Gabler Gontijo, PhD (ENM-UnB)(Examinador) _____

Ivan Rosa de Siqueira, MSc (Rice University)(Examinador) _____

Brasília 19 de novembro de 2021

Resumo

O estudo de emulsões diluídas é de relevância significativa na ciência, principalmente pela maior capacidade de se compreender e prever sua dinâmica. Assim, o presente estudo analisa como se dá esse fato em função da diferença de massa específica entre a fase contínua e o fluido dispersante. Esse fenômeno é modelado a partir da equação de Navier-Stokes em duas dimensões para uma mistura bifásica juntamente com o método de projeção, para solução das equações, e do método de *Level Set*, para captura da interface. O modelo numérico foi validado com a literatura para escoamentos monofásicos em cavidades e bifásicos em cisalhamento simples por meio do perfil de velocidade, deformação, inclinação da gota e comparações visuais com experimentos. Como resultado principal, foi investigado o movimento ascendente de uma bolha em água, comparando-o com casos disponíveis na literatura. Simulou-se a sedimentação de uma gota em uma emulsão diluída, verificando o efeito do número de Bond e de Reynolds no escoamento. Notou-se, no caso da sedimentação, que com o aumento número de Bond a gota tende a se deformar mais rápido, ao passo que com o aumento do número de Reynolds adquire maior velocidade de sedimentação, além de deformar. Por fim, foi investigada a coalescência de duas bolhas com configuração coaxial e oblíqua, percebendo-se que não importa a disposição das bolhas, se elas estiverem próximas o suficiente para haver uma interação, irão coalescer ou quebrar, devido o campo de pressão que modifica o movimento das gotas.

Palavras-chaves: escoamento multifásico, métodos numéricos, Level Set, emulsões

Abstract

The study of diluted emulsions has significant relevance in science, mainly by understanding and predicting your dynamic in several situations. From this perspective, the present study analyzes how this happens due to the difference in densities. This phenomenon is modeled by the Navier-Stokes equation in two dimensions for a two-phase mixture, together with the projection methods, for solving the equations, and *Level Set*, for capturing the interface. The numerical model was validated with the literature for single-phase flows in cavities and biphasic flows in simple shear through the speed, deformation, droplet inclination and visual comparisons with experiments. As a main result, the bubble rising motion in water was investigated due exclusively to the difference of densities. Sedimentation of droplets in a diluated emulsion was investigated as well, it was verified the effect of Bond number and the influence of Reynolds number. It was noticed, in the case of sedimentation, that with increasing Bond number, the drop tends to deform faster, while with increasing Reynolds number, it acquires a greater sedimentation speed, in addition to deforming. Finally, the oblique and co-axial coalescence of two bubbles was investigated, being possible to see that it does not matter the configuration of bubbles, if they are close enough to have an interation they will coalesce or break due to the pressure field that modifies the movement of those around.

Key-words: multiphase flows, numerical methods, Level Set, emulsions

Sumário

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1 | Contextualização | 1 |
| 1.2 | Definição do problema | 2 |
| 1.3 | Objetivos | 3 |
| 1.4 | Revisão bibliográfica | 3 |
| 1.5 | Organização do trabalho | 6 |
| 2 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | 7 |
| 2.1 | Descrições Lagrangeana e Euleriana | 7 |
| 2.2 | Equações de balanço | 8 |
| 2.2.1 | Balanço de massa | 8 |
| 2.2.2 | Balanço de momento | 9 |
| 2.3 | Condições de contorno | 10 |
| 2.3.1 | Condição dinâmica | 10 |
| 2.4 | Representação da interface pelo método de <i>Level Set</i> | 12 |
| 2.5 | Modelo adimensional | 14 |
| 3 | METODOLOGIA NUMÉRICA | 16 |
| 3.1 | Método de diferenças finitas | 16 |
| 3.1.1 | Malha deslocada | 17 |
| 3.2 | Método de projeção | 18 |
| 3.2.1 | Condições de Contorno | 19 |
| 3.2.2 | Método de projeção com massa específica e viscosidade variáveis | 20 |
| 3.3 | Método de <i>Level Set</i> | 23 |
| 3.3.1 | <i>Level Set</i> local | 23 |
| 3.3.2 | Esquemas WENO e ENO | 24 |
| 3.3.3 | Reinicialização da <i>Level Set</i> | 25 |
| 3.3.4 | Discretização temporal da equação advectiva e da reinicialização | 27 |
| 3.4 | Sistema linear | 27 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| 4 | RESULTADOS | 29 |
| 4.1 | Escoamento monofásico na cavidade | 29 |
| 4.1.1 | Validação da ordem do método | 29 |
| 4.1.2 | Comparação com resultados disponíveis na literatura | 30 |
| 4.2 | Escoamento bifásico em cisalhamento simples | 35 |
| 4.3 | Escoamento bifásico na cavidade | 37 |
| 4.3.1 | Flotação | 38 |
| 4.3.2 | Sedimentação | 40 |
| 4.3.3 | Coalescência | 41 |
| 5 | CONSIDERAÇÕES FINAIS | 46 |
| 5.1 | Conclusão | 46 |
| 5.2 | Trabalhos Futuros | 47 |
| | REFERÊNCIAS | 48 |

Lista de Figuras

| | |
|--|----|
| Figura 1 – Representação esquemática dos mecanismos de instabilidade das emulsões em estudo. | 2 |
| Figura 2 – Representação da gota em uma cavidade. | 2 |
| Figura 3 – Volume de controle V composto pela superfície Γ entre dois fluidos, 1 e 2, e definida pela curva C (Adaptação de Lopes (2018)). | 11 |
| Figura 4 – Representação da malha e uma célula | 18 |
| Figura 5 – Comparação dos perfis de velocidade de u em $x=0,5$ com $Re = 100$ | 31 |
| Figura 6 – Comparação dos perfis de velocidade de u em $x=0,5$ com $Re = 400$ | 31 |
| Figura 7 – Comparação dos perfis de velocidade de u em $x=0,5$ com $Re = 1000$ | 32 |
| Figura 8 – Comparação dos perfis de velocidade de v em $y=0,5$ com $Re = 100$ | 32 |
| Figura 9 – Comparação dos perfis de velocidade de v em $y=0,5$ com $Re = 400$ | 33 |
| Figura 10 – Comparação dos perfis de velocidade de v em $y=0,5$ com $Re = 1000$ | 33 |
| Figura 11 – Linhas de corrente para $Re = 100$ | 34 |
| Figura 12 – Linhas de corrente para $Re = 400$ | 34 |
| Figura 13 – Linhas de corrente para $Re = 1000$ | 34 |
| Figura 14 – Representação das condições de contorno para o escoamento bifásico na cavidade, com $\lambda = 1$ e $\rho = 1$ | 35 |
| Figura 15 – Comparação com Vananroye et al. (2008) para uma gota em cisalhamento simples com $Ca = 0.1, 0.2$ e 0.25 . Visualização experimental retirada de Vananroye et al. (2008) na coluna esquerda com $2R/H = 0.18$, e numericamente obtido nesse trabalho na coluna direita com $2R/H = 0.16$ | 36 |
| Figura 16 – Comparação com o trabalho de Kennedy, Pozrikidis e Skalak (1994), Ioannou, Liu e Zhang (2016) e Kwak e Pozrikidis (1998): deformação da gota, D , como função do número de capilaridade, Ca . Gota em cisalhamento simples com $Re = 10^{-2}$ | 37 |
| Figura 17 – Comparação com o trabalho de Kennedy, Pozrikidis e Skalak (1994), Ioannou, Liu e Zhang (2016) e Guido (2011): inclinação da gota em graus, θ , como função do número de capilaridade, Ca . Gota em cisalhamento simples com $Re = 10^{-2}$ | 37 |

| | |
|---|----|
| Figura 18 – Fenômeno de ascensão de uma bolha com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Bo = 10$ e $Re = 200$, $We = 10$ ($Fr = 1$) obtido neste trabalho. | 39 |
| Figura 19 – Ascensão de uma bolha com $\rho = 0.001$, $Re = 100$, $Bo = 200$, malha 140×140 , $Fr = 1$ (SUSSMAN et al., 1994). | 39 |
| Figura 20 – Ascensão de uma bolha com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 100$, $Bo = 200$, $Fr = 1$ (KRUISBRINK et al., 2018) | 39 |
| Figura 21 – Ascensão da gota com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $We = 3,5 \times 10^3$, $Bo = 10$ e $Re = 200$ ($Fr = 2.8 \times 10^{-3}$). Cavidade com 4×12 | 40 |
| Figura 22 – Sedimentação de uma gota com $\rho = 2.0$, $\lambda = 10$, $Re = 500$, $Bo = 10$ e $We = 10$ ($Fr = 1$). Cavidade com 4×12 | 41 |
| Figura 23 – Sedimentação de uma gota com $\rho = 2.0$, $\lambda = 10$, $Re = 1$, $Bo = 10$ e $We = 10$ ($Fr = 1$). Cavidade com 4×12 | 41 |
| Figura 24 – Sedimentação de uma gota com $\rho = 2.0$, $\lambda = 10$, $Re = 500$, $Bo = 200$ e $We = 200$ ($Fr = 1$). Cavidade com 4×12 | 41 |
| Figura 25 – Coalescência coaxial de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 25$, $Bo = 1.25$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$ | 42 |
| Figura 26 – Análise experimental da coalescência coaxial de duas bolhas, retirado de Brereton e Korotney (1991). | 43 |
| Figura 27 – Coalescência coaxial de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 50$, $Bo = 2.5$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$ | 43 |
| Figura 28 – Coalescência coaxial de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re =$ 200 , $Bo = 10$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$ | 44 |
| Figura 29 – Coalescência oblíqua de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 25$, $Bo = 1.25$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$ | 45 |
| Figura 30 – Análise experimental da coalescência oblíqua de duas bolhas, retirado de Brereton e Korotney (1991). | 45 |

Lista de símbolos

Símbolos Latinos

| | |
|--------------------|--------------------------------|
| a | Raio da gota |
| \mathbf{F}_c | Força de campo |
| \mathbf{F}_s | Força de superfície |
| g | Aceleração da gravidade |
| \mathbf{g} | Campo gravitacional |
| \mathbf{I} | Tensor identidade |
| L | Comprimento da gota |
| B | Altura da gota |
| m | Massa |
| $\hat{\mathbf{n}}$ | Vetor normal unitário |
| N | Número de nós |
| N_x | Número de nós em x |
| N_y | Número de nós em y |
| p | Pressão |
| \mathcal{P} | Pressão modificada |
| \mathbf{P} | Quantidade de movimento |
| S | Superfície |
| t | Tempo |
| \mathbf{u} | Vetor velocidade |
| \mathbf{u}^* | Vetor velocidade intermediária |

| | |
|--|---|
| u | Componente da velocidade na direção x |
| \mathbf{u}_w | Vetor velocidade na parede (ghosts) |
| v | Componente da velocidade na direção y |
| $V(t)$ | Volume material |
| V | Volume arbitrário |
| \mathbf{X} | Coordenada Lagrangeana |
| \mathbf{x} | Coordenada Euleriana |
| x, y | Coordenadas cartesianas |
| $\hat{\mathbf{e}}_x, \hat{\mathbf{e}}_y$ | Base canônica |

Símbolos Gregos

| | |
|-----------------------|---------------------------------|
| ρ | Massa específica |
| ρ_1 | Massa específica do fluido base |
| ρ_2 | Massa específica da gota |
| $\tilde{\rho}$ | Razão de massa específica |
| $\boldsymbol{\sigma}$ | Tensor de tensões de Cauchy |
| τ | Tensão interfacial |
| μ_1 | Viscosidade do fluido base |
| μ_2 | Viscosidade da gota |
| μ | Viscosidade dinâmica |
| λ | Razão de viscosidade |
| ϕ | Função Level-Set |
| Ω | Domínio de fluido |
| $\dot{\gamma}$ | Taxa de cisalhamento |
| χ | Pressão auxiliar |

Grupos Adimensionais

| | |
|----|--------------------|
| Re | Número de Reynolds |
| Fr | Número de Froude |

Ca Número de Capilaridade

Siglas

TTR Teorema do transporte de Reynolds

ENO *Essentially Non-Oscillatory*

WENO *Weighted Essentially Non-Oscillatory*

NS Navier-Stokes

CLSVOF *Coupled level-set/volume-of-fluid method*

EDP Equação Diferencial Parcial

CFL *Courant–Friedrichs–Lewy*

TVD *Total Variation Diminishing*

1 Introdução

1.1 Contextualização

Emulsão pode ser definida como uma dispersão de um líquido, denominado de fluido dispersante ou fase dispersa (gotas), em um segundo líquido, fase contínua ou fluido base, na qual é parcial ou totalmente imiscível. O estudo das propriedades e dos fenômenos que ocorrem em emulsões, devido à sua natureza instável, é um assunto antigo, mas continua tendo grande importância, em parte porque desempenha um papel considerável em várias aplicações industriais e domésticas. O seu uso abrange um amplo campo: lubrificação, resfriamento de equipamentos em processos de usinagem de metais (GLASSE et al., 2014), operações de produção e refino de petróleo (NOÏK; PALERMO; DALMAZZONE, 2013), e usos mais delicados como cosméticos (WU et al., 2020). Além disso, possui aplicações alimentares, não somente para o controle de qualidade do produto, mas também para se chegar em texturas específicas (PAL, 2001), são exemplos: maionese, sorvetes, cremes, que são do tipo óleo em água (*o/a*) e estabilizadas por algum agente emulsivo.

O comportamento de emulsões está diretamente relacionado às características dos fluidos, dada tanto pela estabilidade quanto pela reologia. Para se estudar quaisquer características exige-se a consideração dos diferentes processos pelos quais as espécies dispersas podem se encontrar. Assim, os processos que causam a desestabilização de emulsões podem ser classificados em dois grupos. Primeiro, os que envolvem o rearranjo espacial das gotas (floculação, que acabam sedimentando, e desnatação) e, segundo, os que mudam de tamanho ou perdem identidade (coalescência e amadurecimento de Ostwald), a coalescência geralmente ocorre após desnatação ou floculação (GUNNING et al., 1986). Neste trabalho, o interesse está concentrado na formação da desnatação, ou seja, do efeito *creaming*, na sedimentação, que são processos que ocorrem quando a massa específica da gota é diferente da do fluido base, e no fenômeno de coalescência (Fig. 1). A gota, na situação diluída, não perde sua identidade, ela simplesmente se redistribui no espaço e retorna ao seu estado original por agitação (SCHRAMM, 2006). Esses efeitos são tradicionalmente monitorados de forma visual, mas tem sido analisados por uma combinação de microscopia de vídeo e análise de imagem ou até mesmo por modelos numéricos (ROBINS; WATSON; WILDE, 2002). Assim, dado o contexto, a implementação de simulações numéricas para investigar o comportamento de gotas, ou bolhas, é um tema muito presente

na literatura e possui bastante relevância científica.

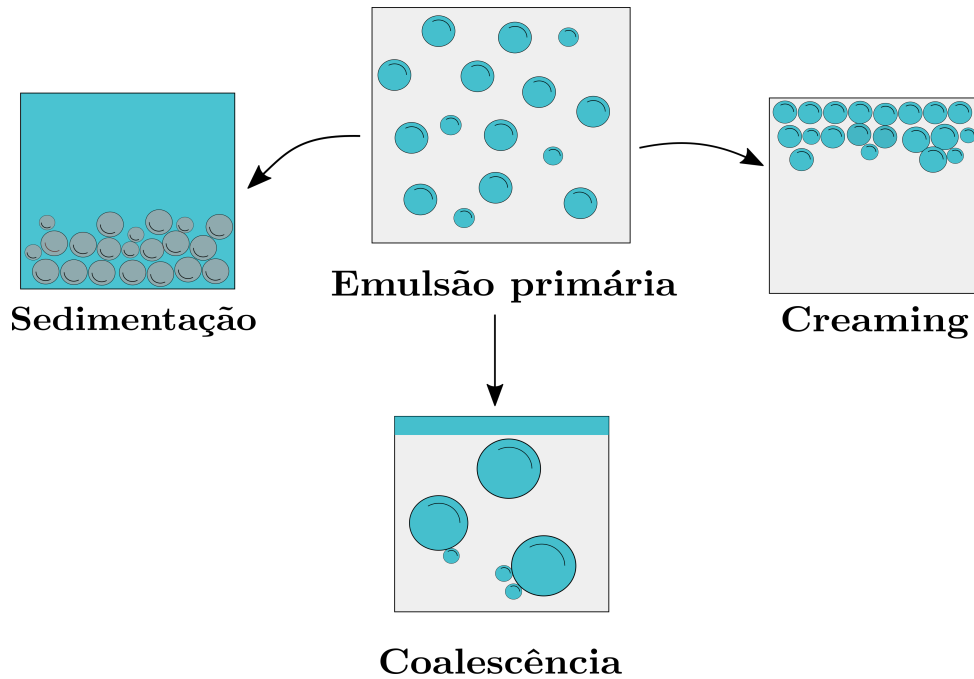


Figura 1 – Representação esquemática dos mecanismos de instabilidade das emulsões em estudo.

1.2 Definição do problema

O problema em estudo consiste na simulação do movimento de uma gota, ou bolha, dependendo do valor da razão de massa específica, em uma cavidade bidimensional, numa perspectiva de emulsão diluída. A gota ocupa a região Ω^+ — Fig. 2 —, possui massa específica ρ_2 e viscosidade dinâmica μ_2 . O fluido base possui massa específica ρ_1 e viscosidade dinâmica μ_1 , ocupando a região Ω^- , sendo Γ a interface que delimita os dois fluidos. O escoamento será tratado como incompressível e terá como causa a diferença de massa específica. Além disso, a investigação não está na escala das gotas, ou seja, não é livre dos efeitos inerciais e nem considera-se difusões hidrodinâmicas.

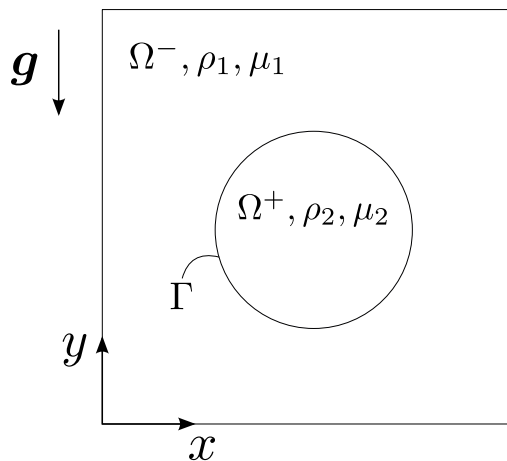


Figura 2 – Representação da gota em uma cavidade.

1.3 Objetivos

Investigar os efeitos decorrentes de uma razão de massa específica na emulsão, bem como da influência dos parâmetros adimensionais. Todas as implementações foram feitas utilizando a linguagem Fortran e tendo como ponto de partida um código numérico de base, já desenvolvido no grupo de pesquisa no âmbito do qual se desenvolveu o projeto. Alguns pontos importantes que se deseja cobrir são:

- Estudo e implementação de uma gota utilizando o método de *Level Set* em uma cavidade;
- Implementação da diferença de viscosidade entre a gota e o fluido base;
- Implementação da diferença de massas específicas entre a gota e o fluido base, e verificação da flotação, sedimentação e coalescência;
- Investigar a influência dos principais parâmetros que caracterizam o comportamento do escoamento bifásico em estudo.

1.4 Revisão bibliográfica

Há muitos estudos numéricos, experimentais e teóricos sobre a flotação (ou sedimentação) de gotas e bolhas, que investigam a influência tanto da viscosidade, de surfactantes, da temperatura, como até mesmo das interações entre corpos na variação da tensão interfacial. Como a diferença numérica entre uma gota e uma bolha é basicamente o valor da razão de massa específica, analisar os efeitos do movimento de uma bolha é válido para este estudo. Um dos primeiros a analisar experimentalmente o fenômeno de ascensão de uma bolha imersa em água ou nitrobenzeno foi Davies e Taylor (1950). Observou-se, por meio de fotografia, a variação da pressão na superfície ao longo do escoamento, ou seja, a influência da tensão interfacial no fenômeno, percebendo-se que a bolha permanecia esférica durante todo o experimento, possibilitando um cálculo aproximado para a velocidade de ascensão em função do raio do tubo neste trabalho. Já no caso de deformação de gotas em cisalhamento simples, levando-se em conta a variação da viscosidade e da tensão interfacial, foi feito, também, por Taylor (1934) no qual percebeu-se que quando a tensão interfacial dominava em relação as forças viscosas a gota deformaria com seu eixo principal em um ângulo de 45° em relação ao fluxo. Enquanto que, para o caso dominado pelas forças viscosas, ela deformaria com seu eixo principal na direção do fluxo.

Na parte de simulação numérica, existem diferentes métodos numéricos para a análise de escoamentos bifásicos. Há duas abordagens que são usadas para computar a interface: explícita e implícita. No caso dos métodos explícitos, basicamente tem-se o método de integral de contorno e métodos de volumes de fluido, nos quais criam-se

uma malha na superfície da gota, ao passo que para evoluí-la segue-se a própria malha. Nessa linha, Chen et al. (1999) desenvolveram uma simulação numérica para uma bolha ascendendo em um fluido viscoso, usando a técnica de variáveis primitivas com o método de volumes de fluido modificado. Já Premlata, Tripathi e Sahu (2015) estudaram, também, o movimento de ascensão de bolha, porém, em um meio estratificado por viscosidade. Foi observado uma grande influência da viscosidade no comportamento típico de formação de saia para certos parâmetros adimensionais. A bolha sofre extensa deformação ao formar uma saia alongada. Utilizando o método de integral de contorno, Shukla et al. (2019) e Zhu e Gallaire (2016) simularam numericamente o comportamento de uma gota achatada em uma célula de Hele-Shaw, analisando a influência do número de capilaridade e da viscosidade no movimento da gota. O caso limite em que os efeitos inerciais são desprezíveis foi estudado extensivamente, principalmente na deformação de gotas em cisalhamento simples, como feito por Ioannou, Liu e Zhang (2016), Kennedy, Pozrikidis e Skalak (1994), Kwak e Pozrikidis (1998), nos quais são usados diferentes métodos numéricos.

Dentro dos métodos implícitos existe o de *Level Set*, no qual a interface é tratada de forma implícita por meio de uma curva de nível do valor de uma função chamada *Level Set*, ou seja, não existe uma malha para a determinação da posição da interface. É um método que permite o cálculo de curvatura de forma simples, ao passo que é capaz de lidar com geometrias que possuem formas complexas. Um dos principais problemas apresentados pelo método de *Level Set* é a não garantia de conservação de massa. Então, para corrigi-lo, é proposto um esquema de reinicialização otimizado, apresentado por Peng et al. (1999), que consiste em manter a função *Level Set* com as propriedades de uma função distância durante toda a simulação, reduzindo assim, potenciais erros numéricos. Norman e Miksis (2005) estudaram o problema da dinâmica de uma bolha flotando em um canal vertical e num canal inclinado, usando o método de *Level Set* juntamente com o método de projeção. Assumido que o fluido está inicialmente em repouso e as paredes paradas, ou seja, o escoamento é causado apenas pela diferença de massa específica entre os fluidos. Ademais, para garantir a conservação de massa, ao passo que ϕ evolui no tempo, não é utilizado a abordagem de reinicialização, utilizou-se a abordagem de extensão de velocidade, que é basicamente a substituição da velocidade do fluido na equação de evolução do *Level Set* pela velocidade normal da interface, juntamente com o método de bandas estreitas, na qual a função *Level Set* é apenas avançada em alguns pontos da malha próximos à interface. No canal vertical foi observado que com o aumento do número de Reynolds o centro de massa adquire uma oscilação simétrica periódica conforme a bolha flota. Sussman et al. (1994) estudaram o movimento de sedimentação de uma gota, e a colisão de duas gotas na ausência de força gravitacional, observando-se que após a colisão, a queda combinada sofre oscilações devido à tensão interfacial. Já Ohta et al. (2010) simularam o movimento de subida de uma gota, usando um método híbrido combinando o método de *Level Set* e o método de volumes de fluido (CLSVOF). Observando, assim, que a gravidade é um fator determinante na deformação da gota, e que o aumento da

viscosidade gera maior probabilidade de ruptura da gota durante a simulação.

Recentemente, nota-se que há uma gama de estudos que buscam adaptar o método de *Level Set* de forma que as equações usadas não sejam puramente advectivas, com o intuito tornar a abordagem utilizada com um menor erro numérico. Nessa linha, Yu et al. (2016) simularam a ascensão de uma bolha usando o método de projeção e um novo método de *Level Set*, na qual a diferença em relação ao convencional é que há um *step* intermediário. Não há apenas a evolução e reinicialização da função *Level Set*, no meio desses dois processos define-se uma nova função $\mathcal{H}(\phi, t)$, por meio da função Heaviside suavizada, percebendo com isso que a força de tensão interfacial pode ser calculada com maior precisão, e a massa é mais conservada. Por esse trabalho nota-se, também, que na presença de uma maior razão de massa específica a bolha tende a sofrer ruptura de forma mais rápida, analisando-se o mesmo tempo de simulação.

Grave, Camata e Coutinho (2020) simularam a ascensão de uma bolha num fluido viscoso, usando um método modificado de *Level Set*, e a diferença em relação ao convencional é que a etapa de reinicialização está embutida na equação de advecção, evitando uma etapa separada durante o cálculo. Bahbah et al. (2019) propuseram, também, um método de *Level Set* modificado, na qual o processo de reinicialização e evolução da função *Level Set* estão associados de uma maneira implícita, em ambos os trabalhos vê-se a típica formação de saia das bolhas à medida que elas vão ascendendo no canal ao longo do tempo. Em ambos os trabalhos há, também, a coalescência de duas bolhas de forma coaxial, e nota-se a influência do campo de pressão da bolha de cima em relação à bolha inferior, permitindo com que esta encontre aquela num determinado tempo, mesmo que ambas iniciem com as mesmas condições, e que dependendo da posição e dos números adimensionais essas bolhas podem coalescer de forma mais rápida ou não.

Zhang et al. (2019), usando um modelo de campo de fase conservativo e Lattice Boltzmann, simularam ascensão e coalescência de bolhas em fluidos viscosos, investigando a influência dos parâmetros numéricos (incluindo tamanho do domínio, tensão interfacial, viscosidade do fluido, gravidade e razão de massa específica) na dinâmica da bolha. Nota-se que na simulação de duas bolhas, ambas sobem com velocidades diferentes e estão sempre alinhadas verticalmente ao longo do eixo de simetria sem deslocamento lateral. A bolha inferior sofre maior deformação porque é mais afetada pela interação dinâmica entre elas. O fino filme líquido entre as bolhas é espremido durante a colisão e, em seguida, rompido devido à coalescência. Depois disso, a bolha mesclada retorna à situação de uma única bolha subindo. Na simulação de múltiplas bolhas, diferente da dinâmica com duas, há, além da coalescência coaxial, coalescência oblíqua, e as mesmas sofrem grande influência da parede. Foi analisado o mesmo caso, porém, com condições de contorno periódicas percebendo-se que as bolhas tendem tornarem-se mais esféricas sob essa condição, devido à menor influência da fronteira de domínio. Entretanto, sob a condição de não escorregamento, a velocidade na parede é forçada a ser zero, o que impõe equivalentemente uma força extra para deformar as bolhas, especialmente para aquelas perto

do limite do domínio.

No estudo do efeito *creaming*, Chanamai e McClements (2000) estudaram a influência do tamanho da gota e da sua concentração, no qual foi observado que a velocidade da formação do *creaming* das emulsões diminui com o aumento da concentração de partículas, ao passo que a viscosidade aparente das emulsões aumenta à medida que a concentração das gotas aumenta, diminuindo a tensão cisalhante. Jeelani, Hosig e Windhab (2005) analisaram a cinética da desnaturação e coalescência em dispersões livres de surfactante, nos quais o número de Reynolds das gotas para a desnaturação é muito pequeno. A velocidade do *creaming* e a taxa de coalescência aumentam inicialmente com o tempo, devido ao aumento no tamanho da gota e diminui subsequentemente à medida que gotas maiores são formadas fora da dispersão. Observou-se, também, que as gotas em dispersões concentradas aumentam de tamanho mais rápido, resultando em taxas de creme maiores que as dispersões diluídas.

1.5 Organização do trabalho

Este trabalho está dividido em 5 capítulos, além do primeiro em que é apresentado o contexto do problema a ser estudado, bem como algumas bibliografias relacionadas já existentes, existem outros 4 correspondentes à fundamentação teórica, metodologia numérica, resultados e conclusão.

O segundo capítulo apresenta a fundamentação teórica sobre a qual o trabalho é baseado, ou seja, é mostrado as equações que governam o fenômeno em estudo, que são as equações de Navier-Stokes e a abordagem de representação da interface usado no método de *Level Set*.

No terceiro é apresentado os métodos numéricos que foram utilizados para a solução daquelas equações, isto é, o conceito de diferenças finitas, o método de projeção, os métodos numéricos para resolução das equações presentes no método de *Level Set*.

No quarto possui a simulação do problema da cavidade que foi utilizado como validação do escoamento monofásico, e a simulação para um escoamento bifásico em cisalhamento simples que foi utilizado como validação do método de *Level Set*. Além disso, é apresentado resultados para a flotação de uma bolha, sedimentação de uma gota numa cavidade, e coalescência de bolhas com análise dos resultados observados.

No quinto capítulo possui uma conclusão com sugestões para trabalhos futuros.

2 Fundamentação Teórica

Este capítulo apresenta as equações clássicas da hidrodinâmica dos fluidos juntamente com as hipóteses para o estudo da flotação de uma gota imersa em um fluido base. Inicialmente, apresentam-se algumas das equações da Mecânica dos Meios Contínuos e, em seguida, as representações que definem a existência de uma interface no escoamento.

2.1 Descrições Lagrangeana e Euleriana

A mecânica clássica tem duas descrições alternativas: a descrição do campo (Euleriana) e a descrição das partículas (Lagrangeana), associadas a dois dos grandes físicos europeus do século XVIII, Leonhard Euler (1707–1783) e Joseph Louis, conde de Lagrange (1736-1813)(KUNDU; COHEN, 2001). Na abordagem de coordenadas geométricas Lagrangeanas segue-se o movimento de partículas individuais descritas por $x(\mathbf{X}, t)$, que representam a posição em um instante de tempo t da partícula que em $t = 0$ passou pelo ponto $\mathbf{x} = \mathbf{X}$. Essa descrição dificulta o estudo de escoamentos, pois necessita-se conhecer as propriedades das partículas a medida que estas se deslocam no espaço com o passar do tempo. Porém, ela é útil na formulação de equações em que se queira analisar o movimento de um corpo.

A descrição Euleriana se concentra com o que ocorre em um ponto \mathbf{x} do espaço independente de quais partículas passam por esse ponto. Logo, como há um fluido escoando neste trabalho, as propriedades físicas estão definidas como campos. Assim, pode-se determinar a variação temporal de uma partícula de natureza Lagrangeana em linguagem Euleriana, aplicando $\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{\mathbf{x}}$ em $G(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t)$, onde este é um campo Euleriano, de forma que

$$\frac{DG}{Dt} = \frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla G, \quad (2.1)$$

onde $D()/Dt$ a derivada material, $\partial()/\partial t$ é a variação local, e o último termo é uma variação advectiva, sendo $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ o campo de velocidades do fluido.

2.2 Equações de balanço

A princípio, antes da introdução das equações de balanço de massa e balanço de momento, é fundamental ter-se o conceito do teorema de transporte de Reynolds e o teorema da localização. O TTR diz que a taxa de variação no tempo de uma propriedade intensiva $G = G(\mathbf{x}, t)$ é igual à taxa de variação dessa grandeza num volume material $V(t)$ arbitrário ocupando uma região Ω do espaço, o qual possui uma porção específica de fluido que se move e se deforma, somada ao fluxo líquido da mesma que cruza as superfícies desse volume. Assim, o TTR pode ser enunciado como (KUNDU; COHEN, 2001)

$$\frac{D}{Dt} \iiint_{V(t)} G dV = \iiint_{V(t)} \left[\frac{\partial G}{\partial t} + \nabla \cdot (G\mathbf{u}) \right] dV. \quad (2.2)$$

Já o Teorema da Localização, conforme Chandrasekharaiah e Debnath (2014), diz que sendo $G = G(\mathbf{x}, t)$ uma função contínua definida numa região arbitrária Ω do espaço, se

$$\iiint_{V(t)} G dV = 0 \quad \forall V \subseteq \Omega, \quad (2.3)$$

então $G(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega$.

2.2.1 Balanço de massa

A massa total m de fluido que ocupa um volume arbitrário $V(t)$ é assumida como distribuída por esse volume sem aumento ou diminuição repentina em qualquer região ao longo de seu movimento, assim, ela pode ser descrita matematicamente como (CHANDRASEKHARAIHAH; DEBNATH, 2014):

$$m = \iiint_{V(t)} \rho dV, \quad (2.4)$$

sendo $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ a massa específica do fluido. Além disso, considerando que elementos de massa individuais — grãos, partículas de fluido, etc. — podem ser rastreados dentro de um campo de fluxo, porque os mesmos não aparecerão espontaneamente e nem desaparecerão, a conservação de massa é dada por

$$\frac{Dm}{Dt} = 0. \quad (2.5)$$

Substituindo G da Eq. (2.2) pela massa específica da Eq. (2.4), tem-se que

$$\frac{D}{Dt} \iiint_{V(t)} \rho dV = \iiint_{V(t)} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) \right] dV = 0. \quad (2.6)$$

Utilizando o Teorema da Localização na Eq. (2.6), chega-se na equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0. \quad (2.7)$$

Ao passo que em termos da derivada material e da identidade vetorial $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho$, a Eq. (2.7) pode ser reescrita como

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0. \quad (2.8)$$

Ademais, desconsiderando a possibilidade de mudança na massa específica conforme seguimos a partícula no escoamento, ou seja, que o escoamento é incompressível ($D\rho/Dt = 0$), a equação da continuidade reduz-se à afirmação de que o campo de velocidade é solenoidal e a Eq. (2.8) é representada como

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.9)$$

2.2.2 Balanço de momento

A equação de momento para um meio contínuo é análoga à segunda lei de Newton para uma massa pontual sob movimento. O princípio do momento diz que a taxa de variação do momento linear \mathbf{P} de uma região material ocupando um volume arbitrário V no tempo t é igual a soma das forças nessa região,

$$\frac{D\mathbf{P}}{Dt} = \mathbf{F}_C + \mathbf{F}_S, \quad (2.10)$$

sendo \mathbf{F}_C a força de campo e \mathbf{F}_S a força de superfície. Por definição, o momento linear é dado por

$$\mathbf{P} = \frac{D}{Dt} \iiint_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV. \quad (2.11)$$

Usando o TTR pode-se reescrever a Eq. (2.11) como

$$\mathbf{P} = \iiint_{V(t)} \left[\frac{D(\rho \mathbf{u})}{Dt} + \rho \mathbf{u}(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] dV \quad (2.12)$$

$$= \iiint_{V(t)} \left[\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \mathbf{u} \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \right] dV. \quad (2.13)$$

Substituindo a continuidade, Eq. (2.8), na Eq. (2.13) obtém-se que

$$\mathbf{P} = \iiint_{V(t)} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dV. \quad (2.14)$$

A força de campo é especificamente, neste trabalho, dada pela força gravitacional

$$\mathbf{F}_C = \iiint_{V(t)} \rho \mathbf{g} dV, \quad (2.15)$$

sendo \mathbf{g} o campo gravitacional, $\mathbf{g} = -g\hat{\mathbf{e}}_y$ em que g é a magnitude da aceleração gravitacional e $\hat{\mathbf{e}}_y$ o vetor unitário na direção y . A força de superfície advém da interação entre a vizinhança e a superfície delimitadora $S(t)$, que é o bordo de $V(t)$. Ela pode ser computada como uma integral de tensão distribuída sobre a superfície de $V(t)$ como

$$\mathbf{F}_S = \iint_{S(t)} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} dS = \iiint_{V(t)} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (2.16)$$

Sendo $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ o tensor de tensões de Cauchy e $\hat{\mathbf{n}}$ o vetor normal da superfície do volume arbitrário. Substituindo as Eqs. (2.14), (2.15) e (2.16) na Eq. (2.10), tem-se que

$$\iiint_{V(t)} \left(\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho \mathbf{g} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) dV = 0. \quad (2.17)$$

Logo, utilizando o Teorema da Localização na Eq. (2.17) chega-se na equação de Cauchy que descreve a dinâmica de qualquer movimento num meio contínuo,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}. \quad (2.18)$$

Entretanto, para completá-la e caracterizar o corpo a qual se está trabalhando é necessário introduzir uma equação constitutiva para o tensor de tensões de Cauchy, que para um fluido Newtoniano incompressível é dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T], \quad (2.19)$$

onde $p = p(\mathbf{x}, t)$ é o campo escalar da pressão e μ a viscosidade dinâmica não constante, que assume valores diferentes para o fluido base e o fluido dispersante. Substituindo a Eq. (2.19) na Eq. (2.18) tem-se uma equação governante para um fluido incompressível escoando, que juntamente com a equação da continuidade fornecem uma descrição matemática completa do escoamento incompressível de um fluido Newtoniano,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T] + \rho \mathbf{g}. \quad (2.20)$$

2.3 Condições de contorno

O escoamento na presença de uma interface líquido-líquido requer condições de contorno adequadas. Além disso, é imposta a condição de não escorregamento na parede, pela condição de contorno de Dirichlet, tal que

$$\mathbf{u} = 0. \quad (2.21)$$

2.3.1 Condição dinâmica

Para computar as forças que agem na interface faz-se um balanço. Para isso, considera-se uma curva regular fechada C acrescida da superfície interfacial Γ entre os fluidos 1 e 2 dentro de um volume de controle V arbitrário, Fig. 3, onde C é definida localmente pelo vetor unitário normal $\hat{\mathbf{n}}$, unitário tangente \mathbf{t} e unitário binormal \mathbf{b} num espaço Euclidiano. Note que $\hat{\mathbf{n}} := \hat{\mathbf{n}}_1 = -\hat{\mathbf{n}}_2$, $\hat{\mathbf{n}}_1$ é o vetor unitário normal de Γ que aponta do fluido 2 para o fluido 1.

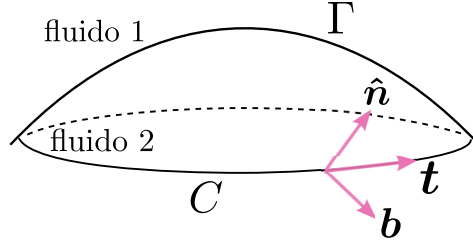


Figura 3 – Volume de controle V composto pela superfície Γ entre dois fluidos, 1 e 2, e definida pela curva C (Adaptação de Lopes (2018)).

Logo, sendo $\mathbf{x}(s)$ uma representação diferenciável e parametrizada pelo comprimento de arco s ($|\dot{\mathbf{x}}(s)| = 1$) de C , tem-se que o vetor tangente \mathbf{t} à curva C no ponto $\mathbf{x}(s)$ é dado por

$$\mathbf{t} = \frac{d\mathbf{x}}{ds}. \quad (2.22)$$

Esse vetor é unitário, visto que $|\mathbf{t}| = 1$, o que implica que $\mathbf{t} \cdot \dot{\mathbf{t}} = 0$, sendo $\dot{\mathbf{t}}$ a derivada do vetor tangente. Com isso, percebe-se que $\dot{\mathbf{t}}$ é proporcional à $\hat{\mathbf{n}}$, ou seja,

$$\dot{\mathbf{t}} = k\hat{\mathbf{n}}, \quad (2.23)$$

no qual $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor unitário normal à curva C no ponto $\mathbf{x}(s)$, que pode ser definido como

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\dot{\mathbf{t}}}{|\dot{\mathbf{t}}|}, \quad (2.24)$$

que possui direção e sentido de $\dot{\mathbf{t}}$. Dessa forma, o valor absoluto do vetor $\dot{\mathbf{t}}$,

$$k = |\dot{\mathbf{t}}| = \left| \frac{d^2\mathbf{x}}{ds^2} \right|, \quad (2.25)$$

é chamado de curvatura de C no ponto $\mathbf{x}(s)$, e pode ser entendida como a medida de quão rapidamente o vetor tangente muda de direção nesse ponto. Por exemplo, para um círculo a curvatura principal é o inverso do raio de curvatura, $k = 1/R$, percebendo-se que para um círculo com valor de raio alto tem-se pequenas curvaturas. Com isso, conforme Tenenblat (2008), para compor o espaço completo, define-se o vetor binormal que é ortogonal tanto à \mathbf{t} quanto à $\hat{\mathbf{n}}$,

$$\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \hat{\mathbf{n}}. \quad (2.26)$$

Com isso, considerando a inércia da interface nula, o balanço de força num volume arbitrário V , Fig. 3, na interface é tal que (JAENSSON; ANDERSON; VERMANT, 2021)

$$\iint_S (\boldsymbol{\sigma}_2 - \boldsymbol{\sigma}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \oint_C \boldsymbol{\sigma}_S \cdot \mathbf{b} dl, \quad (2.27)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}_1$ e $\boldsymbol{\sigma}_2$ são as tensões exercidas pelos fluidos 1 e 2, respectivamente, e $\boldsymbol{\sigma}_S$ é o tensor de tensão interfacial de Cauchy,

$$\boldsymbol{\sigma}_S = \tau(c, T)\mathbf{I}_S, \quad (2.28)$$

que leva em conta a tensão interfacial τ , na qual depende apenas do excesso de concentração c de surfactante e da temperatura T . Aplicando o teorema de transporte de Reynolds e o teorema da divergência para superfícies na Eq. (2.27), chega-se em (DZIU-BEK, 2012)(JAENSSON; ANDERSON; VERMANT, 2021)

$$\iint_S (\boldsymbol{\sigma}_2 - \boldsymbol{\sigma}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \iint_S \nabla_S \cdot \boldsymbol{\sigma}_S dS. \quad (2.29)$$

Sendo $\nabla_S = \mathbf{I}_S \cdot \nabla$ um operador gradiente na interface, onde $\mathbf{I}_S = \mathbf{I} - \hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}}$ é o tensor identidade que tem como objetivo projetar algum termo na direção tangencial à interface. Desse modo, para um elemento de superfície arbitrário S , a Eq. (2.29) reduz-se a

$$\Delta \mathbf{f} = (\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} = \nabla_S \cdot \boldsymbol{\sigma}_S, \quad (2.30)$$

em que $\Delta \mathbf{f}$ é o salto de tensão normal na interface entre os fluidos. Note que $\nabla_S \cdot \boldsymbol{\sigma}_S = \nabla_S \tau \cdot \mathbf{I}_S + \tau \nabla_S \cdot \mathbf{I}_S$, e com algumas manipulações a Eq. (2.30) torna-se

$$\Delta \mathbf{f} = \nabla_S \tau - \tau (\nabla_S \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}}. \quad (2.31)$$

O termo $\tau (\nabla_S \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}}$ é uma componente normal da interfacial, enquanto que $\nabla_S \tau$ é um termo tangencial à interface. Além do mais, o salto de tensões na direção tangencial é conhecido como forças de Marangoni, as quais estão atreladas à existência de um gradiente da tensão interfacial, $\nabla_S \tau \neq 0$ (XU et al., 2006). No entanto, o interesse neste trabalho está apenas na componente normal do salto de tensão, visto que $\nabla_S \tau = 0$. Assim, a Eq. (2.31) reduz-se a

$$\Delta \mathbf{f} = -\tau \hat{\mathbf{n}} (\nabla_S \cdot \hat{\mathbf{n}}), \quad (2.32)$$

sendo $\kappa = \nabla_S \cdot \hat{\mathbf{n}}$ a curvatura média local. Assim, a Eq. (2.32) diz que a variação da pressão em um ponto da interface depende do valor da tensão interfacial e da curvatura, que é basicamente a equação de Young-Laplace. A condição de contorno dinâmica pode ser escrita como termo de força capilar na equação de momento, para isso deve-se levar em conta que as contribuições são localizadas na fronteira da interface através do uso de uma distribuição delta de Dirac, de forma que a Eq. (2.20) é reescrita como

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] + \rho \mathbf{g} - \tau \kappa \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) \hat{\mathbf{n}}, \quad (2.33)$$

sendo \mathbf{x} o ponto mais próximo da interface e \mathbf{x}_Γ o ponto que pertence à interface.

2.4 Representação da interface pelo método de *Level Set*

Formulado primeiramente por Osher e Sethian (1988), o método de *Level Set* consiste em uma porção de conceitos que nos permite analisar numericamente a evolução de superfícies, interfaces ou curvas. Há vantagens em seu uso em diversas situações como, por exemplo, o acompanhamento de formas que se alteram topologicamente ao longo do tempo, escopo deste trabalho. Note que nesse método a interface Γ vai ser representada

de forma implícita, ou seja, através de um isocontorno nulo de uma função. Então, pode-se associar à $\Gamma(t)$ uma função distância sinalizada, $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$, ou simplesmente função *Level Set*, que é uma função implícita e mede a distância entre \mathbf{x} , ponto mais próximo da interface, e \mathbf{x}_Γ , ponto que pertence à interface. A função distância pode ser descrita como:

$$d(\mathbf{x}) = \min\{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma|\}, \quad (2.34)$$

em que $d(\mathbf{x}) = 0 \forall \mathbf{x} \in \Gamma$. Como a função *Level Set* é definida como uma função distância só que sinalizada, ou seja, $\phi(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x})$ possuindo as seguintes características:

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}, t) > 0, & \text{para todo } \mathbf{x} \in \Omega^- \\ \phi(\mathbf{x}, t) < 0, & \text{para todo } \mathbf{x} \in \Omega^+ \\ \phi(\mathbf{x}, t) = 0, & \text{para todo } \mathbf{x} \in \Gamma(t) \end{cases} \quad (2.35)$$

deve-se garantir que

$$|\nabla\phi(\mathbf{x})| = 1, \quad (2.36)$$

em que Ω^- é a região no interior da gota, Ω^+ é a região fora da gota e, por fim, Γ é a própria interface, $\Gamma = \{\mathbf{x}|\phi(\mathbf{x}, t) = 0\}$. Neste trabalho há movimentação da interface, ou seja, ϕ é submetido a um campo de velocidade \mathbf{u} já conhecido, sendo a equação governante do tipo Hamilton-Jacobi. Essas equações estão presentes no contexto da mecânica clássica, e possuem diferenciais parciais que contém apenas derivadas primeiras, e para a função *Level Set* é descrita como (OSHER; FEDKIW, 2001):

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = 0. \quad (2.37)$$

Note que é uma EDP hiperbólica, a qual é associada a um problema de Cauchy (apenas condição inicial é necessária). Nesse caso, a utilização do esquema de *upwind* é importante, pois esse tipo de equação tem intrinsecamente uma direção preferencial que não deve ser desconsiderada na construção do método numérico. Percebe-se, também, que $\nabla\phi$ é ortogonal à interface, de modo que o vetor normal pode ser definido como

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}. \quad (2.38)$$

Sendo ϕ constante e $\nabla\phi$ normal à interface, a curvatura é formulada como o fluxo do vetor normal, ou seja,

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right). \quad (2.39)$$

Dado que há descontinuidade na interface, concentrar as tensões advindas desse efeito é importante para a formulação correta do problema. Por isso, associa-se aos termos da tensão interfacial um distribuição delta de Dirac. Para isso, é introduzida a função chamada Heaviside, definida como zero para $\phi \leq 0$ e igual a um para $\phi > 0$. Por definição,

a derivada direcional da Heaviside na direção normal é a própria distribuição delta de Dirac nos pontos próximos à interface,

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = \nabla H(\phi(\mathbf{x})) \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (2.40)$$

Ao passo que utilizando a regra da cadeia e sabendo que $\nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}) = |\nabla\phi(\mathbf{x})|^2$, a Eq. (2.40) pode ser reescrita como:

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = H'(\phi(\mathbf{x}))\nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}} = H'(\phi(\mathbf{x}))\nabla\phi(\mathbf{x}) \frac{\nabla\phi(\mathbf{x})}{|\nabla\phi(\mathbf{x})|} = H'(\phi(\mathbf{x}))|\nabla\phi(\mathbf{x})|. \quad (2.41)$$

Assim, sabendo que $H'(\phi) = \delta(\phi)$, a Eq. (2.41) reduz-se a

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = \delta(\phi)|\nabla\phi|. \quad (2.42)$$

Ademais, dado que a função *Level Set* é definida apenas em alguns pontos da malha, é mais adequado utilizar uma função Heaviside suavizada de forma que detecte melhor a interface, descrita como

$$H(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{se } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right], & \text{se } -\epsilon \leq \phi \leq \epsilon \\ 1, & \text{se } \epsilon < \phi, \end{cases} \quad (2.43)$$

em que ϵ representa a espessura da interface, usualmente definida por $1.5h$, sendo h o espaçamento da malha, como feito por Abicalil et al. (2021). A partir disso, a distribuição delta de Dirac é dada por

$$\delta(\phi) = \frac{\partial H(\phi)}{\partial \phi} = \begin{cases} 0, & \text{se } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right], & \text{se } -\epsilon \leq \phi \leq \epsilon \\ 0, & \text{se } \epsilon < \phi. \end{cases} \quad (2.44)$$

Assim, pode-se reescrever a Eq. (2.33) utilizando a abordagem do método de *Level Set* para a representação da interface, sabendo que $\nabla\phi = |\nabla\phi|\hat{\mathbf{n}}$, como

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T] + \rho\mathbf{g} - \tau\kappa\delta(\phi)\nabla\phi. \quad (2.45)$$

2.5 Modelo adimensional

A representação da Eq. (2.45) em termos adimensionais é mais apropriada, principalmente pela facilidade de visualização de certos parâmetros advindos dessa operação que ditam o comportamento do escoamento em análise. Para isso, são introduzidos parâmetros característicos e variáveis adimensionais, sem negligenciar a massa específica e a viscosidade, que para este trabalho são

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{\dot{\gamma}a}, \quad t^* = t\dot{\gamma}, \quad \mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{a}, \quad p^* = \frac{p}{\rho a^2 \dot{\gamma}^2}, \quad \kappa^* = a\kappa, \quad \nabla^* = a\nabla$$

$$\delta^* = a\delta, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho_2}{\rho_1}, \quad \lambda = \frac{\mu_2}{\mu_1}; \quad g^* = \frac{\mathbf{g}}{g}$$

em que os índices 1 e 2 são indicativos das propriedades do fluido fora e dentro da gota, respectivamente, a é o raio da gota, ou bolha, e $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento. Assim, constatando que todas as variáveis são adimensionais, pode substituí-las na Eq. (2.45),

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* = -\frac{\nabla^* p^*}{\tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho} Re} \nabla^* \cdot [\lambda (\nabla^* \mathbf{u}^* + \nabla \mathbf{u}^{*T})] - \frac{1}{\tilde{\rho} Ca Re} \kappa^* \delta^*(\phi) \hat{\mathbf{n}} - \frac{1}{Fr^2} \hat{\mathbf{e}}_y \quad (2.46)$$

Surgindo, com isso, alguns parâmetros adimensionais, tais como o número de Reynolds,

$$Re = \frac{\rho \dot{\gamma} a}{\mu}, \quad (2.47)$$

que indica a importância relativa entre o termo advectivo e o termo viscoso. O número de capilaridade,

$$Ca = \frac{\mu a \dot{\gamma}}{\tau}, \quad (2.48)$$

que representa a razão entre as forças viscosas e as forças capilares, ou também pode ser interpretado como uma razão entre um tempo de relaxação da gota devido à tensão interfacial e um tempo característico do escoamento. O número de Froude,

$$Fr = \frac{\dot{\gamma} a}{\sqrt{ag}}, \quad (2.49)$$

que representa a razão entre a inércia do escoamento e o campo externo gravitacional. Assim, juntamente com λ e $\tilde{\rho}$, que representam a razão de viscosidade e massa específica, respectivamente, tem-se os principais parâmetros que caracterizam o comportamento do escoamento bifásico em estudo. Daqui em diante os asteriscos da Eq. (2.46) são suprimidos, tornando-se

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho} Re} \nabla \cdot [\lambda (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \frac{1}{\tilde{\rho} Ca Re} \kappa \delta(\phi) \nabla \phi - \frac{1}{Fr^2} \hat{\mathbf{e}}_y. \quad (2.50)$$

3 Metodologia Numérica

3.1 Método de diferenças finitas

O método de diferenças finitas é um artifício de discretização de equações diferenciais. É utilizado para resolver numericamente inúmeros problemas, como por exemplo, a propagação de calor em uma placa. E, para isso, é necessário a criação de uma malha, ou seja, dividir o domínio em um número finito de pontos. A ideia por trás do método é representar a derivada de uma função $f(x)$ sem que a distancia entre elas tenda a zero, surgindo com isso o erro de truncamento. Basicamente é desenvolver $f(x + \Delta x)$ em torno de x (HIRSCH, 2007). Assim, resolvendo a derivada por uma aproximação por série de Taylor, envolvendo pontos à sua volta e a distância relativa entre eles, no caso unidimensional, tem-se que:

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

onde R são os termos de ordem superior. Assim, pode-se obter expressões aproximadas para as primeiras e maiores derivadas no ponto x em termos dos valores da função nos pontos vizinhos. Utilizando a Eq.(3.1), para f em x_{i+1} , tem-se uma aproximação por diferenças à frente (forward difference). Em x_{i-1} temos a aproximação por diferenças atrás (backward difference) e, por fim, em x_i que é a aproximação por diferenças centradas (centered difference). Assim, podem ser descritas respectivamente como:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (3.2)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad (3.3)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \quad (3.4)$$

Para aumentar a ordem do método é necessário utilizar um maior número de pontos, que são os pontos $i+2$ ou $i-2$, no caso unidimensional. Para as diferenças com um lado priori-

tário, é apresentado a aproximação nas equações para frente e para trás, respectivamente (HIRSCH, 2007):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i = \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2\Delta x}, \quad (3.5)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2\Delta x}. \quad (3.6)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}. \quad (3.7)$$

Sabe-se que a aproximação centrada possui uma precisão de segunda ordem, em comparação com as outras duas aproximações que são primeira ordem (HIRSCH, 2007), e, justamente por isso, ela é mais utilizada devido ao ganho computacional, ou seja, pode haver uma diminuição na malha do problema. Com isso, resumidamente, temos que o método de diferenças finitas consiste em 4 etapas (HOFFMAN; FRANKEL, 2018):

1. Discretização do domínio;
2. Aproximação das derivadas usando série de Taylor;
3. Substituição das derivadas aproximadas na equação diferencial original;
4. Resolução da equação de diferenças finitas.

Anteriormente, é mostrado uma discretização no espaço, mas deve-se fazê-la no tempo. Pois, em análise numérica de escoamentos um dos interesses é determinar a velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ em um passo seguinte de tempo, dado por $t + \Delta t$. Logo, neste trabalho, usa-se o método Crank-Nicolson.

3.1.1 Malha deslocada

Neste trabalho utilizou-se para a discretização do domínio 2D a malha deslocada, no qual diz que as propriedades escalares, neste caso a pressão, massa específica, função *Level Set* e viscosidade são posicionadas no centro da célula e as componentes vetoriais em suas faces como na Fig. 4, ou seja, cada variável é posicionada em posições diferentes. Além disso, foi considerado uma malha regular com $\Delta x = \Delta y = h$, composta por $N_x + 1$ x N_y pontos para a componente u , N_x x $N_y + 1$ para a componente v e N_x x N_y para a pressão.

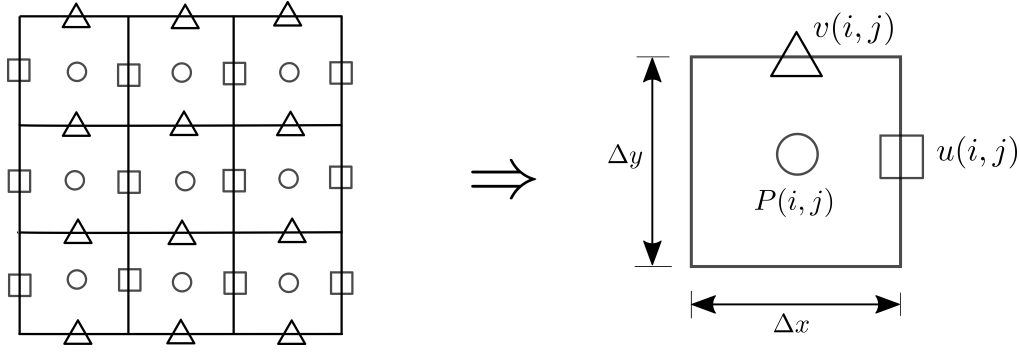


Figura 4 – Representação da malha e uma célula

3.2 Método de projeção

O método de projeção, desenvolvido por Chorin (1967), consiste no desacoplamento das variáveis de velocidade e pressão com a introdução de uma compressibilidade artificial, de forma a não afetar os resultados finais, ou seja, desacopla-se \mathbf{u}^{n+1} e p^{n+1} da Eq. (2.50), criando para isso uma equação artificial para p^{n+1} . Pode-se propor que o método segue dois passos. No primeiro, a restrição de incompressibilidade é desprezada e uma velocidade intermediária \mathbf{u}^* é calculada. No segundo, a velocidade \mathbf{u}^* é projetada de volta no espaço, para assim, obtermos \mathbf{u}^{n+1} e p^{n+1} .

No problema da cavidade sem a gota, utiliza-se

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla\mathcal{P} + \frac{1}{Re}\nabla^2\mathbf{u}. \quad (3.8)$$

Que é basicamente a Eq. (2.50) sem o termo de força capilar e considerando o fluido homogêneo ($\nabla\tilde{\rho} = 0$). De forma que, sendo

$$\tilde{\rho}\mathbf{g} = -\tilde{\rho}g\nabla z = \nabla(\tilde{\rho}\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}), \quad (3.9)$$

a pressão pode ser reescrita como $\mathcal{P} = p - \tilde{\rho}\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$, que é chamada na literatura de pressão modificada. Na versão implícita do método de projeção, a Eq. (3.8) é definida como sendo

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{u}^n \cdot \nabla\mathbf{u}^n + \frac{1}{Re}\nabla^2\mathbf{u}^* \quad (3.10)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla\mathcal{P}^{n+1}, \quad (3.11)$$

note que quando somadas retornam à Eq. (3.8). Aplicando o divergente na Eq. (3.11), e sabendo que o termo da velocidade em $n+1$ se anula por ser incompressível ($\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$), tem-se:

$$\nabla^2\mathcal{P}^{n+1} = \frac{1}{\Delta t}(\nabla \cdot \mathbf{u}^*). \quad (3.12)$$

Nas Eqs. (3.10), (3.11) e (3.12) os erros são de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço. No entanto, neste trabalho é utilizado o método de projeção semi-

implícito de segunda ordem no tempo (Crank-Nicolson) e no espaço, que segundo Abicalil et al. (2021) é dado por

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+1/2} + \frac{1}{2Re} \nabla^2 (\mathbf{u}^* + \mathbf{u}^n). \quad (3.13)$$

Note que a soma das Eqs. (3.13) e (3.11) não retornam à equação de NS. Dessa maneira, é introduzido uma variável auxiliar de pressão χ ,

$$\frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} = \nabla^2 \chi^{n+1}, \quad (3.14)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla \chi^{n+1} \quad (3.15)$$

Ao passo que somando as Eqs. (3.15) e (3.11) tem-se que:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+1/2} + \frac{1}{2Re} \nabla^2 (\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n) + \nabla \cdot (\chi^{n+1} - \frac{\Delta t}{2Re} \nabla \chi^{n+1}) \quad (3.16)$$

$$\mathcal{P}^{n+1/2} = \chi^{n+1} - \frac{\Delta t}{2Re} \nabla^2 \chi^{n+1}. \quad (3.17)$$

O termo convectivo da Eq. (3.16) é obtido por meio de uma interpolação no tempo, porque não é correto calcular apenas como uma média aritmética devido à sua não linearidade, e é descrito pelo método de Adam-Bashforth,

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+1/2} = \frac{3}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^n - \frac{1}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n-1}. \quad (3.18)$$

Com isso os termos difusivos na Eq. (3.13) tornam-se explícitos e com um sistema de equações lineares. Assim, primeiro calcula-se \mathbf{u}^* , em seguida obtém-se χ e corrige-se a velocidade e, por fim, calcula-se a pressão em um instante de tempo intermediário entre n e $n + 1$.

3.2.1 Condições de Contorno

Para o método de projeção as condições de contorno são determinadas para \mathbf{u}^* e χ . Dado que as mesmas que se aplicam à \mathbf{u} não se aplica à \mathbf{u}^* , usa-se a Eq. (3.15) para correlacioná-las. Assim, para \mathbf{u}^* :

$$\mathbf{u}^* \cdot \hat{\mathbf{t}} = \mathbf{u}_w \cdot \hat{\mathbf{t}} + \Delta t (2 \nabla \chi^n - \nabla \chi^{n-1}) \cdot \hat{\mathbf{t}}, \quad (3.19)$$

$$\mathbf{u}^* \cdot \hat{\mathbf{n}} = \mathbf{u}_w \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (3.20)$$

snedo \mathbf{u}_w o campo de velocidade na parede. Para χ , dado que não existe gradiente de pressão na direção normal, tem-se que:

$$\nabla\chi^{n+1} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0. \quad (3.21)$$

$$\nabla^2\chi^{n+1} = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}. \quad (3.22)$$

Percebe-se com a Eq. (3.21) que na Eq. (3.20) as condições de contorno conhecidas para \mathbf{u} podem ser diretamente aplicadas à \mathbf{u}^* . Assim, determina-se os campos de pressão e velocidade em $n + 1$ usando

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla \chi^{n+1} \quad (3.23)$$

$$\mathcal{P}^{n+1} = \chi^{n+1} - \frac{\Delta t}{2Re} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.24)$$

3.2.2 Método de projeção com massa específica e viscosidade variáveis

Com a introdução de uma interface no escoamento, uma razão de massa específica e razão de viscosidade entre o fluido base e a gota, a equação de NS com o termo da tensão interfacial e da força de campo gravitacional, desenvolvida na seção 2, fica na forma

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}Re} \nabla \cdot [\lambda(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \frac{1}{\tilde{\rho}CaRe} \kappa \delta(\phi) \nabla \phi - \frac{1}{Fr^2} \hat{\mathbf{e}}_y. \quad (3.25)$$

Como feito por Sussman et al. (1998), propriedades que possuem valores diferentes na região fora e dentro da gota, $\tilde{\rho}$ e λ , são definidas pela função Heaviside como forma de suavizar a transição,

$$\tilde{\rho}(\phi) = \tilde{\rho} + (1 - \tilde{\rho})H(\phi). \quad (3.26)$$

$$\lambda(\phi) = \lambda + (1 - \lambda)H(\phi). \quad (3.27)$$

É utilizado o método de projeção de segunda ordem e Crank-Nicolson para a discretização temporal, dessa forma a Eq. (3.25) é reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = & -[(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}]^{n+1/2} - (\nabla p)^{n+1/2} \\ & + \left[\frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)} \nabla \cdot [\lambda(\phi)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] \right]^{n+1/2} \\ & - \left[\frac{1}{ReCa\tilde{\rho}(\phi)} \delta(\phi)\kappa \nabla \phi \right]^{n+1/2} - \frac{1}{Fr^2} \hat{\mathbf{e}}_y, \quad (3.28) \end{aligned}$$

que pode ser reescrita em dois passos:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} &= -[(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}]^{n+1/2} \\
&+ \left[\frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)} \nabla \cdot [\lambda(\phi)(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)] \right]^{n+1/2} \\
&- \left[\frac{1}{ReCa\tilde{\rho}(\phi)} \delta(\phi)\kappa\nabla\phi \right]^{n+1/2} - \frac{1}{Fr^2} \hat{\mathbf{e}}_y \\
&+ \frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)^{n+1/2}} \nabla^2 \mathbf{u}^* - \frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)^{n+1/2}} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}
\end{aligned} \tag{3.29}$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)} \nabla \chi^{n+1}. \tag{3.30}$$

Note que ao somar o termo $\frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)} \nabla^2 \mathbf{u}^*$ e subtrair $\frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}$ obtém-se um erro de $O(\Delta t)^2$. Os termos em $n + 1/2$ são extrapolados conforme a Eq. (3.18), e em $n + 1$ como

$$\mathbf{u}^{n+1} = 2\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}. \tag{3.31}$$

A construção do sistema linear para o campo de velocidade é de tal forma que

$$\mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{Re\tilde{\rho}(\phi)^{n+1/2}} \nabla^2 \mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \Delta t(A + B + C + D) \tag{3.32}$$

$$A = -[(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}]^{n+1/2} \tag{3.33}$$

$$B = \left[\frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)} \nabla \cdot [\lambda(\phi)(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)] \right]^{n+1/2} \tag{3.34}$$

$$C = - \left[\frac{1}{ReCa\tilde{\rho}(\phi)} \delta(\phi)\kappa\nabla\phi \right]^{n+1/2} \tag{3.35}$$

$$D = -\frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)^{n+1/2}} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} \tag{3.36}$$

O termo A é discretizado como na Eq. (3.18) e é utilizado ENO de segunda ordem. Os termos D, C e B podem ser desenvolvidos em termos das componentes de x como

$$D_x = -\frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2}^{n+1/2}} \left(\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) \tag{3.37}$$

$$C_x = -\frac{1}{ReCa\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2}^{n+1/2}} \left(\frac{\kappa(\phi_{i,j}^{n+1/2}) + \kappa(\phi_{i+1,j}^{n+1/2})}{2} \right) \delta \left(\frac{\phi_{i,j}^{n+1/2} + \phi_{i+1,j}^{n+1/2}}{2} \right) \frac{\phi_{i,j}^{n+1/2} + \phi_{i+1,j}^{n+1/2}}{2} \tag{3.38}$$

$$B_x = \frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2}^{n+1/2}} \left[2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(\phi) \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1/2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n+1/2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda(\phi) \frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+1/2} \right] \tag{3.39}$$

$$B_x = \frac{1}{Re\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2}^{n+1/2}} \left[\frac{2\lambda(\phi_{i+1/2,j}^{n+1/2})(u_{i+1,j}^{n+1/2} - u_{i,j}^{n+1/2}) - 2\lambda(\phi_{i-1/2,j}^{n+1/2})(u_{i,j}^{n+1/2} - u_{i-1,j}^{n+1/2})}{\Delta x^2} + \frac{\lambda(\phi_{i,j+1/2}^{n+1/2})(u_{i,j+1}^{n+1/2} - u_{i,j}^{n+1/2}) - \lambda(\phi_{i,j-1/2}^{n+1/2})(u_{i,j}^{n+1/2} - u_{i,j-1}^{n+1/2})}{\Delta y^2} + \frac{\lambda(\phi_{i,j+1/2}^{n+1/2})(v_{i,j+1}^{n+1/2} - v_{i,j}^{n+1/2}) - \lambda(\phi_{i,j-1/2}^{n+1/2})(v_{i+1,j-1}^{n+1/2} - v_{i,j-1}^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y} \right] \quad (3.40)$$

Usa-se na discretização de $\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2}$ uma média harmônica,

$$\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2,j} = \frac{2}{\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i+1,j}} + \frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j}}}. \quad (3.41)$$

Discretizando o lado esquerda da Eq. (3.32) em termos da componente x do campo de velocidade, tem-se que

$$u_{i,j}^* - \frac{\Delta t}{Re\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2,j}} \left[\left(\frac{u_{i+1,j}^* + u_{i-1,j}^* - 2u_{i,j}^*}{\Delta x^2} \right) + \left(\frac{u_{i,j+1}^* + u_{i,j-1}^* - 2u_{i,j}^*}{\Delta y^2} \right) \right] = u_{i,j}^n + \Delta t(A_{xi,j} + B_{xi,j} + C_{xi,j} + D_{xi,j}) \quad (3.42)$$

Reordenando e agrupando os termos, tem-se um sistema linear do tipo

$$a_{i,j}u_{i-1,j}^* + b_{i,j}u_{i,j-1}^* + d_{i,j}u_{i+1,j}^* + e_{i,j}u_{i,j+1}^* + c_{i,j}u_{i,j}^* = f_{xi,j} \quad (3.43)$$

Para a componente v do campo de velocidade a ideia é a mesma. Para a determinação da equação para ξ , tira-se o divergente da Eq. (3.30):

$$\frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)} \nabla \chi^{n+1} \right). \quad (3.44)$$

A diferença em relação ao método de projeção com massa específica constante está na determinação dessa equação de pressão, Eq. (3.44), e sua discretização, que possui um coeficiente variável a multiplicando. Assim, a Eq. (3.44) fica na forma

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)} \frac{\partial \chi}{\partial x} \right)^{n+1/2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)} \frac{\partial \chi}{\partial y} \right)^{n+1/2} = \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} \right) \frac{1}{\Delta t}, \quad (3.45)$$

Discretizando

$$\begin{aligned} & \frac{\left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2,j}} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} \right)_{i+1/2,j} - \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i-1/2,j}} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} \right)_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \\ & \frac{\left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j+1/2}} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial y} \right)_{i,j+1/2} - \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j-1/2}} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial y} \right)_{i,j-1/2}}{\Delta y} = \left(\frac{u_{i,j}^* - u_{i-1,j}^*}{\Delta x} + \frac{v_{i,j}^* - v_{i,j-1}^*}{\Delta y} \right) \frac{1}{\Delta t} \\ & \frac{\left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2,j}} \right) \left(\frac{\chi_{i+1,j} - \chi_{i,j}}{\Delta x} \right) - \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i-1/2,j}} \right) \left(\frac{\chi_{i,j} - \chi_{i-1,j}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} + \\ & \frac{\left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j+1/2}} \right) \left(\frac{\chi_{i,j+1} - \chi_{i,j}}{\Delta y} \right) - \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j-1/2}} \right) \left(\frac{\chi_{i,j} - \chi_{i,j-1}}{\Delta y} \right)}{\Delta y} = \left(\frac{u_{i,j}^* - u_{i-1,j}^*}{\Delta x} + \frac{v_{i,j}^* - v_{i,j-1}^*}{\Delta y} \right) \frac{1}{\Delta t} \end{aligned}$$

Evidenciando χ :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x^2} \left[\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i-1/2,j}} (\chi_{i-1,j}) - \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2,j}} + \frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i-1/2,j}} \right) (\chi_{i,j}) + \frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i+1/2,j}} (\chi_{i+1,j}) \right] + \\ & \frac{1}{\Delta y^2} \left[\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j-1/2}} (\chi_{i,j-1}) - \left(\frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j+1/2}} + \frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j-1/2}} \right) (\chi_{i,j}) + \frac{1}{\tilde{\rho}(\phi)_{i,j+1/2}} (\chi_{i,j+1}) \right] \\ & = \left(\frac{u_{i,j}^* - u_{i-1,j}^*}{\Delta x} + \frac{v_{i,j}^* - v_{i,j-1}^*}{\Delta y} \right) \frac{1}{\Delta t} \end{aligned}$$

Note que forma um sistema linear do tipo

$$a_{i,j}\chi_{i-1,j} + b_{i,j}\chi_{i,j-1} + d_{i,j}\chi_{i+1,j} + e_{i,j}\chi_{i,j+1} + c_{i,j}\chi_{i,j} = f_{xi,j}. \quad (3.46)$$

3.3 Método de *Level Set*

Alguns aspectos que fazem parte da formulação do método de *Level Set* são apresentados neste capítulo. Primeiro o fato de que a evolução de ϕ é importante somente em uma faixa estreita em torno da interface, visto que a utilização de pontos distantes aumenta o custo computacional. Em segundo, é apresentada as discretizações de alta ordem, ENO e WENO, que são métodos conservativos necessários para equação de evolução de ϕ e sua reinicialização, e para o termo convectivo da Eq. (3.25). Em seguida, é mostrado os aspectos da reinicialização, e, por fim, como se dá a evolução temporal dessas equações citadas, feita com Runge-Kutta TVD de terceira ordem.

3.3.1 *Level Set* local

Como feito por Peng et al. (1999), é introduzida uma função na Eq. (2.37) chamada *cutoff*, que tem o objetivo de suavizar a função *Level Set* entre as bandas dos tubos. Garantindo, com isso, que ela seja calculada somente na região próxima à interface e evitando oscilações numéricas. Essa função é definida como

$$c(\phi) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\phi| \leq \beta \\ (|\phi| - \gamma)^2(2|\phi| + \gamma - 3\beta)/(\gamma - \beta)^3, & \text{se } \beta < |\phi| \leq \gamma \\ 0, & \text{se } |\phi| > \gamma \end{cases} \quad (3.47)$$

em que β é uma região mais interna que γ , são pontos em que $|\phi| \leq \beta$, dada por $\beta = 6 \max(\Delta x, \Delta y)$, é uma região de grande importância visto que está mais próxima da interface. Enquanto que γ é uma região mais extensa, dada por $\gamma = 9 \max(\Delta x, \Delta y)$, e é definida como os pontos em que $|\phi| \leq \gamma$. A *cutoff* é válida para a equação de transporte da função *Level Set*, mas não é utilizada na equação de reinicialização, já que esta é usada como forma de propagação de informação da região próxima à interface para regiões mais distantes. Sendo assim, a Eq. (2.37) é reescrita como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c(\phi) \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (3.48)$$

3.3.2 Esquemas WENO e ENO

Os termos convectivos presentes na equação de NS, na equação de transporte e reinicialização do método de *Level Set*, são formulados utilizando *upwind*. Logo, para o cálculo das derivadas é importante a utilização de métodos de ordem mais alta na discretização espacial. Para o caso do termo de NS é usado o esquema ENO de segunda ordem, no qual segundo Osher e Fedkiw (2006) fornece melhores aproximações numéricas para u_x^+ e u_x^- , e a ideia é calcular funções do fluxo numérico usando os interpolantes polinomiais mais suaves possíveis. Então, definindo uma variável k , em que $k = i - 1$ para o cálculo de u_x^- ou $k = i$ para o cálculo de u_x^+ , as derivadas são dadas por:

$$\begin{cases} D_{k+1/2}^1 = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \\ D_k^2 = \frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{2\Delta x} \\ D_{k+1}^2 = \frac{u_{k+2} - 2u_{k+1} + u_k}{2\Delta x} \end{cases}$$

E comparando as derivadas tem-se que uma pode ser mais suave que a outra, dessa forma, cria-se uma segunda variável definida como $c = D_k^2$ para o caso em que $|D_k^2| \leq |D_{k+1}^2|$ ou $c = D_{k+1}^2$ caso $|D_k^2| > |D_{k+1}^2|$. Assim, o polinômio fica da forma:

$$\begin{cases} Q'_1 = D_{k+1/2}^1 \\ Q'_2 = c(2(i - k) - 1)\Delta x \\ u_x = Q'_1 + Q'_2. \end{cases}$$

O mesmo vale para a componente v da velocidade. Agora, para o caso das equações convectivas que surgem com o método de *Level Set* é importante se ter uma ordem maior que a segunda para o cálculo das derivadas, já que tem-se maior erro numérico devido à perda de massa da gota. Assim, de acordo Osher e Fedkiw (2006) é utilizado o esquema WENO de quinta ordem, que utiliza os pontos $\{\phi_{i-2}, \phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}, \phi_{i+2}, \phi_{i+3}\}$ e no qual é uma média ponderada de todos os valores obtidos por um esquema ENO, assim, para o cálculo de ϕ_x^+ é definido os parâmetros

$$\begin{cases} v_1 = \frac{\phi_{i+3} - \phi_{i+2}}{\Delta x} \\ v_2 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} \\ v_3 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{2\Delta x} \\ v_4 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \\ v_5 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x} \end{cases}$$

Já os termos para o cálculo de ϕ_x^- são dados por

$$\begin{cases} v_1 = \frac{\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{\Delta x} \\ v_2 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{2\Delta x} \\ v_3 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{2\Delta x} \\ v_4 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} \\ v_5 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x} \end{cases}$$

Assim, por ENO as três aproximações da derivada são dadas por:

$$\begin{cases} \phi_x^1 = \frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6} \\ \phi_x^2 = -\frac{v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{3} \\ \phi_x^3 = \frac{v_3}{3} + \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6} \end{cases}$$

Como o WENO faz uma média ponderada desses três valores para obter uma aproximação da derivada, então, é definido alguns parâmetros para computar os pesos, primeiro estima-se a suavidade dos estênceis como:

$$\begin{cases} S_1 = \frac{13}{12}(v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1 - 4v_2 + 3v_3)^2 \\ S_2 = \frac{13}{12}(v_2 - 2v_3 + v_4)^2 + \frac{1}{4}(v_2 - v_4)^2 \\ S_3 = \frac{13}{12}(v_3 - 2v_4 + v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3 - 4v_4 + v_5)^2 \end{cases}$$

no qual são utilizados para o cálculo dos parâmetros

$$\begin{cases} \alpha_1 = \frac{0,1}{(S_1+\epsilon)^2} \\ \alpha_2 = \frac{0,6}{(S_2+\epsilon)^2} \\ \alpha_3 = \frac{0,3}{(S_3+\epsilon)^2} \end{cases}$$

sendo $\epsilon = 10^{-6}$. Finalmente, os pesos normalizados são dados por:

$$\begin{cases} \omega_1 = \frac{\alpha_1}{(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)} \\ \omega_2 = \frac{\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)} \\ \omega_3 = \frac{\alpha_3}{(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)}. \end{cases}$$

Com isso, a aproximação para a derivada pelo WENO é dada por:

$$\phi_x = \omega_1\phi_x^1 + \omega_2\phi_x^2 + \omega_3\phi_x^3. \quad (3.49)$$

3.3.3 Reinicialização da *Level Set*

A Eq. (2.37) apesar de garantir que zero em ϕ represente a posição da interface, ela pode não permanecer desta forma durante toda a simulação, por isso se introduz uma reinicialização por uma equação convectiva, proposta por (SUSSMAN et al., 1994), dada por:

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + S(\phi)(|\nabla\phi| - 1) = 0. \quad (3.50)$$

Sendo $S(\phi)$ uma função sinal, definida como 1 em Ω^+ , -1 em Ω^- e 0 na interface. E τ é um tempo virtual, que neste trabalho é $\tau = 0.45\min(\Delta x, \Delta y)$ como feito por Min (2010). Ademais, a Eq. (3.50) deve satisfazer $|\nabla\phi| = 1$, ou seja, ela deve evoluir um tempo τ até que esta condição seja satisfeita, garantindo que o vetor normal e o vetor tangencial se preservem como vetores unitários, o que permite definir a interface corretamente. Além disso, a Eq. (3.50) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \mathbf{w} \cdot \nabla\phi = S(\phi), \quad (3.51)$$

onde

$$\mathbf{w} = S(\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}. \quad (3.52)$$

Percebe-se que a Eq. (3.51) é uma equação hiperbólica não linear cujas características são dadas por \mathbf{w} , que é um vetor normal sempre apontando para fora da interface (SUSSMAN et al., 1994). Assim, utiliza-se para a discretização espacial no algoritmo de reinicialização o esquema de *upwind* juntamente com WENO, para o cálculo de ϕ_x^- e ϕ_x^+ , e Godunov. Para a discretização temporal usa-se Runge-Kutta TVD de terceira ordem. O Godunov é dado pela expressão:

$$G(\phi) = \begin{cases} \sqrt{(\max((a^+)^2, (b^-)^2) + \max((c^+)^2, (d^-)^2))} - 1, & \text{se } \phi > 0 \\ \sqrt{(\max((a^-)^2, (b^+)^2) + \max((c^-)^2, (d^+)^2))} - 1, & \text{se } \phi < 0. \end{cases} \quad (3.53)$$

sendo $.+ = \max(., 0)$ e $.- = \min(., 0)$, $a = D_x^- \phi$, $b = D_x^+ \phi$, $c = D_y^- \phi$ e $d = D_y^+ \phi$ que são derivadas calculadas pelo esquema WENO. Assim, a Eq. (3.50) é reescrita na forma

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta \tau S_\epsilon(\phi) G(\phi^n) \quad (3.54)$$

onde S_ϵ é uma função sinal suavizada usada para reduzir erros numéricos, dada por

$$S_\epsilon = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + |\nabla \phi|^2 \epsilon^2}}, \quad (3.55)$$

sendo ϵ é um parâmetro de suavização definido por $\epsilon = \max(\Delta x, \Delta y)^2$. Esse processo apesar de importante do ponto de vista de conservar a função *Level Set* como uma função distância ele pode criar erros numéricos e intervir na conservação de massa, por isso é usado de forma intermitente, para este trabalho é setado em todas as iterações, possuindo 3 passos temporais para cada. Devido aos erros numéricos associados à reinicialização, Osher e Fedkiw (2006) propõem a adição de um termo de correção ao lado direito da Eq. (3.50), para preservar o volume durante a reinicialização

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + S(\phi)(|\nabla \phi| - 1) = \lambda_r \delta(\phi) |\nabla \phi|. \quad (3.56)$$

Sendo que λ_r é dado por:

$$\lambda_r = - \frac{\int_{\Omega_{i,j}} \delta(\phi) \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} \right) d\mathbf{x}}{\int_{\Omega_{i,j}} \delta^2(\phi) |\nabla \phi| d\mathbf{x}}. \quad (3.57)$$

Essa integração numérica feita no domínio

$$\Omega_{i,j} = ((x, y) | x_{i-1/2} < x < x_{i+1/2} \quad \text{e} \quad y_{j-1/2} < y < y_{j+1/2}) \quad (3.58)$$

é calculada usando quadratura de 9 pontos, como feito por Sussman et al. (1998).

3.3.4 Discretização temporal da equação advectiva e da reinicialização

Para a evolução no tempo da equação de transporte do *Level Set* e da equação de reinicialização, onde métodos explícitos são suficientes para discretização temporal, é utilizado esquemas de Runge-Kutta com diminuição de variação total de terceira ordem, recomendado por Peng et al. (1999) quando se utiliza WENO de quinta ordem. Então, já que método apresentado pode ser definido como uma combinação de etapas de Euler explícito, tem-se que para uma equação genérica define-se como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L(\phi, t). \quad (3.59)$$

Logo, para a equação evolutiva do *Level Set* e a equação de reinicialização tem-se que

$$\begin{cases} L(\phi, t) = -\mathbf{u}(t) \cdot \nabla \phi \\ L(\phi) = S_\epsilon(\phi)(|\nabla \phi| - 1)G(\phi). \end{cases} \quad (3.60)$$

Dessa forma,

$$\begin{cases} \phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t L(\phi^n, t^n) \\ \phi^{n+2} = \phi^{n+1} + \Delta t L(\phi^{n+1}, t^n + \Delta t) \\ \phi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{4}\phi^n + \frac{1}{4}\phi^{n+2} \\ \phi^{n+\frac{3}{2}} = \phi^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t L(\phi^{n+\frac{1}{2}}, t + \frac{1}{2}\Delta t) \\ \phi^{n+1} = \frac{1}{2}\phi^n + \frac{2}{3}\phi^{n+\frac{3}{2}}. \end{cases}$$

3.4 Sistema linear

Dada as equações governantes e as condições de contorno, para um sistema discretizado de acordo com a seção 3.1 é necessário construir um sistema linear do tipo:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}. \quad (3.61)$$

Para resolvê-lo é utilizado a formulação de stencil de 5 pontos, Eq. (3.62), que é basicamente um arranjo geométrico de um grupo de nós relacionados a um ponto de interesse. Ou seja, para determinar $x_{i,j}$ é necessário apenas dos valores vizinhos,

$$ax_{i-1,j} + bx_{i,j-1} + cx_{i,j} + dx_{i+1,j} + ex_{i,j+1} = f, \quad (3.62)$$

em que a, b, c, d, e são os coeficientes da matriz \mathbf{A} e f é o coeficiente do vetor \mathbf{b} . Para resolver a Eq. (3.61), neste trabalho, é utilizado o método do gradiente conjugado pré-condicionado pela matriz simétrica do SSOR, em que \mathbf{A} é uma matriz positiva definida, ou seja, $x^T Ax > 0 \forall x \neq 0$ e seus autovalores são maiores que zero. Trata-se de um método iterativo que gasta menos memória e é mais eficiente em diversos casos se comparado com a fatoração e a inversão de matrizes (SHEWCHUK et al., 1994). Assim, para a

implementação do método tem-se que: \mathbf{r} é o resíduo da iteração, \mathbf{M} é a matriz pré-condicionadora, \mathbf{z} é o resíduo pós multiplicado pela matriz condicionadora, α seria a direção que a estimativa segue, e β , o erro, (SAAD, 2003). Logo, é calculado como:

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, \quad (3.63)$$

$$\mathbf{z}_0 = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_0 \quad (3.64)$$

e

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0. \quad (3.65)$$

Assim, calcula-se até a convergência dos resíduos \mathbf{r}_i , em que i representa cada iteração

$$\alpha_j = \frac{\mathbf{r}_i \mathbf{z}_i}{\mathbf{A} \mathbf{p}_i \mathbf{p}_i} \quad (3.66)$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i \quad (3.67)$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{A} \mathbf{p}_i \quad (3.68)$$

$$\mathbf{z}_{i+1} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}_{i+1} \quad (3.69)$$

$$\beta_i = \frac{\mathbf{r}_{i+1} \mathbf{z}_{i+1}}{\mathbf{r}_i \mathbf{z}_i} \quad (3.70)$$

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i \quad (3.71)$$

4 Resultados

Este capítulo apresenta dois casos de validação numérica. O primeiro é o problema da cavidade com cisalhamento na parede superior, utilizado como forma de validação do método de projeção, e segundo, o caso de um escoamento bifásico com as condições de contorno de cisalhamento simples, utilizado para validação do método de *Level Set*. Em seguida, simula-se o caso de escoamento bifásico cujo movimento da gota é causado por uma diferença de densidade em relação ao fluido base.

4.1 Escoamento monofásico na cavidade

Um dos problemas clássicos da hidrodinâmica dos fluidos é a cavidade com cisalhamento apenas na parede superior. Como já foi amplamente estudado, torna-se uma referência para validação numérica. Foi usado como comparação neste trabalho Ghia, Ghia e Shin (1982), no qual obteve bons resultados para Reynolds iguais a 100, 400, 1000, 3200, 5000 e 10000. As condições de contorno são: condição de contorno de Neumann para pressão em todas as paredes, o campo de velocidade possui $u = 1$ na parede superior e zero nas outras. É resolvida a Eq. (3.16) usando o esquema ENO de segunda ordem com *upwind* no termo advectivo, para a discretização espacial, e Crank-Nicolson para a discretização temporal.

4.1.1 Validação da ordem do método

Para verificar a ordem do método, é feita uma análise da velocidade u calculada por uma interpolação linear no centro geométrico da cavidade de tamanho 1×1 , para um número de Reynolds de $Re = 100$, com passo de tempo de $\Delta t = 10^{-3}$, até o instante $t = 1.0$. Comparando-a entre tamanhos distintos de malha, 32×32 , 64×64 , 128×128 , 256×256 , 512×512 e 1000×1000 (Tab. 1), sendo h o tamanho da malha. A formulação para o cálculo da ordem do método é dada por

$$2^p = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{u^h - u^{h/2}}{u^{h/2} - u^{h/4}} \quad (4.1)$$

Como é utilizado *upwind*, a garantia de convergência é importante, já que este é um método dissipativo. Assim, usa-se o CFL para verificá-la, que é dado por:

$$CFL = \frac{\mathbf{u}_w \Delta t}{\Delta x}. \quad (4.2)$$

Para a malha mais refinada, tem-se que o número de CFL para a condição próxima da parede superior é de CFL=0.512, logo, o intervalo de tempo para discretização temporal é aceitável.

| $n \times n$ | u^h | $\frac{u^h - u^{h/2}}{u^{h/2} - u^{h/4}}$ | p |
|--------------------|--------|---|-------|
| 32×32 | 0,9517 | 1,973 | 0,973 |
| 64×64 | 0,9757 | 1,986 | 0,990 |
| 128×128 | 0,9878 | 2,033 | 1,023 |
| 256×256 | 0,9938 | 2,81 | 1,494 |
| 512×512 | 0,9953 | 3,89 | 1,961 |
| 1000×1000 | 0,9968 | - | - |

Tabela 1 – Análise de ordem do método e convergência de malha.

Note na Tab. 1 que à medida que se refina a malha, obtém-se uma interpolação de segunda ordem para a velocidade, o que garante a ordem definida na construção dos métodos numéricos empregados.

4.1.2 Comparação com resultados disponíveis na literatura

O problema da cavidade cisalhante foi comparado com os resultados do Ghia, Ghia e Shin (1982) para números de Reynolds iguais a 100, 400 e 1000, optou-se por uma malha de 128×128 e $\Delta t = 10^{-3}$ simulados até o regime permanente. Foram feitas comparações dos perfis de velocidade na direção x em $x = 0,5$ e na direção y em $y = 0,5$ para cada número de Reynolds, com uma cavidade de tamanho 1.0×1.0

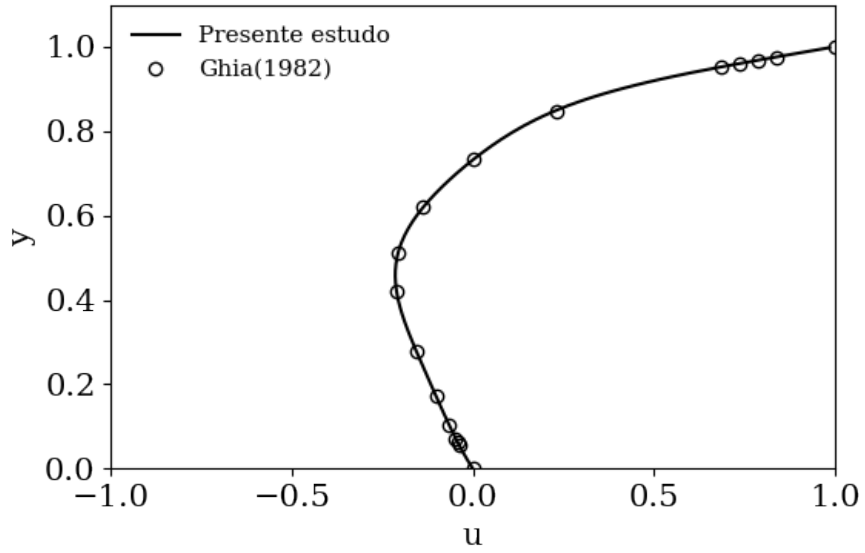


Figura 5 – Comparação dos perfis de velocidade de u em $x=0,5$ com $R_e = 100$

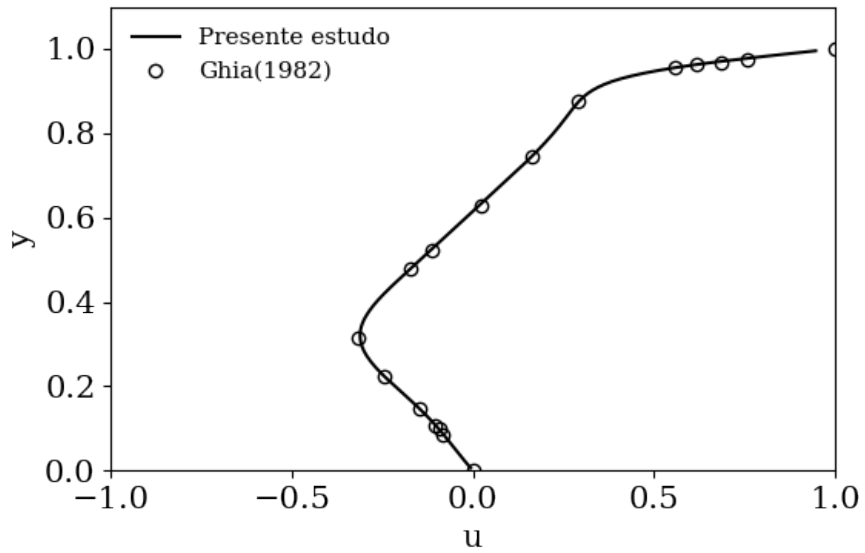


Figura 6 – Comparação dos perfis de velocidade de u em $x=0,5$ com $R_e = 400$

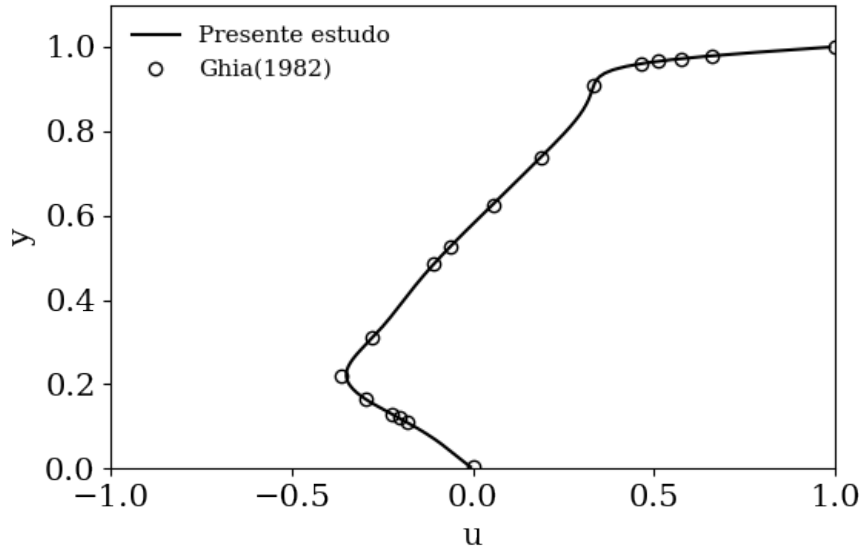


Figura 7 – Comparação dos perfis de velocidade de u em $x=0,5$ com $Re = 1000$

As Figs. 5, 6 e 7, mostram os gráficos de perfis de velocidade u_x no centro da cavidade. Observa-se que a solução numérica para $Re = 100, 400$ e 1000 deste trabalho está bem comportada, comparando-a com Ghia, Ghia e Shin (1982). O mesmo observa-se nas Figs. 8, 9 e 10 para o perfil de velocidade u_y .

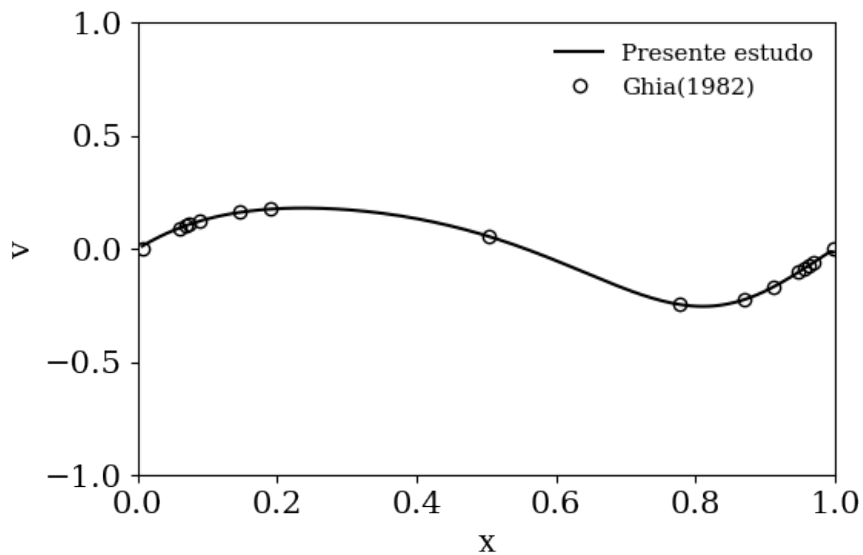


Figura 8 – Comparação dos perfis de velocidade de v em $y=0,5$ com $Re = 100$

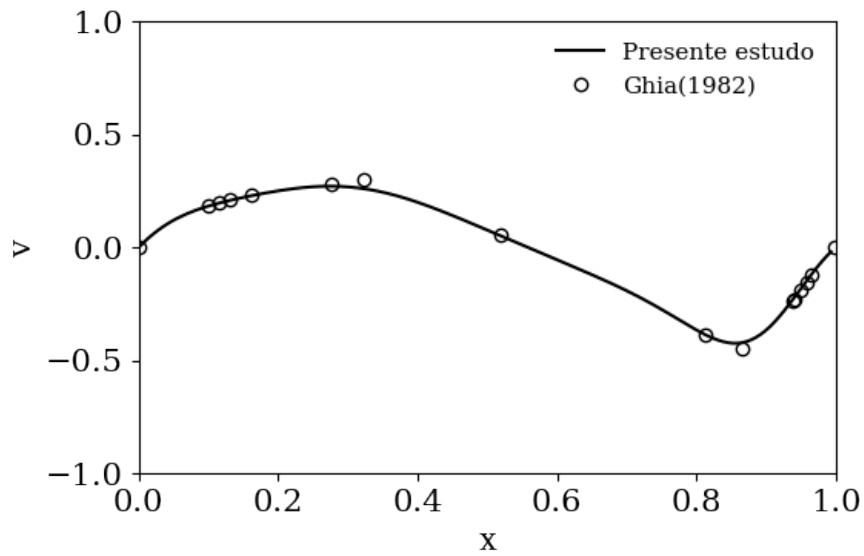


Figura 9 – Comparação dos perfis de velocidade de v em $y=0,5$ com $Re = 400$

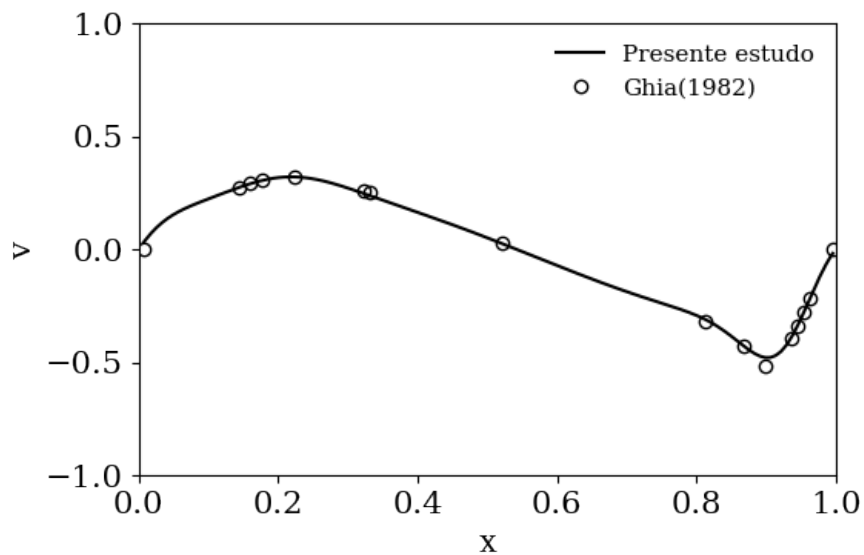
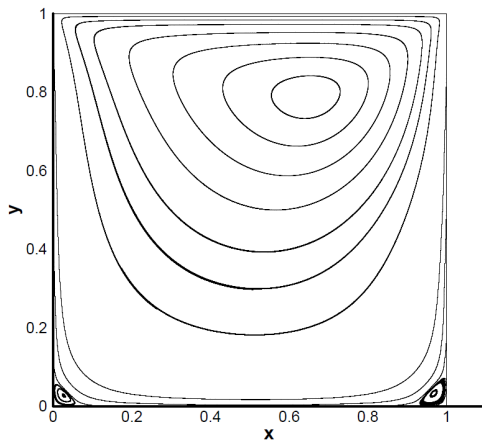


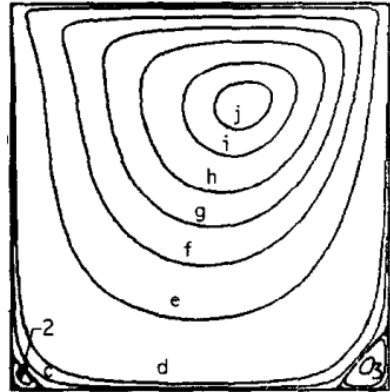
Figura 10 – Comparação dos perfis de velocidade de v em $y=0,5$ com $Re = 1000$

Assim, nas Figs. 11, 12 e 13 são apresentadas as linhas de correntes obtidas para Reynolds iguais a 100, 400 e 1000 com malha 128×128 . Nota-se bons resultados, já que aparecem zonas de recirculação, e as mesmas tornam-se mais significativas conforme o aumento do número de Reynolds, como esperado.



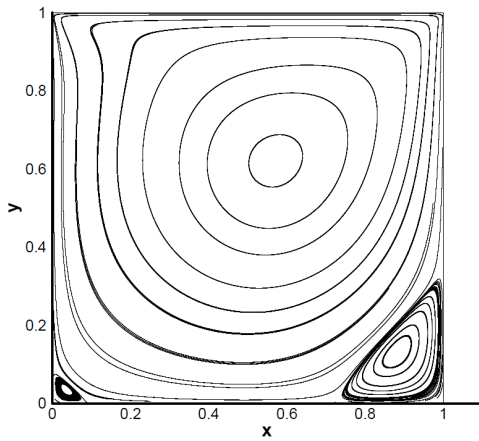
(a) Resultado obtido

RE = 100, UNIFORM GRID (129x129)



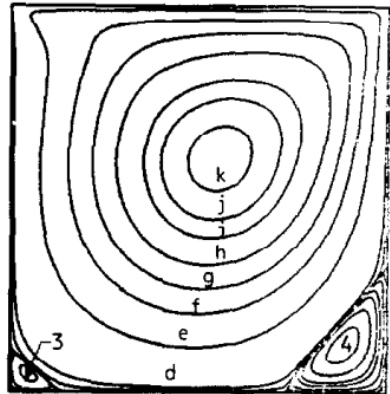
(b) (GHIA; GHIA; SHIN, 1982)

Figura 11 – Linhas de corrente para $Re = 100$



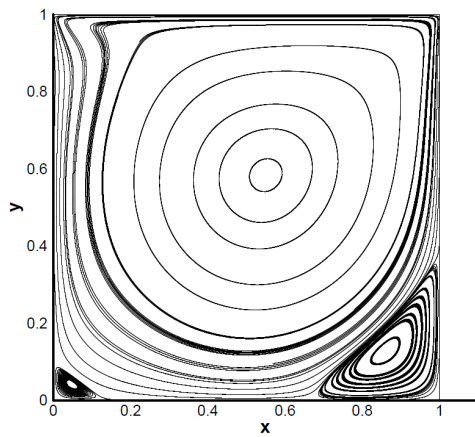
(a) Resultado obtido

RE = 400, UNIFORM GRID (257x257)



(b) (GHIA; GHIA; SHIN, 1982)

Figura 12 – Linhas de corrente para $Re = 400$



(a) Resultado obtido

RE = 1000, UNIFORM GRID (129 x 129)



(b) (GHIA; GHIA; SHIN, 1982)

Figura 13 – Linhas de corrente para $Re = 1000$

4.2 Escoamento bifásico em cisalhamento simples

Como meio de validação do método de *Level Set*, foram feitas simulações para uma gota em cisalhamento simples, Fig. 14. Analisando, assim, sua deformação, inclinação, e comparando com os resultados disponíveis na literatura. Kennedy, Pozrikidis e Skalak (1994) usando a formulação de integral de contorno simularam uma gota, em regime de Stokes, sob cisalhamento simples para variadas razões de viscosidade, analisando consequentemente sua deformação. Ioannou, Liu e Zhang (2016) simularam os mesmos casos, porém, utilizando o método de Lattice Boltzmann. Já Kwak e Pozrikidis (1998) e Guido (2011) utilizaram o método do Avanço de Fronteira com o método de integral de contorno. Foram feitas simulações com $Re = 10^{-2}$, malha com 256×256 , cavidade com dimensão 12×12 , como forma de evitar efeitos da parede na deformação da gota, a qual possui raio unitário. Foi utilizado $\Delta t = 0.5 \times 10^{-3}$ até o regime permanente.

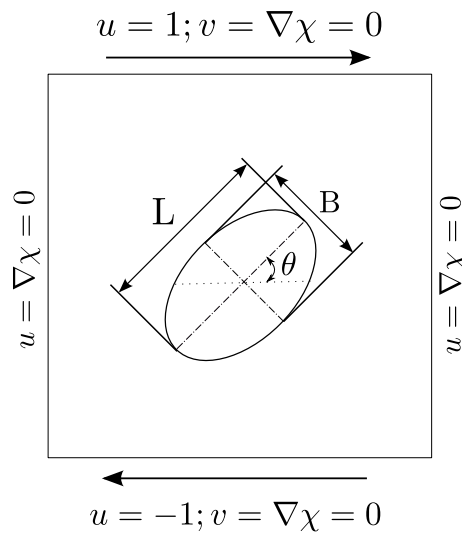


Figura 14 – Representação das condições de contorno para o escoamento bifásico na cavidade, com $\lambda = 1$ e $\rho = 1$.

Percebe-se, pela Fig. 15, que conforme o número de capilaridade aumenta maior a taxa de cisalhamento do escoamento, logo, a gota tende a deformar-se mais, e a inclinar na direção do escoamento tomando uma forma elipsoidal. Portanto, a razão de confinamento e o número capilar são restritos a $2R/H \leq 0,7$ e $Ca \leq 0,3$, e ambos não assumirão grandes valores nas simulações, como feito por Ioannou, Liu e Zhang (2016), a fim de garantir que a gota deformada se mantenha em uma forma elipsoidal. Observa-se que os resultados estão de completo acordo com o estudo experimental feito por Vananroye et al. (2008).

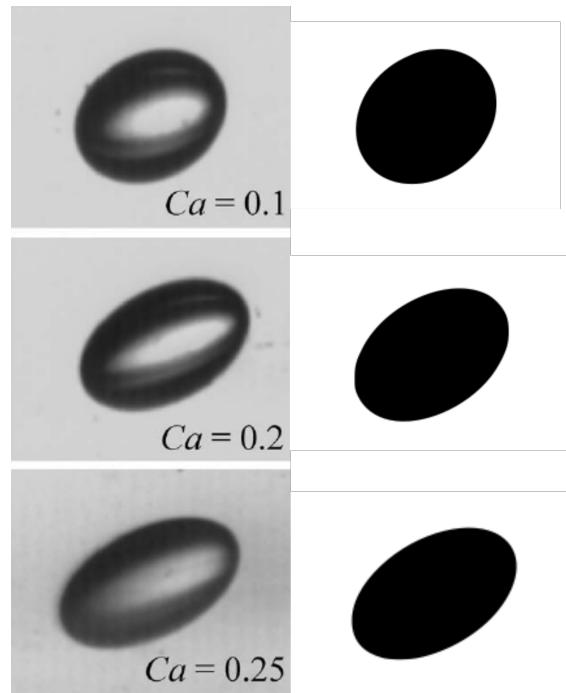


Figura 15 – Comparação com Vananroye et al. (2008) para uma gota em cisalhamento simples com $Ca = 0.1$, 0.2 e 0.25 . Visualização experimental retirada de Vananroye et al. (2008) na coluna esquerda com $2R/H = 0.18$, e numericamente obtido nesse trabalho na coluna direita com $2R/H = 0.16$.

Na Fig. 16 a deformação é dada por $D = (L - B)/(L + B)$, em que L e B são as dimensões dos eixo maior e menor da elipse formada pela gota, respectivamente. Com o aumento de Ca o semi-eixo maior da gota passa a se alongar cada vez mais com a direção do escoamento da gota, causando uma diminuição no eixo menor. No limite em que $L = B$ tem-se que a deformação é zero, ou seja, a gota permanece esférica. Na Fig. 17 a inclinação da gota é dada pelo ângulo θ que é formado entre o eixo principal da gota e a direção do fluxo. Por haver uma maior deformação da gota para Ca maiores, a inclinação da gota diminui respectivamente a medida que Ca aumenta, pois ela tende a se alinhar ao fluxo do escoamento.

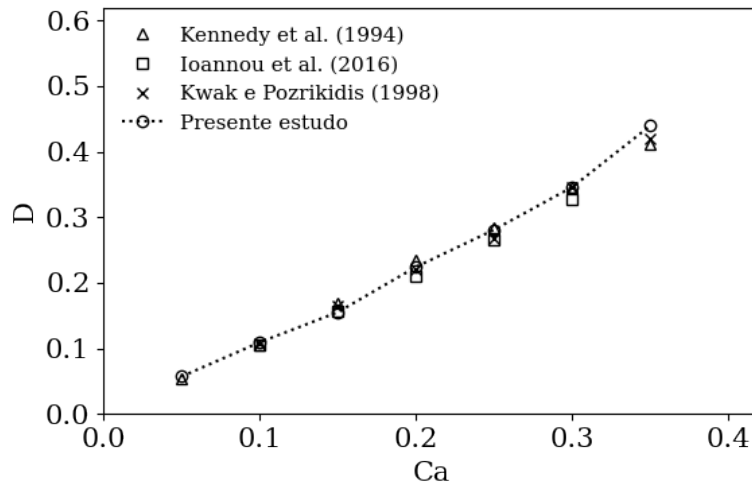


Figura 16 – Comparação com o trabalho de Kennedy, Pozrikidis e Skalak (1994), Ioannou, Liu e Zhang (2016) e Kwak e Pozrikidis (1998): deformação da gota, D , como função do número de capilaridade, Ca . Gota em cisalhamento simples com $Re = 10^{-2}$.

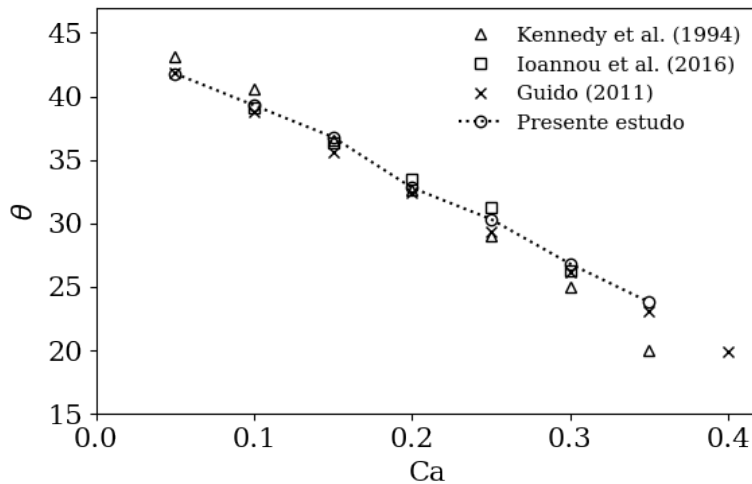


Figura 17 – Comparação com o trabalho de Kennedy, Pozrikidis e Skalak (1994), Ioannou, Liu e Zhang (2016) e Guido (2011): inclinação da gota em graus, θ , como função do número de capilaridade, Ca . Gota em cisalhamento simples com $Re = 10^{-2}$.

4.3 escoamento bifásico na cavidade

Este subcapítulo apresenta a simulação de três casos: a flotação de uma bolha de ar em água, sedimentação de uma gota, e a coalescência co-axial e oblíqua de duas bolhas de ar em água. Nesta parte do trabalho, é feita outra adimensionalização, dado que o efeito do campo gravitacional é um importante parâmetro nos fenômenos citados e a condição de contorno para velocidade é zero em todas as paredes, ou seja, não há uma

taxa de cisalhamento no escoamento. Com isso, as variáveis adimensionais usadas são

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{(gD)^{1/2}}, \quad t^* = \frac{t}{D^{1/2}g^{-1/2}}, \quad \mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{D}, \quad p^* = \frac{p}{\rho g D}, \quad \kappa^* = D\kappa,$$

$$\nabla^* = D\nabla, \quad \delta^* = D\delta, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho_2}{\rho_1}, \quad \lambda = \frac{\mu_2}{\mu_1}; \quad \mathbf{g}^* = \frac{\mathbf{g}}{g}$$

em que D é o diâmetro da gota. Substituindo na Eq. (2.45), e suprimindo os asteriscos, chega-se em

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho} Re} \nabla \cdot [\lambda(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \frac{1}{\tilde{\rho} Bo} \kappa \delta(\phi) \hat{\mathbf{n}} - \frac{We}{Bo} \hat{\mathbf{e}}_y. \quad (4.3)$$

Com isso, surge alguns parâmetros adimensionais, tais como o número de Bond,

$$Bo = \frac{\rho g D^2}{\tau}, \quad (4.4)$$

também chamado de número de Eötvös na literatura, que representa a razão entre força gravitacional e a tensão interfacial. O número de Weber,

$$We = \frac{D \rho u^2}{g \tau} \quad (4.5)$$

que relaciona a inércia e a tensão interfacial do problema. O número de Weber relaciona-se com o número de Bond e Froude, de forma que (MAXWORTHY et al., 1996)

$$Fr^2 = \frac{We}{Bo}. \quad (4.6)$$

Na literatura é recorrente setarem o número de Morton,

$$Mo = \frac{g \nu^4 \rho^3}{\tau^3}, \quad (4.7)$$

que é, também, uma razão entre o termo advectivo e o termo de tensão interfacial, porém, depende apenas das propriedades dos fluidos e não da geometria da gota. Esse parâmetro está relacionado com Re e Bo como sendo

$$Mo = \frac{Bo^3}{Re^4} \quad (4.8)$$

ou, relacionado com We , como:

$$We^2 = \frac{Re^4 Mo}{Eo}. \quad (4.9)$$

Por fim, tem-se o número de Reynolds que já foi apresentado na Eq. (2.47).

4.3.1 Flotação

Na simulação da flotação de uma bolha, foram utilizadas condições de contorno para cavidade de 4×12 com paredes paradas, um intervalo de tempo de $\Delta t = 0.5 \times 10^{-3}$,

malha de 128×384 , sendo a bolha de diâmetro unitário posicionada no centro do domínio, para a pressão é imposta a condição de contorno homogênea de Neumann em todas as paredes. Como comparação foram utilizados os resultados de Sussman et al. (1994) (Fig. 19), que usaram o método de *Level Set* e o de projeção para simulação, e Kruisbrink et al. (2018) (Fig. 20) que utilizaram o *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH). Note, pela Fig. 18, que o movimento ascendente da bolha é devido à uma diferença de densidade em relação ao fluido base, de forma que na superfície inferior a pressão é mais alta do que na superfície superior, o que leva à uma força de empuxo que induz o movimento. A bolha irá acelerar enquanto a flutuabilidade for maior que a inércia.

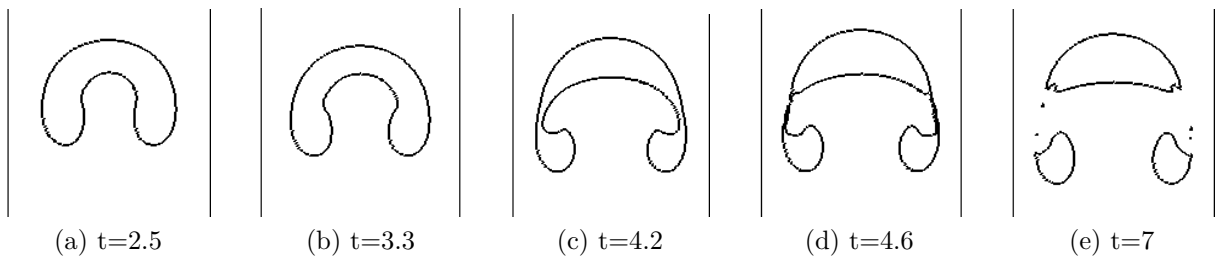


Figura 18 – Fenômeno de ascensão de uma bolha com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Bo = 10$ e $Re = 200$, $We = 10$ ($Fr = 1$) obtido neste trabalho.

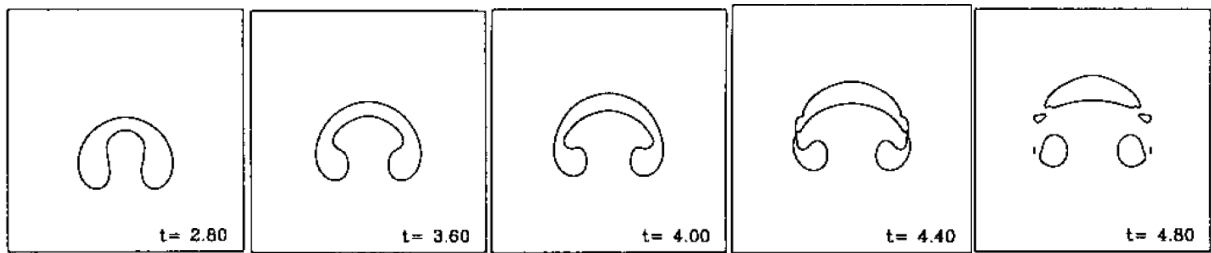


Figura 19 – Ascensão de uma bolha com $\rho = 0.001$, $Re = 100$, $Bo = 200$, malha 140×140 , $Fr = 1$ (SUSSMAN et al., 1994).

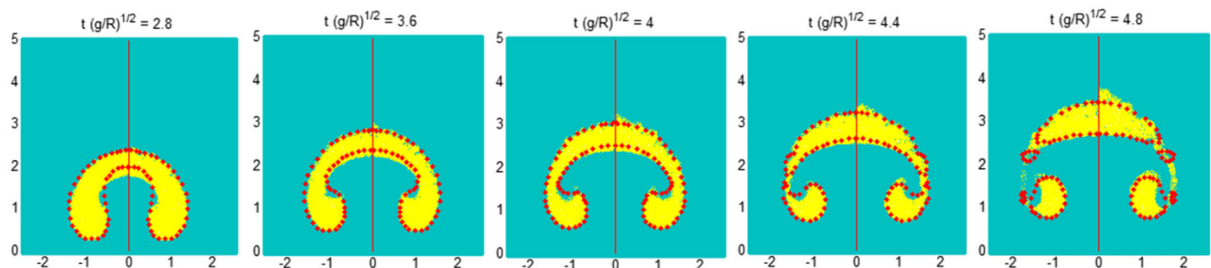


Figura 20 – Ascensão de uma bolha com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 100$, $Bo = 200$, $Fr = 1$ (KRUISBRINK et al., 2018)

À medida que a bolha sobe, a superfície superior em contato com o líquido quiescente recebe uma resistência ao fluxo relativamente estável. Por outro lado, a esteira que

forma na parte inferior da bolha empurra sua superfície para cima, na Fig. 18b nota-se que a curvatura já inverteu e está diminuindo de magnitude conforme o avanço no tempo. Na Figs. 18c, 19d e 20d, a bolha está no começo do rompimento de sua saia, visto que o aumento da recirculação na parte inferior faz com que a curvatura diminua, até que a tensão interfacial não consiga vencer a pressão de dentro da região e a saia se rompa, como pode-se ver na Fig. 18d, de tal forma que a bolha principal se deforma para a forma semi esférica, como um formato de chapéu (Fig. 18e), devido à maior força de empuxo e menor força de tensão interfacial causada pela menor curvatura da superfície. Nota-se, pela comparação das Figs. 18 e 21, a influência do número de Froude. Para um menor Fr a bolha sobe com maior velocidade porque o escoamento é mais sensível às forças de empuxo do que as inerciais, já que a força gravitacional é menos dominante. Na Fig. 21, a bolha possui menos resistência na subida devido ao Fr ser menos expressivo no escoamento, fazendo com que as forças inerciais sejam menores.

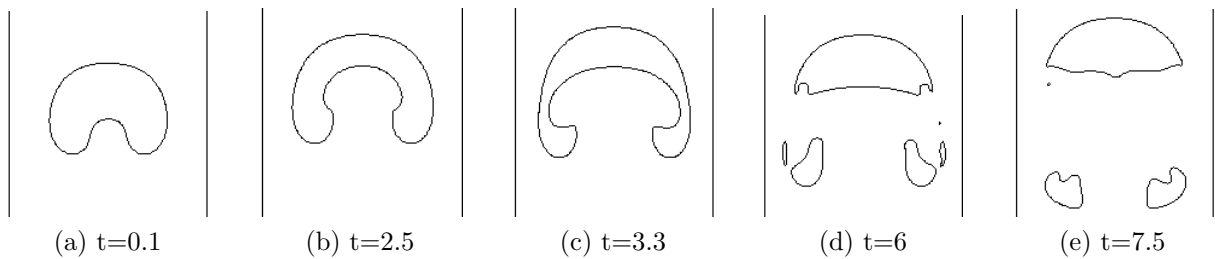


Figura 21 – Ascensão da gota com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $We = 3,5 \times 10^3$, $Bo = 10$ e $Re = 200$ ($Fr = 2.8 \times 10^{-3}$). Cavidade com 4×12 .

4.3.2 Sedimentação

No caso da sedimentação de uma gota, assim como na flotação, foram utilizadas condições de contorno para cavidade de 4×12 com paredes paradas, um intervalo de tempo de $\Delta t = 0.5 \times 10^{-5}$, malha de 128×384 , sendo a bolha de raio diâmetro unitário posicionada no centro do domínio, para a pressão é imposta a condição de contorno homogênea de Neumann em todas as paredes. Note que para uma bolha inicialmente esférica, a força de tensão interfacial irá resistir ao aumento da área da superfície da bolha e, portanto, irá resistir à formação e ao desenvolvimento da região de esteira na parte inferior. Portanto, se essa região se formará ou não, e se ela faz com que a bolha se torne toroidal, todas essas questões vão depender da importância relativa entre o termo inercial e a força de tensão interfacial. Percebe-se pelas Figs. (22b) e (23b) que a gota possui uma forma toroidal devido à compressão que submete-se, pelo fluxo superior e inferior que são opostos e gerados pela força de empuxo atrelado à diferença de massa específica entre os fluidos. Comparando as Figs. 22 e 23, percebe-se que com o aumento do número de Reynolds há uma maior deformação, dado que as forças inerciais são mais expressivas e atuam no mesmo sentido que a força de empuxo, o que contribui para a deformação da gota. Na Fig. 24 a gota possui $Bo = 200$, e tende a sofrer maior deformação, como observa-se na

Fig. 24b em comparação com as Figs. 22b e 23b, o surgimento de uma saia curvada para dentro, o que não ocorre na Fig. 22b que possui $Bo = 10$. Note que o fenômeno foi tão intenso, na Fig. 24d, que teve um afunilamento na saia com a inversão da curvatura a ponto da própria tensão interfacial terminar de romper a gota.

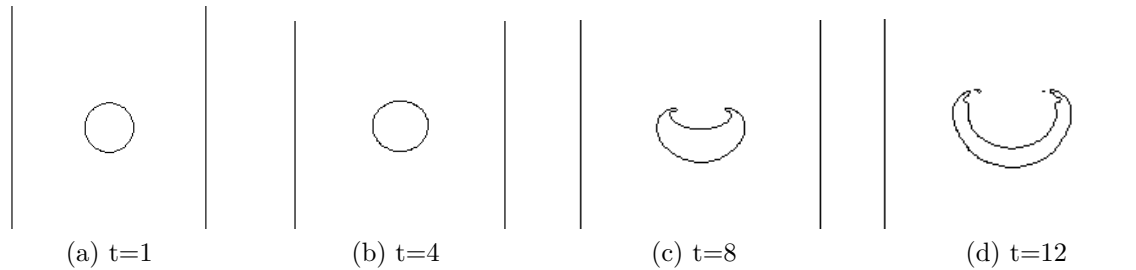


Figura 22 – Sedimentação de uma gota com $\rho = 2.0$, $\lambda = 10$, $Re = 500$, $Bo = 10$ e $We = 10$ ($Fr = 1$). Cavidade com 4×12 .

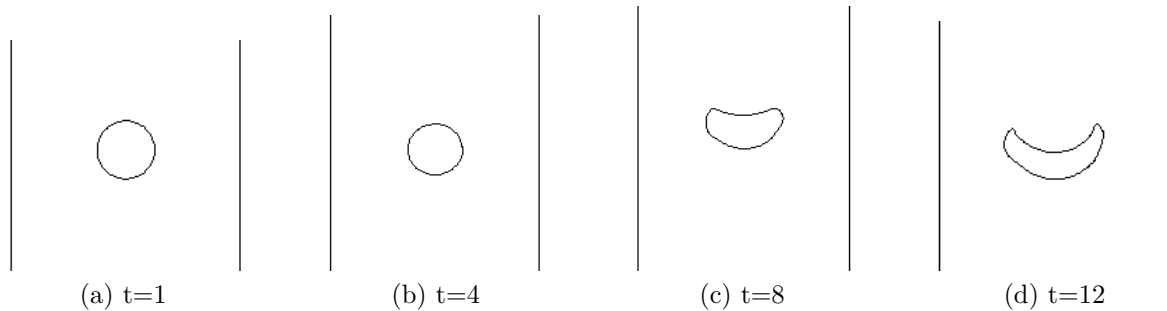


Figura 23 – Sedimentação de uma gota com $\rho = 2.0$, $\lambda = 10$, $Re = 1$, $Bo = 10$ e $We = 10$ ($Fr = 1$). Cavidade com 4×12 .

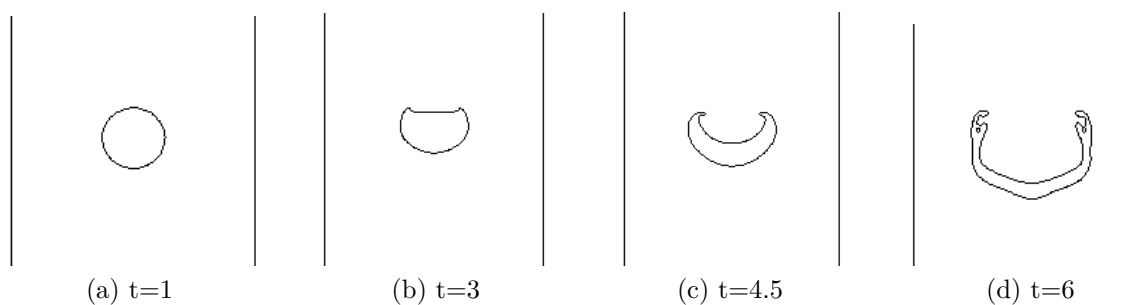


Figura 24 – Sedimentação de uma gota com $\rho = 2.0$, $\lambda = 10$, $Re = 500$, $Bo = 200$ e $We = 200$ ($Fr = 1$). Cavidade com 4×12 .

4.3.3 Coalescência

A coalescência de bolhas, ou gotas, é um processo pelo qual duas ou mais bolhas se fundem e formam uma bolha maior após a colisão. É um resultado da competição entre as forças capilares que conduzem a coalescência e a inércia do problema que retarda o fenômeno, numa situação fora do regime de Stokes. Note que ocorre devido à instabilidade

da emulsão, de forma que com o uso de um agente emulsificante há uma redução desse fenômeno. Dado isso, simulou-se a coalescência de duas bolhas, usando as condições de contorno com paredes paradas para o campo de velocidade, a cavidade possui dimensão de 4×12 , é utilizado um intervalo de tempo de $\Delta t = 0.5 \times 10^{-3}$, malha de 128×384 . As bolhas são configuradas de forma coaxiais, primeiramente, e em seguida analisa-se o caso de duas bolhas com configuração oblíqua.

No caso do arranjo coaxial, as bolhas começam a subir devido à força de empuxo, posteriormente, uma esteira é formada atrás da bolha superior devido a um gradiente de pressão. Com o avanço do tempo, note pelas Figs. 25b e 26b, as duas bolhas se achatam devido a uma diferença de pressão entre as superfícies superior e inferior das mesmas. O jato líquido formado atrás da bolha superior induz uma deformação da bolha seguinte, e a parte inferior da bolha de cima é progressivamente achatada, enquanto que a parte superior permanece esférica, o que está de completo acordo com o experimento feito por Brereton e Korotney (1991). Pelas Figs. 26d e 25c, na iminência da coalescência a bolha inferior pressiona tanto a bolha superior que o seu formato é uma semi esfera bem achatada, como este trabalho é 2D tem-se uma semicircunferência, de forma que a tensão interfacial nesse caso é bem pequena, o que pode levar ao estouro da bolha. Porém, pelas Figs. 25e e 26f nota-se que elas fundiram-se e formaram uma bolha isolada que continua a flotar na cavidade.

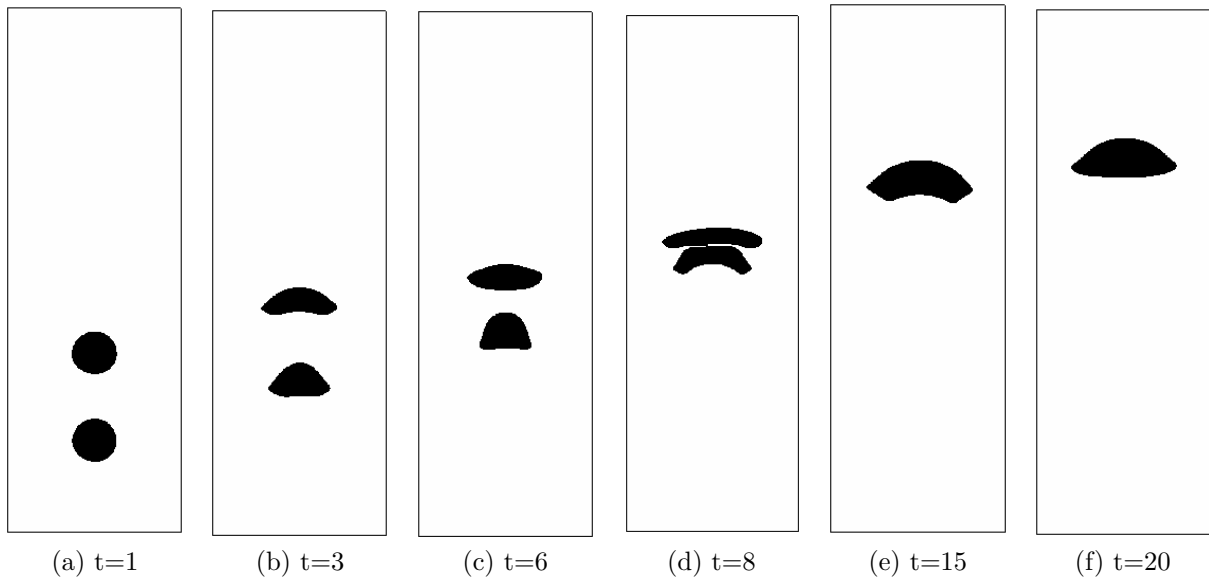


Figura 25 – Coalescência coaxial de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 25$, $Bo = 1.25$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$.

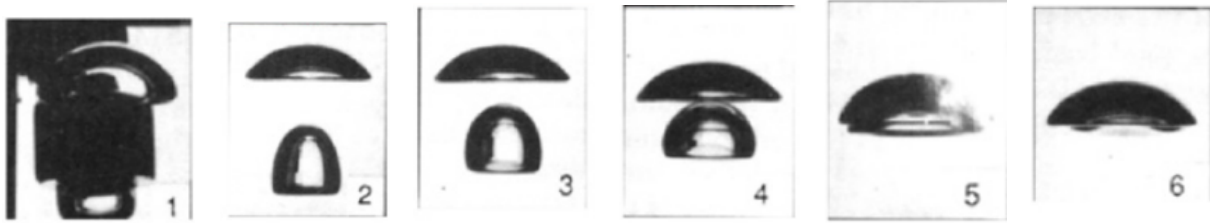


Figura 26 – Análise experimental da coalescência coaxial de duas bolhas, retirado de Breton e Korotney (1991).

Dado que a simulação coaxial está de acordo com o caso experimental feito por Breton e Korotney (1991), fez-se a simulação para casos de número de Reynolds mais altos. Com isso, comparando as Figs. 27 e 28, percebe-se a nítida influência do número de Reynolds na ocorrência da coalescência e da quebra da bolha. Nas Figs. 27b e 28b, a interação entre as bolhas ainda não é expressiva, porém, a curvatura começa a inverter-se de forma mais rápida no caso de $Re = 200$. Nas Figs. 27c e 28c o fluxo líquido gerado pelas bolhas superiores já influenciam as bolhas que estão à jusante. Ao passo que com o avanço do tempo a esteira imposta na bolha seguinte a impede de se aproximar da bolha superior, impossibilitando a coalescência e induzindo a quebra. Note que na Fig. 27f, a qual possui $Re = 50$ a bolha inferior rompe-se em duas, já que as superfícies tendem a buscar um estado mais estável de configuração, de forma que a pressão interna seja distribuída homogeneamente. Por outro lado, no caso que possui $Re = 200$, a bolha inferior rompeu sua saia em $t = 9$, de forma que na Fig. 28f, a bolha principal inferior rompeu-se em duas, porém, de forma mais acentuada que no caso de menor Reynolds. Logo, tem-se que o equilíbrio entre coalescência e rompimento depende principalmente de Re , e também pela distância entre elas, já que com uma distância de separação menor entre as bolhas, a interação torna-se mais forte, como apresentado por Suckale et al. (2010).

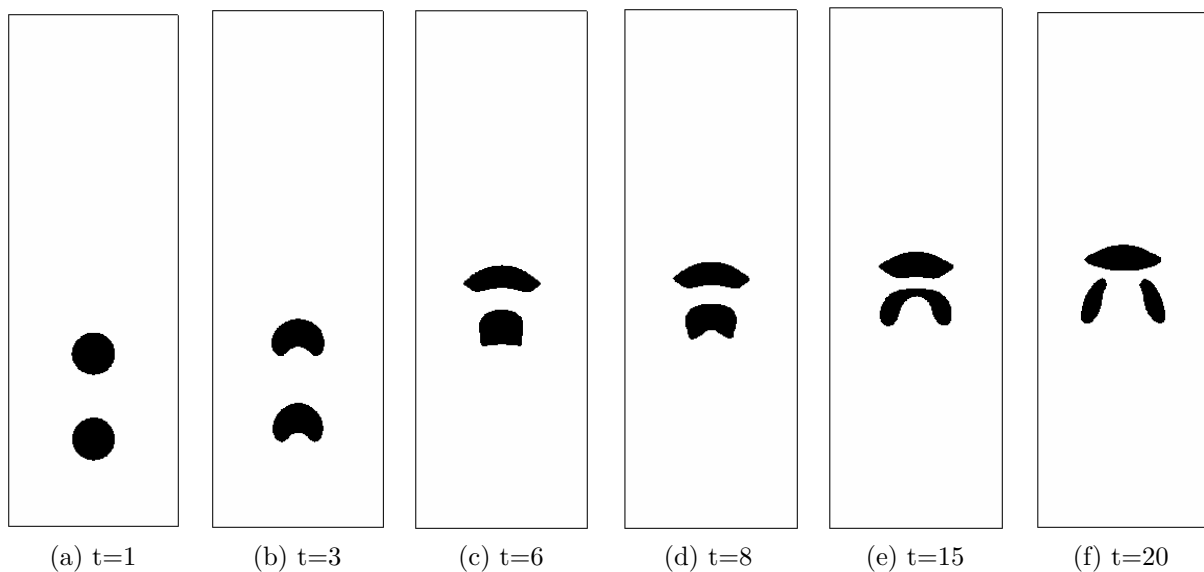


Figura 27 – Coalescência coaxial de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 50$, $Bo = 2.5$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$.

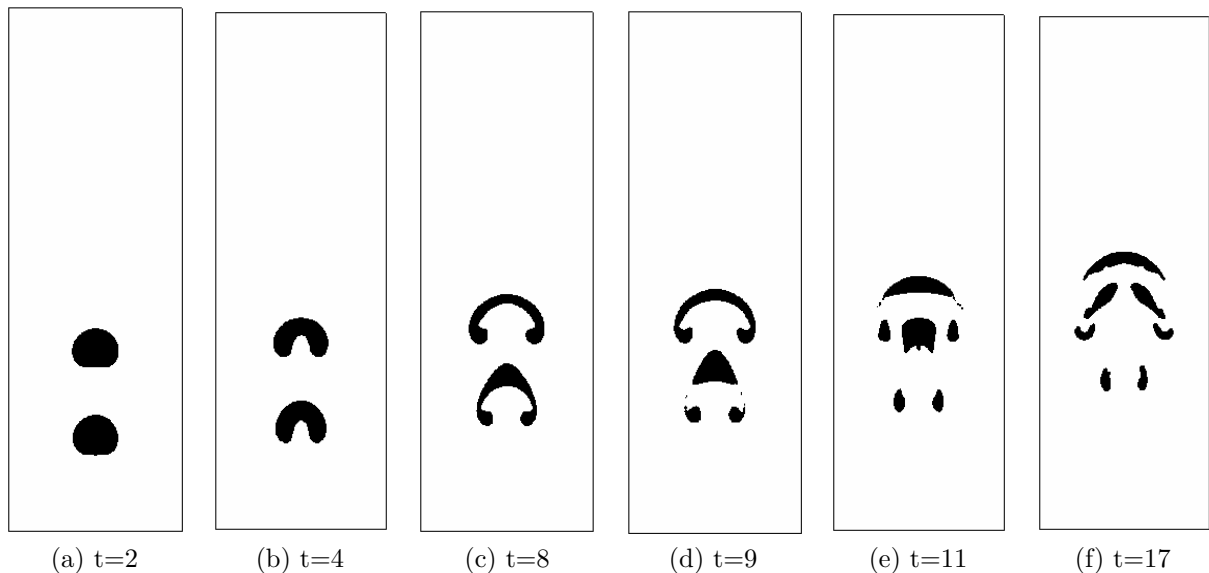


Figura 28 – Coalescência coaxial de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 200$, $Bo = 10$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$.

No caso da coalescência oblíqua, as condições de contorno são as mesmas do caso coaxial, sendo que a bolha inferior é deslocada horizontalmente em uma unidade. No início do escoamento as duas bolhas já começam a interagir, pelas Figs. 29b e 30b. Ao passo que em $t = 10$ a bolha inferior é imersa na esteira formada pela bolha de cima, o que resulta em uma deformação de estiramento na direção vertical, como pode-se ver na Fig. 30d. Nas Figs. 29e e 30e as bolhas estão na iminência da coalescência, é possível notar que a bolha superior atinge o estado mais achatado, apesar do resultado obtido nesta simulação não estar em perfeito acordo com o experimental, verifica-se que o mesmo ocorre no caso experimental feito por Brereton e Korotney (1991). Em seguida, depois da coalescência, o resultado é de uma bolha isolada que flota até a parede superior com um formato de chapéu, o que é notado, também, na Fig. 30f.

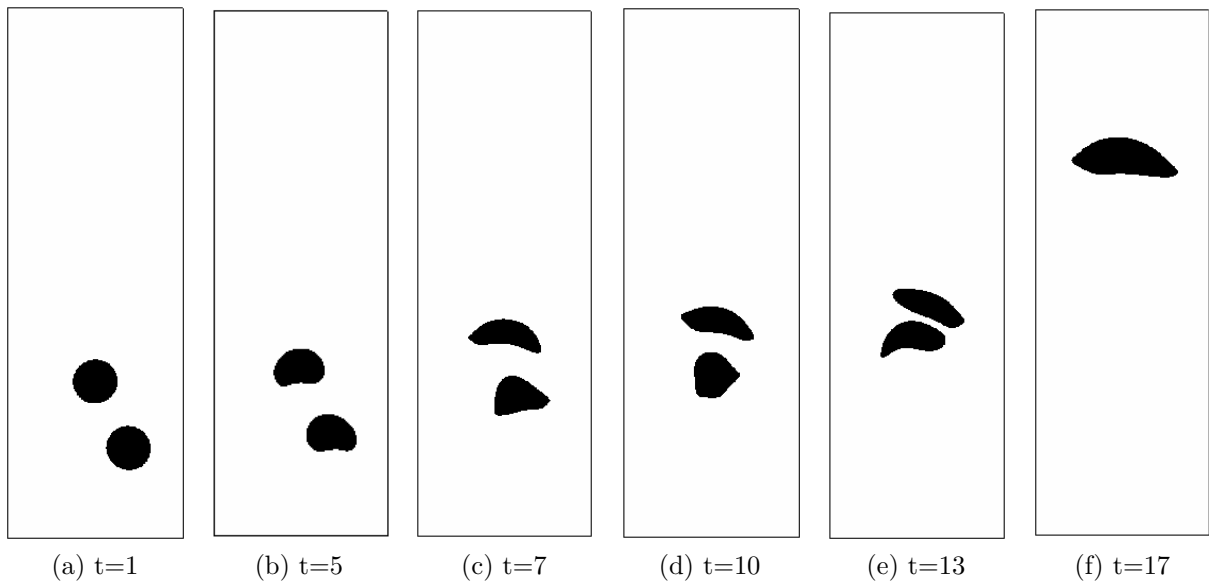


Figura 29 – Coalescência oblíqua de duas bolhas, com $\rho = 0.001$, $\lambda = 0.01$, $Re = 25$, $Bo = 1.25$ e $We = 1.25 \times 10^{-3}$.

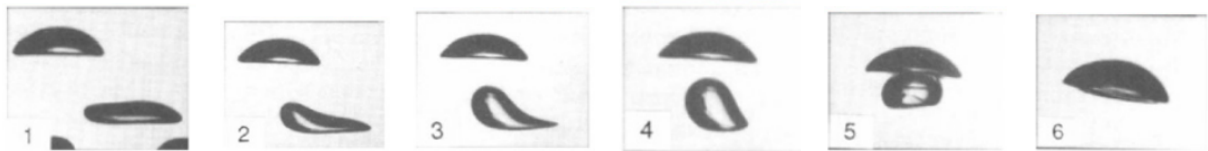


Figura 30 – Análise experimental da coalescência oblíqua de duas bolhas, retirado de Brereton e Korotney (1991).

5 Considerações Finais

5.1 Conclusão

Neste trabalho foi apresentado a simulação de gotas e bolhas cujo movimento é causado por uma razão de massa específica numa cavidade com paredes paradas, verificou-se os fenômenos de flotação, sedimentação e coalescência. Todavia, inicialmente foi simulado o caso de um escoamento monofásico na cavidade, usando o método de projeção para solução das equações de movimento. Com isso, os perfis de velocidade foram similares aos do autor Ghia, Ghia e Shin (1982). Em seguida, foi analisado o escoamento bifásico com cisalhamento simples, no qual, além do método de projeção foi utilizada a abordagem do método de *Level Set* para computar a interface no escoamento e o salto de tensões. Nesse caso, foi determinada a inclinação e a deformação da gota, comparando-os com a literatura, depois, fez-se uma comparação por imagem, variando o número de capilaridade, os resultados foram similares aos da literatura.

Na simulação de uma bolha imersa em água em movimento ascendente, a curvatura da parte inferior foi invertida, devido ao fluxo líquido oposto ao seu movimento, como era esperado. Na sedimentação de uma gota foi possível verificar a influência do número de Bond e Reynolds, sendo que para baixos valores de Bo a tensão interfacial é alta de forma que a gota se deforma menos e, notou-se que com o aumento do número de Reynolds há uma maior deformação da bolha visto que as forças inerciais são maiores que as forças viscosas do escoamento o que contribui para a sedimentação da gota.

Por fim, para o caso de coalescência verificou-se a influência de uma bolha em relação à outra, que não importa quão próximas elas estejam, a diferença de pressão causada pela bolha superior, no caso coaxial, vai influenciar a bolha inferior que vai ser sugada e acoplada na mesma, ou até rompida para o caso de alto Reynolds. O mesmo vale para a gota deslocada horizontalmente em relação à bolha superior, verificou-se que quando a bolha inferior for arrastada para a região de esteira da bolha superior a mesma acopla-se como no caso coaxial, e note que em ambos os casos, depois da coalescência, a bolha principal ascende na cavidade como uma bolha única até haver a flutuabilidade como fonte do movimento e atingir a parede superior.

5.2 Trabalhos Futuros

Tendo em vista os resultados obtidos, possíveis trabalhos futuros seria no sentido de gerar mais resultados como forma de validação, estudar o efeito da variação da viscosidade no escoamento, simular um maior número de gotas e /ou bolhas, e verificar as interações dinâmicas entre elas, ou seja, estudar a coalescência em emulsões concentradas. Determinando em qual regime existe maior probabilidade de coalescência, ou colapso das bolhas, e posteriormente, correlacionar com a taxa de *creaming* ou sedimentação do problema. Pode-se, também, verificar a influência das condições iniciais da gota na sua topologia final no escoamento.

Além disso, pode-se incluir os efeitos decorrentes da concentração de surfactante na interface. Para isso, deve-se implementar uma equação constitutiva que leva-se em conta o gradiente da tensão interfacial. Sabe-se que a adição de surfactante inibe a coalescência no sentido de que o tempo necessário para a ruptura do filme fino na interface é significativamente aumentado. Então, verificar condições para que ocorra uma separação de fases nessa condição é interessante para a indústria de petróleo, por exemplo, porque um dos problemas na extração do petróleo bruto está na mistura estável com outros líquidos que não os hidrocarbonetos, como a água salgada.

Outro tema seria a simulação de coalescência em microcanais, ou seja, em baixo Reynolds. Esse estudo é relevante para uma série de dispositivos microfluídicos sem peças móveis para aplicação em microprocessamento químico, impressão a jato de tinta e resfriamento eletrônico. Logo, é interessante investigar o tamanho da gota, avaliar a influência da distribuição de surfactantes recobertos na interface para determinar estratégias eficientes que induzam a coalescência de gotas em microcanais. Nessa linha, pode-se também simular o movimento e a coalescência de bolhas de ar em um microcanal com fluido condutor sob um campo elétrico uniforme. Para isso, é acoplada à equação de movimento o termo da força de Lorentz que pode ser resolvida de forma simples usando o método de projeção e o método de *Level Set*. Com isso, analisa-se as distribuições do campo elétrico, a deformação e a velocidade de movimento da bolha.

Referências

- ABICALIL, V. G. e. et al. On the magnetization of dilute ferrofluid emulsions in shear flows. *Physics of Fluids*, AIP Publishing LLC, v. 33, n. 5, p. 053313, 2021.
- BAHBAH, C. et al. Conservative and adaptive level-set method for the simulation of two-fluid flows. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 191, p. 104223, 2019.
- BRERETON, G.; KOROTNEY, D. Coaxial and oblique coalescence of two rising bubbles. *Dynamics of bubbles and vortices near a free surface*, v. 119, p. 50–73, 1991.
- CHANAMAI, R.; MCCLEMENTS, D. J. Dependence of creaming and rheology of monodisperse oil-in-water emulsions on droplet size and concentration. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Elsevier, v. 172, n. 1-3, p. 79–86, 2000.
- CHANDRASEKHARAI, D.; DEBNATH, L. *Continuum mechanics*. [S.l.]: Elsevier, 2014.
- CHEN, L. et al. The development of a bubble rising in a viscous liquid. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 387, p. 61–96, 1999.
- CHORIN, A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 2, n. 1, p. 12–26, 1967.
- DAVIES, R. M.; TAYLOR, G. I. The mechanics of large bubbles rising through extended liquids and through liquids in tubes. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 200, n. 1062, p. 375–390, 1950.
- DZIUBEK, A. Equations for two-phase flows: a primer. *Meccanica*, Springer, v. 47, n. 8, p. 1819–1836, 2012.
- GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 48, n. 3, p. 387–411, 1982.
- GLASSE, B. et al. Turbidimetry for the stability evaluation of emulsions used in machining industry. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Wiley Online Library, v. 92, n. 2, p. 324–329, 2014.
- GRAVE, M.; CAMATA, J. J.; COUTINHO, A. L. A new convected level-set method for gas bubble dynamics. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 209, p. 104667, 2020.
- GUIDO, S. Shear-induced droplet deformation: Effects of confined geometry and viscoelasticity. *Current Opinion in Colloid & Interface science*, Elsevier, v. 16, n. 1, p. 61–70, 2011.

- GUNNING, P. A. et al. Stability of oil-in-water emulsions. the effect of dispersed phase and polysaccharide on creaming. *Colloids and Surfaces*, Elsevier, v. 20, n. 1-2, p. 65–80, 1986.
- HIRSCH, C. *Numerical computation of internal and external flows: The fundamentals of computational fluid dynamics*. [S.l.]: Elsevier, 2007.
- HOFFMAN, J. D.; FRANKEL, S. *Numerical methods for engineers and scientists*. [S.l.]: CRC press, 2018.
- IOANNOU, N.; LIU, H.; ZHANG, Y. Droplet dynamics in confinement. *Journal of Computational Science*, Elsevier, v. 17, p. 463–474, 2016.
- JAENSSON, N. O.; ANDERSON, P. D.; VERMANT, J. Computational interfacial rheology. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Elsevier, p. 104507, 2021.
- JEELANI, S.; HOSIG, R.; WINDHAB, E. J. Kinetics of low reynolds number creaming and coalescence in droplet dispersions. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 51, n. 1, p. 149–161, 2005.
- KENNEDY, M. R.; POZRIKIDIS, C.; SKALAK, R. Motion and deformation of liquid drops, and the rheology of dilute emulsions in simple shear flow. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 23, n. 2, p. 251–278, 1994.
- KRUISBRINK, A. C. et al. An sph multi-fluid model based on quasi buoyancy for interface stabilization up to high density ratios and realistic wave speed ratios. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 87, n. 10, p. 487–507, 2018.
- KUNDU, P. K.; COHEN, I. M. *Fluid mechanics*. [S.l.]: Elsevier, 2001.
- KWAK, S.; POZRIKIDIS, C. Adaptive triangulation of evolving, closed, or open surfaces by the advancing-front method. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 145, n. 1, p. 61–88, 1998.
- LOPES, A. V. B. *Dynamics of free surface flows on rotating cylinders*. [S.l.]: The University of Manchester (United Kingdom), 2018.
- MAXWORTHY, T. et al. Experiments on the rise of air bubbles in clean viscous liquids. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 321, p. 421–441, 1996.
- MIN, C. On reinitializing level set functions. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 229, n. 8, p. 2764–2772, 2010.
- NOÏK, C.; PALERMO, T.; DALMAZZONE, C. Modeling of liquid/liquid phase separation: application to petroleum emulsions. *Journal of Dispersion Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 34, n. 8, p. 1029–1042, 2013.
- NORMAN, C. E.; MIKSIS, M. J. Dynamics of a gas bubble rising in an inclined channel at finite Reynolds number. *Physics of Fluids*, American Institute of Physics, v. 17, n. 2, p. 022102, 2005.
- OHTA, M. et al. The sensitivity of drop motion due to the density and viscosity ratio. *Physics of Fluids*, American Institute of Physics, v. 22, n. 7, p. 072102, 2010.
- OSHER, S.; FEDKIW, R. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. v. 153.

- OSHER, S.; FEDKIW, R. P. Level set methods: an overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 169, n. 2, p. 463–502, 2001.
- OSHER, S.; SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 79, n. 1, p. 12–49, 1988.
- PAL, R. Evaluation of theoretical viscosity models for concentrated emulsions at low capillary numbers. *Chemical Engineering Journal*, Elsevier, v. 81, n. 1-3, p. 15–21, 2001.
- PENG, D. et al. A pde-based fast local level set method. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 155, n. 2, p. 410–438, 1999.
- PREMLATA, A.; TRIPATHI, M. K.; SAHU, K. C. Dynamics of rising bubble inside a viscosity-stratified medium. *Physics of Fluids*, AIP Publishing LLC, v. 27, n. 7, p. 072105, 2015.
- ROBINS, M. M.; WATSON, A. D.; WILDE, P. J. Emulsions—creaming and rheology. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, Elsevier, v. 7, n. 5-6, p. 419–425, 2002.
- SAAD, Y. *Iterative methods for sparse linear systems*. [S.l.]: siam, 2003. v. 82.
- SCHRAMM, L. L. *Emulsions, foams, and suspensions: fundamentals and applications*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2006.
- SHEWCHUK, J. R. et al. *An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain*. [S.l.]: Carnegie-Mellon University. Department of Computer Science, 1994.
- SHUKLA, I. et al. Film thickness distribution in gravity-driven pancake-shaped droplets rising in a hele-shaw cell. *Journal of Fluid Mechanics*, Europe PMC Funders, v. 874, p. 1021, 2019.
- SUCKALE, J. et al. It takes three to tango: 2. bubble dynamics in basaltic volcanoes and ramifications for modeling normal strombolian activity. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, Wiley Online Library, v. 115, n. B7, 2010.
- SUSSMAN, M. et al. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 27, n. 5-6, p. 663–680, 1998.
- SUSSMAN, M. et al. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1994.
- TAYLOR, G. I. The formation of emulsions in definable fields of flow. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, containing papers of a mathematical and physical character*, The Royal Society London, v. 146, n. 858, p. 501–523, 1934.
- TENENBLAT, K. *Introdução à geometria diferencial*. [S.l.]: Editora Blucher, 2008.
- VANANROYE, A. et al. Microconfined equiviscous droplet deformation: Comparison of experimental and numerical results. *Physics of Fluids*, American Institute of Physics, v. 20, n. 1, p. 013101, 2008.
- WU, F. et al. Investigation of the stability in pickering emulsions preparation with commercial cosmetic ingredients. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Elsevier, v. 602, p. 125082, 2020.

XU, J.-J. et al. A level-set method for interfacial flows with surfactant. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 212, n. 2, p. 590–616, 2006.

YU, C. et al. An improved interface preserving level set method for simulating three dimensional rising bubble. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 103, p. 753–772, 2016.

ZHANG, A. et al. Three-dimensional numerical simulation of bubble rising in viscous liquids: A conservative phase-field lattice-boltzmann study. *Physics of Fluids*, AIP Publishing LLC, v. 31, n. 6, p. 063106, 2019.

ZHU, L.; GALLAIRE, F. A pancake droplet translating in a Hele-Shaw cell: lubrication film and flow field. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 798, p. 955–969, 2016.