

Universidade de Brasília
Faculdade de Tecnologia
Departamento de Engenharia Mecânica

**Implementação de uma formulação não singular do
Método Integral de Contorno aplicado ao
escoamento de gotas**

Por,
Ivan Rosa de Siqueira

Brasília
Julho de 2014

Ivan Rosa de Siqueira

Implementação de uma formulação não singular do Método Integral de Contorno aplicado ao escoamento de gotas

Trabalho submetido ao Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Brasília como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Universidade de Brasília
Faculdade de Tecnologia

Orientador: Prof. Taygoara Felamingo de Oliveira, Dr.

Brasília
Julho de 2014

Ivan Rosa de Siqueira

Implementação de uma formulação não singular do Método Integral de Contorno aplicado ao escoamento de gotas. Ivan Rosa de Siqueira. – Brasília, Julho de 2014.

83 p. : il.; 30 cm.

Orientador: Prof. Taygoara Felamingo de Oliveira, Dr.

Projeto de Graduação – Universidade de Brasília
Faculdade de Tecnologia – Julho de 2014.

1. Gotas de emulsões diluídas. 2. Método Integral de Contorno. 3. Formulação não singular. I. Prof. Taygoara Felamingo de Oliveira, Dr. II. Universidade de Brasília. III. Faculdade de Tecnologia. IV. Implementação de uma formulação não singular do Método Integral de Contorno aplicado ao escoamento de gotas.

CDU 02:141:005.6

Ivan Rosa de Siqueira

Implementação de uma formulação não singular do Método Integral de Contorno aplicado ao escoamento de gotas

Trabalho submetido ao Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Brasília como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Banca Examinadora

Prof. Taygoara Felamingo de Oliveira,
Dr.
Orientador

Prof. Mário Benjamim Baptista de
Siqueira, PhD.
Examinador 1

Prof. Éder Lima de Albuquerque,
PhD.
Examinador 2

Brasília, 02 de julho de 2014.

As mulheres da minha vida: minha mãe, Cida, pelo exemplo de mulher que é, pela vida que me concedeu, pelo amor incondicional que sempre cultivou, e até pelas broncas sem razão, e minha irmã, Carol, que simplesmente é a melhor parte de mim.

Agradecimentos

Ao pai que a universidade me deu, Tato, por todo investimento feito em mim, não apenas na área de Mecânica dos Fluidos e para realização deste trabalho, mas, principalmente, para minha formação pessoal e profissional durante esses 5 anos de parceria. Não há palavras que descrevam minha admiração e gratidão por você, meu amigo. Que um dia eu me torne metade do professor que você é. E que até lá você pague as doses de uísque que me deve.

Ao meu pai, Zero, pelo apoio que só um pai pode dar em situações que só um pai pode entender. Pelas alegrias e sofrimentos divididos junto ao Botafogo, pelos históricos shows de rock'n'roll que vimos juntos e pelas horas que passamos distraídos sentados com as cartas nas mãos.

A minha avó Berenice, pelos cuidados e conselhos de todo o sempre. Ao maior homem que tive o prazer de conhecer, meu avô Helbert, pelo exemplo de conduta, em todos os aspectos e situações, que pude acompanhar desde que me lembro. E aos meus tios Luciana e Júnior, pelas boas histórias e gargalhadas, pelas memoráveis viagens e pelo amor e carinho que permitiram que eu nunca abdicasse da condição de filho.

Aos irmãos que a vida me deu o prazer de escolher – Cabeça, Deco, Gio e Gui –, pela grande amizade e companheirismo, e pelas horas de conversa fiada e muita fumaça que desfrutamos juntos ao longo do período da minha graduação.

Ao estimado amigo e grande companheiro de trabalho, Rodriguinho, por todas as boas conversas e discussões, que iam desde o jogo do Botafogo do último final de semana até o tema de Mecânica dos Fluidos em que gostaríamos de trabalhar durante nosso futuro mestrado na PUC-Rio. Que nossa parceria acadêmica perdure por muitos e muitos anos, meu amigo.

Aos queridos colegas sempre presentes durante minha graduação: Arthur, Hugo, Júlia, Raphael e Ricardo, pela parceria sempre fiel e pelas valiosas contribuições durante todos esses anos em que estivemos estudando juntos no ENM; Alan, Cayo, Dudu, Fred, Juninho, Luiz e Willton, pela amizade, que permanece viva, desde os meus tempos de FGA.

Aos professores Adson Rocha, André Penna, Fábio Mendes, Glauceny Medeiros, Mendeli Vanstein, Vinícius Rispoli e Wytler Cordeiro, cujos cursos marcaram especialmente minha formação, tornando minha passagem pela Faculdade do Gama o equívoco mais acertado de minha vida.

Aos melhores *pai-trôes* do mundo – Arrais, Jesse, Manoel, Marden e Pavan –, por terem participado da minha formação básica desde a época de colégio e, principalmente, por permitirem que eu exercesse desde cedo uma das minhas maiores paixões: ministrar. E a todos os meus alunos, que, sem dúvida alguma, contribuíram muito para minha formação acadêmica.

Aos demais professores e funcionários da Universidade de Brasília, pelas aulas e serviços prestados, viabilizando minha formação e a realização deste trabalho.

Resumo

Este trabalho trata do escoamento na escala das gotas de emulsões diluídas. Nessa situação, o escoamento pode ser considerado livre dos efeitos de inércia, e as equações governantes são as equações de Stokes. O Método Integral de Contorno é aplicado às equações de Stokes e utilizado para determinar o campo de velocidade sobre a superfície da gota. Esse procedimento é descrito em detalhes, tanto do ponto de vista teórico quanto de sua implementação numérica. Todavia, o método baseia-se em integrais de superfície que envolvem funções de Green singulares, apresentando grandes erros numéricos quando os cálculos são realizados nas proximidades do ponto de singularidade. Nesse contexto, apresenta-se uma formulação não singular para o campo de velocidade sobre a superfície de gotas de razões de viscosidades arbitrárias. Essa formulação baseia-se em integrais de linha e permanece regular mesmo quando o campo de velocidade é calculado exatamente sobre o ponto de singularidade. Além disso, a formulação não singular apresenta solução analítica para contornos formados por segmentos de reta. O procedimento de discretização da superfície da gota, o cálculo de seu vetor normal e curvatura, bem como o processo de evolução temporal e relaxação da malha também são descritos em detalhes. Teorias assintóticas de primeira ordem do número de capilaridade e da razão de viscosidades são apresentadas para prever a deformação e orientação das gotas. Como forma de validar a nova formulação, o fluxo de massa líquido através da superfície da gota é calculado numericamente considerando as duas formulações e os resultados são comparados com os resultados teóricos associados a um escoamento incompressível. Além disso, medidas de deformação da gota também são calculadas considerando as duas formulações para o campo de velocidade. Nesse caso, os resultados numéricos são comparados com as previsões teóricas e resultados experimentais disponíveis na literatura.

Palavras-chaves: Gotas de emulsões diluídas. Formulação não singular. Método Integral de Contorno.

Abstract

This work deals with the flow in the scale of the drops of diluted emulsions. In this case, the flow can be considered free of the inertia effects, and the governing equations are the Stokes' equations. The Boundary Integral Method is applied to the Stokes' equations and is used to determine the velocity field on the drop surface. The theoretical and numerical aspects of this procedure are described in details. The method is based on surface integral involving singular Green functions, presenting large numerical errors when the calculations are performed near to the point of singularity. In this context, it presents a non singular formulation for the velocity field over the surface of any viscosity ratio drops. This formulation is based on contour integrals and remains regular even when the calculations are performed exactly over the singularity point. Moreover, the non singular formulation has analytic solution for line segments contours. The procedure of discretization of the drop surface, the calculation of its normal vector and curvature, and the process of temporal evolution and relaxation of the mesh are also described in details. First-order asymptotic theories of capillary number and viscosity ratio are presented to predict the deformation and orientation of the drops. In order to validate the new formulation, the total mass flow through the surface of the drop is calculated considering both formulations and the results are compared to theoretical results associated with an incompressible flow. Furthermore, measures of the deformation of the drop are also calculated considering the two formulations for the velocity field. In this case, the numerical results are compared with theoretical predictions and experimental results available in the literature.

Key-words: Drops of diluted emulsions. Non singular formulation. Boundary Integral Method.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação para o estudo proposto	1
1.2	Contexto físico do modelo	2
1.3	Revisão bibliográfica	3
1.4	Objetivos	4
1.5	Organização do trabalho	5
2	Formulação Integral de Contorno	6
2.1	Equações de balanço	6
2.2	Teorema da Reciprocidade de Lorentz	9
2.3	Solução fundamental do escoamento de Stokes	10
2.4	Propriedades das funções de Green	13
2.5	Representação integral do escoamento de Stokes	15
2.6	Representação integral do escoamento sobre a superfície de gotas	16
2.7	Forma adimensional da representação integral	18
3	Metodologia numérica	20
3.1	Subtração de singularidades	20
3.2	Discretização espacial	22
3.3	Elementos geométricos da superfície	23
3.4	Regularização da dupla camada potencial	25
3.5	Cálculo da velocidade	28
3.6	Evolução da superfície da gota	29
4	Formulação não singular	32
4.1	Formulação não singular da simples camada potencial	34
4.2	Formulação não singular da dupla camada potencial	35
4.3	Solução analítica da formulação não singular	39
4.4	Validação da formulação não singular	41
5	Teorias de pequenas deformações	47
5.1	Equação evolutiva para a forma da gota	47
5.2	Deformação de Taylor	50
5.3	Emulsão diluída em baixos números de capilaridade	51
5.4	Emulsão diluída de altas razões de viscosidades	52

6	Resultados numéricos e discussões	55
6.1	Fluxo de massa	55
6.2	Comparação com teorias de pequenas deformações	63
6.3	Comparação com resultados experimentais	65
7	Conclusões e trabalhos futuros	68
7.1	Conclusões	68
7.2	Trabalhos futuros	71
	Referências	73
	Apêndices	76
	APÊNDICE A Propriedades das equações de Stokes	77
A.1	Força hidrodinâmica	77
A.2	Reversibilidade temporal	78
A.3	Funções harmônicas	78
A.4	Unicidade da solução	79
A.5	Teorema da mínima dissipação de energia	80
	APÊNDICE B Salto de tensões através de uma interface entre dois fluidos	82

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação esquemática para o cálculo do escoamento na superfície de uma gota isolada.	16
Figura 2 – Processo de geração da malha esférica a partir de um icosaedro regular.	22
Figura 3 – Definições geométricas para o cálculo da curvatura local e do vetor normal pelo método da integral de linha.	23
Figura 4 – Detalhes dos vetores auxiliares para o cálculo da curvatura média local pelo método da integral de linha.	24
Figura 5 – Esquema representativo de uma superfície tridimensional D e seu contorno Γ	33
Figura 6 – Detalhes da superfície cônica S que liga o contorno Γ ao pólo \mathbf{x}_0	34
Figura 7 – Projeção do contorno Γ sobre a esfera unitária centrada em $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$	36
Figura 8 – Detalhes do sistema de coordenadas esféricas utilizadas para o cálculo de I^P	38
Figura 9 – Representação do caminho de integração adequado para a utilização da formulação não singular sobre a superfície da gota.	39
Figura 10 – Esquema representativo para obtenção da solução analítica da formulação não singular das camadas potenciais simples e dupla sobre um caminho definido por um segmento de reta.	40
Figura 11 – Triângulo equilátero utilizado para validar a formulação não singular das camadas potenciais simples e dupla.	41
Figura 12 – Primeira componente de I^G como função distância do pólo \mathbf{x}_0 à superfície D . Comparação entre a solução exata da formulação regular e resultados numéricos obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à formulação singular.	42
Figura 13 – Primeira componente de I^G como função distância do pólo \mathbf{x}_0 à superfície D . Comparação entre a solução exata da formulação regular e resultados numéricos obtidos pelas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas aplicada à formulação não singular.	43
Figura 14 – Erro relativo cometido pelas soluções numéricas das formulações singular e não singular da simples camada potencial I^G	44
Figura 15 – Primeira componente de I^H como função da distância relativa do pólo à superfície. Em (a), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à formulação singular; em (b), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pelas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas aplicadas à formulação regular.	45

Figura 16	– Escalar I^P como função da distância relativa do pólo à superfície. Em (a), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à formulação singular; em (b), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pelas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas aplicadas à formulação regular.	45
Figura 17	– Erro relativo cometido pelas soluções numéricas das formulações singular e não singular para a dupla camada potencial. Em (a), para I^H ; em (b) para I^P	46
Figura 18	– Representação do escoamento na escala das gotas.	47
Figura 19	– Esquema representativo das medidas de deformação da gota. Em (a), os semi-eixos utilizados na medida de deformação de Taylor; em (b), a orientação da gota em relação ao escoamento.	50
Figura 20	– Medidas da geometria de uma gota de alta razão de viscosidades previstas pela teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 20$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$	53
Figura 21	– Fluxo de massa através da superfície da gota para campos de velocidade calculados numericamente pelas formulações singular e não singular. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 2,0$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$	56
Figura 22	– Fluxo de massa estabilizado através da superfície da gota como função do número de capilaridade do escoamento. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 2,0$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$. Detalhes do formato e orientação das gotas em escoamentos com $Ca = 0,10$ e $Ca = 0,25$	57
Figura 23	– Fluxo de massa através da superfície da gota para campos de velocidade calculados numericamente pelas formulações singular e não singular. As simulações foram realizadas para gotas discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca = 0,25$	58
Figura 24	– Fluxo de massa estabilizado através da superfície da gota como função da sua razão de viscosidades. As simulações foram realizadas para gotas discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca = 0,25$. Detalhes do formato e orientação de gotas com $\lambda = 0,50$ e $\lambda = 1,5$	59
Figura 25	– Fluxo de massa através da superfície da gota para campos de velocidade calculados numericamente pelas formulações singular e não singular. A simulação foi realizada para gotas com $\lambda = 20$ e discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca_\lambda = 10$, caracterizando um regime de pequenas deformações. Detalhes para o formato e orientação da gota após a estabilização do fluxo de massa.	60

Figura 26	–Estudo de convergência de malha a partir do fluxo de massa estável como função do inverso do número de nós da malha.	62
Figura 27	–Evolução temporal de medidas de deformação D_1 e D_2 da superfície de gota de alta razão de viscosidades em regime de pequenas deformações. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 10$ e discretizadas por malhas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca_\lambda = 9$	63
Figura 28	–Quantidades geométricas de gotas de altas razões de viscosidades em função do número de capilaridade em escoamentos cisalhantes simples. Comparação entre os resultados numéricos obtidos pela formulação singular do Método Integral de Contorno e as previsões da teoria assintótica $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$	64
Figura 29	–Evolução temporal de medida de deformação de Taylor da superfície de gotas em baixas e moderadas razões de viscosidades. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 0,50$ e $\lambda = 5$ em escoamentos com $Ca = 0,10$ e $Ca = 0,25$, respectivamente. Ambas as gotas foram discretizadas por malhas com $f = 6$	65
Figura 30	–Deformação de Taylor em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 3,6$. Comparação entre os resultados numéricos obtidos pela formulação regular do Método Integral de Contorno com o resultado experimental obtido por Torza et al. (1972).	66
Figura 31	–Deformação de Taylor em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 0,08$. Comparação entre os resultados numéricos obtidos pela formulação singular do Método Integral de Contorno com o resultado experimental obtido por Torza et al. (1972).	67

Lista de símbolos

Símbolos latinos

a	Diâmetro da gota não deformada
\mathbf{a}	Vetor arbitrário utilizado na formulação não singular do campo de velocidade
$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$	Vetores auxiliares que ligam o ponto de controle da superfície ao ponto médio do segmento entre ele e seu nó vizinho
\mathbf{A}	Tensor distorção da superfície da gota
\mathbf{b}	Vetor binormal; vetor resultante das contribuições do escoamento não perturbado e da simples camada potencial para o campo de velocidade
$\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$	Vetores auxiliares que ligam o ponto médio de cada aresta da malha ao baricentro do seu elemento adjacente
B	Menor semi-eixo da gota deformada
c	Constante associada às propriedades das funções de Green; constante utilizada nas teorias de pequenas deformações
c_λ	Constante que define a viscosidade característica do escoamento
C	Porção de contorno superficial na escala local
C_1, C_2	Constantes da teoria de pequenas deformações em baixas capilaridades
C_{r1}, C_{r2}	Constantes do processo de relaxação
\mathcal{D}	Momento (dipolo) gerado pela partícula sobre o fluido
D	Coefficiente de difusão ordinário; superfície utilizada na representação não singular
\mathcal{D}	Tensor de inércia da gota
D_1, D_2	Medidas de deformação da gota associadas ao tensor de distorção
D_T	Deformação de Taylor
e	Elemento da malha; alongação normal da superfície
$\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$	Vetores da base canônica

\mathbf{E}	Tensor taxa de deformação
f	Parâmetro de controle do refinamento da malha; função escalar
f	Função vetorial ou tensorial
\mathbf{f}	Força de campo por unidade de volume
\hat{f}	Função f no espaço recíproco após a transformada de Fourier
F	Intensidade de um monopolo
F_H	Força de arrasto hidrodinâmica
\mathfrak{F}	Transformada de Fourier
g	Magnitude da aceleração da gravidade
\mathbf{g}	Força de campo por unidade de volume
\mathcal{G}	Propagador do distúrbio de velocidade ou tensor de Oseen
\mathcal{H}	Triádico auxiliar utilizado na formulação não singular da dupla camada potencial
i	Unidade imaginária
\mathbf{I}	Tensor identidade
I_D	Dupla camada potencial
I_S	Simplex camada potencial
I_G	Formulação integral não singular da simplex camada potencial
I^T	Formulação integral não singular da dupla camada potencial
k	Constante de Boltzmann
L	Comprimento característico da escala macroscópica; maior semi-eixo da gota deformada
\mathbf{L}	Operador que define uma aplicação linear sobre o campo de velocidade
L^A	Operador adjunto de uma aplicação linear
L'	Operador linear após a subtração dos autovalores espúrios do espectro de solução
n	Pontos da fórmula de quadratura para integração numérica

\mathbf{n}	Vetor normal unitário exterior à superfície da gota
\mathbf{n}'	Vetor normal unitário exterior à superfície do espaço livre
N_{Δ}	Refinamento da Regra do Trapézio
N_{Δ}	Número de elementos da malha
N_{\bullet}	Número de nós da malha
N_{ℓ}	Número de arestas da malha
p	Pressão mecânica
\hat{p}	Pressão mecânica no espaço de Fourier
p_c	Pressão característica
P	Pressão modificada
\mathcal{P}	Propagador do distúrbio de pressão
Q	Momento (quadrupolo) gerado pela partícula sobre o fluido
\mathbf{r}	Vetor deslocamento relativo,
r	Magnitude do vetor deslocamento relativo
S	Porção de superfície na escala local
S^e	Área do elemento e
S_i^{viz}	Somatório das áreas dos elementos vizinhos ao i -ésimo nó
S_x	Superfície que contém o ponto de controle
S^{∞}	Superfície do espaço livre
\mathbf{t}	Vetor tangente unitário
T	Temperatura absoluta
\mathcal{T}	Propagador do distúrbio de tensão
u	Magnitude do vetor velocidade
\mathbf{u}	Vetor velocidade Euleriano
\mathbf{u}^d	Distúrbio de velocidade provocado pela presença da gota
$\hat{\mathbf{u}}$	Vetor velocidade no espaço de Fourier

\mathbf{u}^∞	Vetor velocidade do escoamento não perturbado
\mathbf{U}	Velocidade de translação de uma partícula
U_a	Velocidade característica na escala da gota
\mathbf{V}	Velocidade de translação arbitrária da gota
\mathbf{v}	Autovetor associado ao autovalor de um tensor
V	Porção de volume da escala local
V^∞	Volume do espaço livre
\mathbf{w}	Vetor velocidade obtido após a subtração dos autovalores espúrios do espectro de solução
\mathbf{W}	Tensor vorticidade
\mathbf{x}	Vetor posição em relação ao sistema de coordenadas de referência
\mathbf{x}_b	Baricentro de um elemento triangular da malha
\mathbf{x}_c	Ponto de controle sobre a superfície da gota; centro geométrico de um elemento da malha
\mathbf{x}_0	Ponto de singularidade sobre a superfície da gota
\mathbf{y}	Ponto sobre o contorno da superfície de integração na formulação não singular da simples camada potencial
\mathbf{z}	Ponto sobre o contorno da superfície de integração na formulação não singular da dupla camada potencial

Símbolos gregos

α	Autovalor de um tensor
β	Constante definida em função da razão de viscosidades da gota e do fluido ambiente
$\dot{\gamma}_c$	Taxa de deformação característica
Γ	Contorno de uma superfície utilizado na formulação não singular
δ_{ij}	Operador Delta de Kronecker
$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$	Função Delta de Dirac

Δ_D	Desvio entre as medidas de deformação calculadas com passos de tempo distintos
$\Delta \mathbf{f}$	Salto de tensões
Δt	Passo de tempo da evolução física
Δt_r	Passo de tempo de relaxação
Δ_u	Tolerância para resolução do sistema linear associado ao cálculo do vetor velocidade
Δ_w	Tolerância para resolução do sistema linear associado ao cálculo do vetor velocidade sem os autovalores espúrios
$\Delta \rho$	Diferença de massas específicas
ϵ	Parâmetro assintótico utilizado nas teorias de pequenas deformações
ϵ_r	Tolerância do processo de relaxação
ϵ_u	Desvio entre duas soluções consecutivas do sistema linear associado ao cálculo do vetor velocidade
ϵ_w	Desvio entre duas soluções consecutivas do sistema linear associado ao cálculo do vetor velocidade sem os autovalores espúrios
$\bar{\kappa}$	Curvatura média local
λ	Razão entre as viscosidades das fases dispersa e contínua
μ	Viscosidade dinâmica molecular da fase contínua
μ_c	Viscosidade dinâmica característica
ν	Viscosidade cinemática molecular da fase contínua
θ	Orientação da gota em relação ao escoamento não perturbado
ξ	Vetor vorticidade
Π	Velocidade tangencial utilizada na relaxação
ρ	Massa específica do fluido ambiente
σ	Coefficiente de tensão superficial
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor de tensões
Σ^d	Parte deviatória do tensor de tensões

τ_d	Tempo característico de deformação da gota
τ_σ	Tempo característico de relaxação da gota
τ_ω	Tempo característico de rotação da gota
τ_∞	Tempo característico do escoamento não perturbado
Φ	Taxa local de dissipação de quantidade de movimento em energia interna
Φ_V	Taxa global de dissipação de quantidade de movimento em energia interna
χ	Potencial escalar associado ao campo gravitacional
ψ	Constante associada à magnitude da velocidade de relaxação
Ψ	Fluxo de massa através da superfície da gota
Ψ_p	Fluxo de massa em regime permanente
ω_c	Frequência característica do escoamento
Ω	Velocidade de rotação arbitrária da gota

Grupos adimensionais

Ca	Número de capilaridade
Ca_λ	Número de capilaridade definido em função da viscosidade da gota
De	Número de Deborah
Fr	Número de Froude
Pe	Número de Peclet
Re	Número de Reynolds
Re_a	Número de Reynolds na escala da gota
Re_L	Número de Reynolds na escala macroscópica
Re_g	Número de Reynolds interno à gota
Sh	Número de Strouhal

Many that live deserve death, and some that die deserve life. Can you give it to them, Frodo?

Do not be too eager to deal out death and judgment. Even the very wise cannot see all ends.

All we have to decide is what to do with the time that is given to us.

Gandalf, the Gray - Lord of the Rings: The Fellowship of the Ring.

1 Introdução

1.1 Motivação para o estudo proposto

Uma emulsão é uma mistura bifásica de dois líquidos viscosos e imiscíveis em que um encontra-se disperso no outro na forma de gotas. Em geral, emulsões provêm de um processo de geração e ruptura de gotas em um par de fluidos, definindo, assim, uma fase dispersa e outra contínua. Em grande parte das aplicações práticas, as pequenas dimensões das gotas e sua quantidade permitem que a mistura seja tratada como um fluido contínuo equivalente, cujo comportamento mecânico médio está intrinsecamente ligado à dinâmica na escala das gotas. Ainda que ambas as fases sejam constituídas de materiais simples, como água e óleo, por exemplo, emulsões são tipicamente classificadas como fluidos não Newtonianos. De fato, o escoamento que ocorre nas vizinhanças das gotas é caracterizado por fenômenos físicos complexos, fazendo com que o fluido contínuo equivalente apresente comportamento não linear em diversos casos.

A importância do estudo de emulsões encontra fundamento na grande variedade e abrangência de suas aplicações. Informações detalhadas sobre o comportamento mecânico desse tipo de suspensão são relevantes em diversos setores das indústrias do petróleo, farmacêutica e alimentícia. Além disso, o estudo sobre a mecânica da circulação sanguínea e o desenvolvimento de técnicas de monitoramento e transporte de fármacos injetados no organismo com o uso de emulsões magnéticas são aplicações crescentes nas ciências biomédicas.

Considerando as propriedades termofísicas de fluidos típicos constituintes de emulsões e velocidades usuais em escoamentos de interesse prático, é possível desenvolver análises teóricas microestruturais para obter informações precisas sobre a deformação, orientação e distribuição das gotas no escoamento. No caso de emulsões estatisticamente homogêneas e em regimes diluídos, as interações entre gotas são efeitos de segunda ordem. Dessa forma, admite-se que as gotas de emulsões diluídas estão distantes da condição em que as partículas se tocam, sugerindo que modelos baseados em emulsões infinitamente diluídas podem ser empregados para o estudo de casos em que a concentração da fase dispersa ocorre na faixa de 20% a 30%. Inserido nesse contexto, a implementação de simulações numéricas para investigar o comportamento mecânico na escala das gotas é um tema recorrente na literatura e de grande relevância no âmbito científico. Os fenômenos físicos que ocorrem na superfície das gotas acontecem em escalas de tempo e comprimento muito pequenas, dificultando as observações experimentais. Assim, técnicas numéricas podem fornecer resultados importantes nesse tipo de estudo.

1.2 Contexto físico do modelo

Considerando que uma gota é convectada pelo escoamento, admite-se que uma escala característica de velocidade experimentada pela partícula seja dada por $U_a = \dot{\gamma}_c a$, em que $\dot{\gamma}_c$ é uma taxa de cisalhamento típica e a é o diâmetro da gota não deformada. Nessas condições, o número de Reynolds do escoamento externo à gota é definido como $Re_a = a^2 \dot{\gamma}_c / \nu$, em que ν é a viscosidade cinemática da fase contínua. Considerando uma gota de óleo com diâmetro $a = 10 \mu\text{m}$, imersa em água, e supondo que $\dot{\gamma}_c \approx 1 \text{ s}^{-1}$, segue que $Re_a \approx 10^{-4}$ (ou seja, $Re_a \ll 1$). Consequentemente, sendo λ a razão entre as viscosidades da fase dispersa e contínua, respectivamente, e sabendo que nas condições abordadas neste trabalho $\lambda = \mathcal{O}(1)$, o número de Reynolds do escoamento interno à gota, $Re_g = Re_a / \lambda$, também é muito pequeno. Portanto, de maneira geral, tanto para o escoamento interno quanto para o externo à gota, o número de Reynolds é muito menor que a unidade. Dessa maneira, ambos os escoamentos podem ser considerados livres de efeitos de inércia (Happel & Brenner, 1991).

Por outro lado, caso consideremos processos difusivos em nível molecular, temos que o número de Peclet é dado por $Pe = a^2 \dot{\gamma}_c / D$, em que $D = kT / (6\pi\mu a)$ é o coeficiente de difusão de Stokes-Einstein, sendo k a constante de Boltzmann, T , a temperatura absoluta, e μ , a viscosidade dinâmica do fluido ambiente. O número de Peclet pode ser interpretado como a razão entre um tempo característico do processo difusivo associado ao movimento Browniano e um tempo característico da escala convectiva (Einstein, 1956). Dessa maneira, adotando as mesmas hipóteses descritas anteriormente, e supondo $T = 300 \text{ K}$, estima-se que $Pe = 4 \times 10^3$. Dessa forma, na escala das gotas, o tempo necessário para se observar a influência da difusão molecular é muito maior que o relacionado ao transporte convectivo pelo campo de velocidade. Assim, os efeitos do movimento Browniano não são relevantes para hidrodinâmica do escoamento.

A condição de escoamentos em baixos números de Reynolds leva a equações do movimento lineares, caracterizando um balanço entre o campo de pressão e as tensões de origem viscosa. Além de permitir a aplicação de métodos analíticos típicos para solução de equações diferenciais parciais, a linearidade das equações governantes na escala das gotas garante a validade do princípio da invariância material (Truesdell & Noll, 1965), possibilitando a descrição da emulsão como um fluido homogêneo equivalente, dispensando, assim, a descrição de dois fluidos, tipicamente utilizada em modelagens de escoamentos multifásicos. Ainda vale ressaltar que o fato de $Re_a \ll 1$ na escala das gotas não implica necessariamente que o número de Reynolds do escoamento baseado em uma escala macroscópica também seja pequeno. Para escalas típicas do problema macroscópico tem-se $Re_L = Re_a (L/a)$, em que L é um comprimento característico da escala externa, podendo ser considerado um parâmetro arbitrário nesse estudo.

1.3 Revisão bibliográfica

Estratégias numéricas para o estudo de emulsões são disponíveis em um número considerável de artigos na área. Grande parte deles utiliza a formulação integral do Método Integral de Contorno para escoamentos de Stokes, descrita por Ladyzheskaya (1969). Uma grande vantagem da formulação baseada em integrais de contorno quando comparada à outros métodos, tais como o Método das Diferenças Finitas e o Método dos Elementos Finitos, por exemplo, consiste em realizar integrações apenas nas interfaces ou superfícies de gotas. Contudo, a maior vantagem dessa formulação consiste em transformar o problema tridimensional do escoamento ao redor de uma gota em um problema de superfície em apenas duas dimensões, reduzindo o esforço computacional necessário. Uma implementação pioneira foi realizada por Youngren & Acrivos (1975) para avaliar o escoamento em torno de uma partícula rígida de forma arbitrária. Rallison & Acrivos (1978) utilizaram a mesma metodologia para estudar a deformação e as condições de ruptura de uma gota em escoamentos cisalhantes, comparando os resultados obtidos com o trabalho teórico de Barthès-Biesel & Acrivos (1973). Além disso, Pozrikidis (1993) também estudou emulsões tridimensionais considerando gotas deformáveis sujeitas a escoamentos cisalhantes, enquanto Loewenberg & Hinch (1997) avaliaram a interação entre duas gotas. Finalmente, vale destacar que a formulação baseada em integrais de contorno tem sido aplicada para a análise da deformação de gotas magnéticas em escoamentos cisalhantes sob ação de um campo magnético (Cunha et al., 2007).

Embora o Método Integral de Contorno reduza a dimensão do problema abordado, há uma grande dificuldade associada à sua implementação devido à singularidade das funções de Green presentes na formulação. Sendo assim, na grande maioria dos estudos realiza-se grande esforço para que o cálculo das integrais de superfície seja o mais preciso possível. Nesse contexto, as técnicas mais comuns consistem em utilizar malhas extremamente refinadas para descrever os pontos materiais sobre a superfície das gotas e/ou adotar métodos numéricos de integração de alta ordem, especialmente nas vizinhanças do ponto singular (Stone & Leal, 1989; Yon & Pozrikidis, 1999; Pozrikidis, 2001), o que compromete o ganho em tempo computacional associado à redução de dimensão do problema. Outro procedimento relevante baseia-se em realizar uma *pseudo*-subtração de singularidades, permitindo que as integrais sejam avaliadas numericamente de forma mais acurada nas vizinhanças do pólo (Loewenberg & Hinch (1996), Zinchenko et al. (1997) e Loewenberg & Hinch (1997)). Embora esses procedimentos sejam amplamente difundidos na literatura, nenhum deles fornece resultados satisfatórios quando as integrais devem ser avaliadas em regiões muito próximas do ponto de singularidade, gerando grandes instabilidades numéricas, conforme discutido por Zinchenko et al. (1997).

Recentemente, contudo, Bazhlekov et al. (2004) desenvolveram uma formulação baseada em integrais de linha (ou de contorno) equivalente à representação com integrais de superfície produzidas pelo Método Integral de Contorno. Assim, mesmo que o ponto de singularidade

esteja localizado exatamente sobre a superfície de integração, e contanto que o contorno da superfície não o contenha, essa formulação permanece não singular, produzindo resultados numéricos mais precisos e estáveis. Os autores ainda desenvolveram expressões analíticas para o cálculo das integrais de linha, obtendo resultados exatos e dispensando a utilização de técnicas numéricas para sua solução. Dessa forma, e utilizando malhas adaptativas para discretização dos pontos materiais sobre a superfície das gotas, resultados numéricos mais precisos foram obtidos no estudo do processo de formação e/ou ruptura de gotas e de interação entre gotas.

1.4 Objetivos

Inserido no contexto do estudo do comportamento mecânico de gotas de emulsões diluídas, o objetivo geral deste trabalho é implementar uma formulação não singular do Método Integral de Contorno em três dimensões para o estudo da hidrodinâmica de gotas isoladas sujeitas a escoamentos cisalhantes simples. O código será desenvolvido para simulação de gotas com qualquer razão de viscosidade.

Além disso, os objetivos específicos do presente trabalho são:

1. avaliar e comparar os resultados numéricos associados a grandezas físicas na escala das gotas. Nesse sentido, utilizaremos medidas do fluxo de massa através de sua superfície. A teoria para o desenvolvimento do problema pressupõe uma análise Lagrangeana e que o escoamento seja incompressível, de sorte que a massa da gota permaneça sempre constante. Todavia, instabilidades numéricas associadas ao cálculo da velocidade dos pontos de controle em sua superfície implicam um balanço de massa não nulo dentro de seu volume. Assim, o fluxo de massa através da superfície da gota pode ser entendido como uma medida do erro global do método utilizado para o cálculo da velocidade. Os resultados serão computados pela implementação tanto da formulação singular com integrais de superfície quanto da formulação não singular com integrais de linha do Método Integral de Contorno;
2. apresentar análises assintóticas de primeira ordem para o estudo de emulsões diluídas em regimes de pequenas deformações. Em particular, serão discutidos os casos de escoamentos em baixos números de capilaridades e de emulsões em altas razões de viscosidades, fundamentando teorias $\mathcal{O}(Ca)$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$, respectivamente. Essas teorias permitem o estudo do comportamento mecânico de gotas isoladas, sendo representativas para emulsões com até 30% de fração volumétrica de gotas;
3. avaliar medidas geométricas associadas à deformação de gotas em escoamento cisalhante simples. Nesse caso, resultados experimentais (Torza et al., 1972) e as teorias assintóticas apresentadas para pequenas deformações de gotas em regimes de alta razão de viscosidades

e baixos números de capilaridade são utilizadas para validar os resultados numéricos provenientes das simulações. Considera-se, mais uma vez, resultados obtidos pelas duas formulações do Método Integral de Contorno.

1.5 Organização do trabalho

Assim sendo, o presente trabalho é dividido em seis capítulos, cada qual contendo diversas seções. O Capítulo 1 apresenta uma introdução teórica contendo alguns dos aspectos práticos para motivação do estudo de gotas de emulsões diluídas, bem como uma contextualização física do modelo utilizado e uma breve revisão bibliográfica, atentando, principalmente, para a implementação do Método Integral de Contorno. O Capítulo 2 é destinado à derivação das equações básicas do problema proposto, apresentando suas equações governantes – as equações de Stokes – e algumas de suas principais propriedades. Mostra-se ainda a solução fundamental das equações de Stokes, destacando sua formulação integral adimensionalizada. O Capítulo 3, então, trata da metodologia numérica para a simulação de escoamentos na escala das gotas. Suas seções descrevem o procedimento de discretização espacial e geométrica da superfície da gota, bem como aspectos computacionais envolvidos nas simulações, tais como a subtração de singularidades, o processo de relaxação da malha e a regularização da dupla camada potencial. O Capítulo 4, por sua vez, apresenta os detalhes do desenvolvimento da formulação não singular baseada em integrais de linha. Testes numéricos com a finalidade de comparar as duas formulações também são apresentados e discutidos. O Capítulo 5 contém os resultados numéricos associados aos objetivos do trabalho, comparando as formulações singular e não singular do Método Integral de Contorno para o escoamento na superfície de gotas isoladas. Finalmente, o trabalho ainda conta com sessões de conclusões e perspectivas para trabalhos futuros, ambas descritas no Capítulo 6, o qual é seguido das referências utilizadas.

2 Formulação Integral de Contorno

Nas situações em que a inércia do escoamento é desprezível verifica-se um balanço entre as tensões viscosas e o gradiente de pressão. Sem o termo associado à taxa de variação do momento linear e considerando fluidos Newtonianos, as equações governantes são lineares, de sorte que uma ampla frente de estudos envolvendo técnicas analíticas, experimentais e numéricas pode ser explorada. Tendo em vista sua relevância para este trabalho, este capítulo considera suas derivações e algumas de suas principais propriedades.

2.1 Equações de balanço

Sejam as equações de conservação de massa e quantidade de movimento linear para um meio contínuo, dadas, respectivamente, por (Batchelor, 1967)

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

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.2)$$

em que ρ é a massa específica, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ é o vetor velocidade Euleriano, $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões e \mathbf{g} denota uma força de campo por unidade de massa. O operador derivada material é definido por $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ e mede a taxa de variação temporal de uma quantidade qualquer do escoamento calculada a partir de um referencial que translada com uma partícula material. O divergente do tensor de tensões, $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$, representa a taxa de variação da quantidade de movimento por unidade de volume associada com forças de superfície exercidas em um elemento de fluido. Em geral, o tensor de tensões pode ser decomposto em uma parte isotrópica (ou esférica¹) e uma parte deviatórica², de maneira que podemos escrever

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\Sigma}^d, \quad (2.3)$$

em que p é a pressão mecânica, determinada por $p = \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\sigma})$ e \mathbf{I} é o tensor identidade. Para um fluido Newtoniano compressível, temos que (Aris, 1962)

$$\boldsymbol{\Sigma}^d = 2\mu \left(\mathbf{E} - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \right), \quad (2.4)$$

¹ Um tensor esférico é todo aquele que pode ser descrito de forma mais geral como $c(\mathbf{x}, t)\mathbf{I}$, em que $c(\mathbf{x}, t)$ é um campo escalar.

² Tensor deviatórico é um tensor de traço nulo, podendo ser escrito como $\mathbf{T}^{(d)} = \mathbf{T} - \frac{1}{3}tr(\mathbf{T})\mathbf{I}$.

em que μ é a viscosidade dinâmica do fluido e \mathbf{E} é o tensor taxa de deformação, definido como a parte simétrica do tensor gradiente de velocidade, $\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)$. No caso de um fluido incompressível, a equação (2.1) é reduzida à condição de incompressibilidade, descrita por $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Assim, substituindo a equação constitutiva (2.4) e a condição de incompressibilidade na equação (2.2), obtemos

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}. \quad (2.5)$$

As equações vetoriais descritas em (2.5) são referenciadas como *equações de Navier-Stokes* e, juntamente com a equação da continuidade, constituem um sistema não linear de equações diferenciais parciais para os campos de velocidade e pressão.

Sejam, então, $U_a = \dot{\gamma}_c a$, a e $1/\omega_c$ escalas características de velocidade, comprimento e tempo, respectivamente. Levando-se em conta que uma escala de pressão adequada para escoamentos com inércia desprezível é $p_c = \mu U_a/a$, a equação (2.5) é adimensionalizada, sendo reescrita como (Pozrikidis, 1992)

$$Re Sh \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial \tilde{t}} + Re \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}} = -\tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{u}} + \frac{Re}{Fr} \tilde{\mathbf{g}}, \quad (2.6)$$

em que

$$\tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{a}, \quad \tilde{t} = \omega_c t, \quad \tilde{\nabla} = a \nabla, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{U_a}, \quad \tilde{p} = \frac{p}{p_c}, \quad \tilde{\mathbf{g}} = \frac{\mathbf{g}}{\|\mathbf{g}\|}, \quad (2.7)$$

$Sh = a\omega_c/U_a$ é o número de Strouhal e $Fr = U_a^2/(\|\mathbf{g}\|a)$ é o número de Froude. O número de Reynolds, dado por $Re = \rho U_a/\mu$, expressa a magnitude das forças de inércia em relação às forças viscosas ou, de forma equivalente, a razão entre um tempo característico de difusão de vorticidade, a^2/ν , e um tempo característico da escala convectiva, a/U_a . O número de Strouhal é relevante se o padrão de escoamento for oscilatório, expressando uma frequência adimensional característica da condição de contorno de entrada. Caso não exista uma frequência de excitação externa imposta ao escoamento, adota-se $\omega_c = U_a/a$ e $Sh = 1$. O número de Froude é um parâmetro importante em escoamentos com superfície livre, expressando a razão entre as magnitudes das forças de inércia e de campo. Dessa forma, o grupo Re/Fr representa a relação entre forças de campo e forças viscosas.

Sendo assim, consideremos a situação em que $Re \ll 1$ e $Re Sh \ll 1$, de maneira que os termos do lado esquerdo da equação (2.6) possam ser desprezados. Esse caso é o *limite dual* das equações do movimento e caracteriza o escoamento como *quasi-estacionário*. Dessa forma, o tempo necessário para a evolução do campo de velocidade de um estado permanente para outro é muito menor do que o tempo típico de uma mudança perceptível na configuração do contorno da gota. Isto é, o tempo característico de relaxação da gota é muito maior que o tempo característico para propagação de vorticidade ao longo do escoamento. Fisicamente, a condição de *quasi-estacionariedade* expressa que os campos de velocidade e pressão ajustam-se em intervalos muito menores do que aqueles em que a configuração do contorno muda. Desta

forma, o escoamento é sempre permanente com respeito à configuração instantânea (Cunha, 2003).

Deixando de lado a utilização do til para representar as grandezas adimensionais, temos que as equações governantes do escoamento para um fluido Newtoniano incompressível livre dos efeitos de inércia são as *equações de Stokes*, expressas na forma

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.8)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} = \mathbf{0}, \quad (2.9)$$

em que $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}$. Se considerarmos \mathbf{g} um campo conservativo (ou uma força conservativa por unidade de massa), existe um potencial escalar χ , tal que $\mathbf{g} = -\nabla\chi$. Desta forma, se ρ é constante, define-se a pressão modificada $P = p + \rho\chi$ e equação (2.9) pode ser reescrita como

$$-\nabla P + \mu\nabla^2\mathbf{u} = \mathbf{0}. \quad (2.10)$$

No caso particular em que a força de campo é devida exclusivamente à ação da gravidade, temos que $\chi = \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$; segue, então, que a pressão modificada é $P = p - \rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$, em que $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$ e g é magnitude da aceleração da gravidade local. Vale destacar que o conceito de pressão modificada só pode ser utilizado caso o fluido seja incompressível e as condições de contorno do problema sejam apenas de velocidade, tal que a força da gravidade não tenha efeito dinâmico no escoamento.

Ressalta-se ainda que em escoamentos em que existe um forçamento de alta frequência o grupo adimensional *Sh Re* que aparece na equação (2.6) pode não ser desprezível. Assim, a equação mantém seu termo transiente e a equação da conservação de quantidade de movimento é expressa pela equação de Stokes em regime transiente,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla P - \mu\nabla^2\mathbf{u} = \mathbf{0}. \quad (2.11)$$

Note que, embora o termo transiente associado à derivada temporal esteja presente, a linearidade da equação permanece.

Como consequência direta da linearidade das equações governantes, a força hidrodinâmica sobre uma partícula transladando em um fluido Newtoniano em regimes de baixos números de Reynolds depende linearmente da velocidade. Consequentemente, se o sentido da força é invertido, inverte-se também o sentido do movimento, caracterizando o escoamento de Stokes como reversível em relação ao tempo.

Além disso, é possível mostrar que em regimes de Stokes os campos de pressão e vorticidade são harmônicos, tais que $\nabla^2 P = 0$ e $\nabla^2 \boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$. Considerando as propriedades das funções harmônicas (Evans, 1998), conclui-se que não há regiões de concentração intensa de vorticidade que indiquem que esta grandeza seja um campo compacto em regiões próximas à contornos sólidos. Mostra-se ainda que a vorticidade assume valores extremos nas fronteiras de um domínio regular. Por fim, verifica-se que $\nabla^2 \nabla^2 \mathbf{u} = \nabla^4 \mathbf{u} = \mathbf{0}$, sendo possível concluir que

a velocidade é um campo biharmônico nesse tipo de regime de escoamento. Esses resultados sugerem que a solução de problemas de Stokes pode ser obtida expandindo os campos de pressão, vorticidade e velocidade em uma série de funções harmônicas sólidas (Lamb, 1932).

Por fim, partindo da taxa de dissipação de quantidade de movimento em energia interna por unidade de volume para um fluido Newtoniano incompressível, $\Phi = 2\mu \mathbf{E} : \mathbf{E}$, mostra-se a unicidade da solução das equações de Stokes. Ainda vale comentar que a solução (\mathbf{u}, p) das equações de Stokes atende ao teorema da mínima dissipação de energia. Isto é, a solução (\mathbf{u}, p) tem a menor taxa de dissipação de energia interna dentre todos os demais escoamentos que satisfazem as condições de contorno. Todas as propriedades descritas até aqui são discutidas em detalhes no Apêndice A.

2.2 Teorema da Reciprocidade de Lorentz

Considere dois escoamentos quaisquer, $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ e $(\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}')$, de um mesmo fluido em uma região V , delimitada pela superfície S . Ambos os escoamentos satisfazem as equações de Stokes, descritas pelas equações (2.8) e (2.9). O Teorema da Reciprocidade de Lorentz postula que (Happel & Brenner, 1991)

$$\int_S (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}') \cdot \mathbf{n} dS + \int_V (\mathbf{u}' \cdot \mathbf{f}) dV = \int_S (\boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS + \int_V (\mathbf{u} \cdot \mathbf{f}') dV, \quad (2.12)$$

em que \mathbf{n} é o vetor unitário normal e exterior à superfície S e $\mathbf{f} = \rho \mathbf{g}$, sendo \mathbf{g} uma força de campo por unidade de massa.

Para sua demonstração, seja um fluido Newtoniano incompressível de viscosidade dinâmica μ . Assim, para os dois escoamentos, os tensores de tensão são expressos por $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}$ e $\boldsymbol{\sigma}' = -p'\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}'$. Considerando ainda a condição de incompressibilidade do escoamento, tem-se que $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{E}' = -p\mathbf{I} : \mathbf{E}' + 2\mu\mathbf{E} : \mathbf{E}'$ e $\boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{E} = -p'\mathbf{I} : \mathbf{E} + 2\mu\mathbf{E}' : \mathbf{E}$, respectivamente. Portanto, desde que $\mathbf{I} : \mathbf{E} = \mathbf{I} : \mathbf{E}' = 0$, segue que

$$\boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{E} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{E}'. \quad (2.13)$$

Por outro lado, considerando que tanto o fluido quanto as partículas não sejam magnéticos, não existem torques internos induzidos no material por magnetização, e o tensor de tensões é simétrico. Então, sabendo que o produto interno entre um tensor simétrico e outro antissimétrico é nulo, segue que $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{E}' = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}'$ e $\boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{E} = \boldsymbol{\sigma}' : \nabla \mathbf{u}$. Por fim, usando que $\boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}' = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}') - (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{u}'$, ainda é possível escrever

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{E}' = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}') - (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{u}' \quad (2.14)$$

e

$$\boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{E} = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) - (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}') \cdot \mathbf{u}. \quad (2.15)$$

Finalmente, tendo em vista a equação (2.13) e sabendo que $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{f}$, subtrai-se (2.14) de (2.15) para mostrar que

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}' - \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{f}' \cdot \mathbf{u} - \mathbf{f} \cdot \mathbf{u}'. \quad (2.16)$$

Integrando a equação (2.16) em uma região simplesmente conexa de fluido e usando o Teorema da Divergência de Gauss, chega-se ao resultado apresentado em (2.12). Destaca-se ainda que na ausência de forças de campo, a equação (2.16) reduz-se a $\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}' - \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) = 0$.

O resultado expresso pela equação (2.16) é referenciado na literatura como *Teorema da Reciprocidade de Lorentz* ou, simplesmente, *Identidade Recíproca* (Pozrikidis, 1992; Kim & Karilla, 1991; Happel & Brenner, 1991). Esse teorema pode ser utilizado para demonstrar propriedades de simetria do escoamento de Stokes. Além disso, é fundamental na determinação da representação integral do escoamento em baixos números de Reynolds. Para este trabalho, essa representação é o ponto de partida para formulação do Método Integral de Contorno, utilizado para obter soluções numéricas do escoamento na superfície de gotas isoladas. Todavia, a característica mais relevante do Teorema da Reciprocidade de Lorentz é a possibilidade de obter informações sobre um determinado escoamento sem a necessidade de resolvê-lo explicitamente. Ao invés disso, utiliza-se dados de outro escoamento já conhecido, como, por exemplo, o escoamento gerado por um ponto de força, cuja solução é denominada *solução fundamental do escoamento de Stokes*.

2.3 Solução fundamental do escoamento de Stokes

A solução fundamental das equações de Stokes corresponde ao escoamento gerado pela presença de um ponto de força em um domínio tridimensional infinito de fluido (espaço livre), representada pelo seguinte sistema de equações (Ladyzheskaya, 1969)

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla p = \mathbf{F} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad (2.17)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.18)$$

em que \mathbf{F} é uma força concentrada (ou monopolo) aplicada sobre o fluido, \mathbf{x}_0 é a posição do ponto de força e $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ é a distribuição *Delta de Dirac* no espaço tridimensional. De maneira geral, a presença de uma partícula em um escoamento de Stokes é representada por $\mathbf{F} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathbf{D} \cdot \nabla \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathbf{Q} : \nabla \nabla \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \dots$, em que \mathbf{D} e \mathbf{Q} representam momentos (dipolo e quadrupolo, respectivamente) gerados pela partícula sobre o fluido. No contexto deste trabalho, admite-se que um ponto de força ou uma partícula produz um distúrbio de velocidade e pressão de longo alcance no fluido. Em uma região suficientemente afastada da localização \mathbf{x}_0 , os momentos de alta ordem, os quais decaem com $1/r^2$ ou mais rápido que isso, tornam-se

contribuições de segunda ordem, visto que $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| \gg 1$. Além disso, ainda vale destacar que a distribuição delta de Dirac atente às seguintes propriedades (Kreyszig, 1999)

$$(i) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dV = 1 \text{ e } (ii) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) f(\mathbf{x}) dV = f(\mathbf{x}_0). \quad (2.19)$$

A solução do problema diferencial representado pelas equações (2.17) e (2.18) pode ser determinada via transformada de Fourier tridimensional, definida segundo o par de transformadas

$$\mathfrak{F}\{f(\mathbf{x})\} = \hat{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (2.20)$$

$$\mathfrak{F}^{-1}\{\hat{f}(\mathbf{x})\} = f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}. \quad (2.21)$$

Ademais, ainda é importante apresentar algumas propriedades da transformada de Fourier, tais como

$$\mathfrak{F}\{\nabla \cdot \mathbf{a}(\mathbf{x})\} = i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}), \quad \mathbf{a}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^3, \quad (2.22)$$

$$\nabla \mathfrak{F}^{-1}\{\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k})\} = \mathfrak{F}\{i\mathbf{k} \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k})\}, \quad \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}. \quad (2.23)$$

De acordo com a equação (2.22), tem-se que $\mathfrak{F}\{\nabla^2\} = -k^2$, em que $k^2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}$. Assim, a equação da continuidade no espaço recíproco de Fourier (ou espaço de número de onda) assume a forma

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = 0. \quad (2.24)$$

Aplicando a transformada de Fourier à equação de quantidade de movimento e considerando, por ora, que o monopolo está concentrado na origem, segue que

$$\mu k^2 \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k} \hat{p}(\mathbf{k}) = -\mathbf{F} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (2.25)$$

E usando a propriedade (ii) de (2.19) com $f(\mathbf{x}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ e $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$, tem-se que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \delta(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{0}} = 1, \quad (2.26)$$

e a equação da quantidade de movimento no espaço recíproco reduz-se a

$$\mu k^2 \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k} \hat{p}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathbf{F}. \quad (2.27)$$

Multiplicando-se escalarmente a equação (2.27) por \mathbf{k} e usando a equação da continuidade, obtém-se

$$\hat{p}(\mathbf{k}) = \frac{i}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{F}}{k^2}. \quad (2.28)$$

E, finalmente, substituindo (2.28) em (2.27), mostra-se que

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}\mu k^2} \mathbf{F} \cdot \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right). \quad (2.29)$$

Os resultados expressos pelas equações (2.28) e (2.29) são expressões para os campos de pressão e velocidade, respectivamente, no espaço recíproco. Para determinar os campos correspondentes no espaço físico, usa-se a transformada inversa de Fourier e suas propriedades, como indicam as equações (2.21) e (2.23). Assim,

$$p(\mathbf{x}) = -\frac{1}{8\pi} \mathbf{F} \cdot \left(2 \frac{\mathbf{x}}{x^3} \right) \quad (2.30)$$

e

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu} \mathbf{F} \cdot \left(\frac{\mathbf{I}}{x} + \frac{\mathbf{x}\mathbf{x}}{x^3} \right). \quad (2.31)$$

Se o ponto de força não estiver na origem, então a solução fica modificada apenas por uma translação, podendo ser escrita, de forma geral, como

$$p(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = -\frac{1}{8\pi} \mathbf{F} \cdot \mathcal{P}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (2.32)$$

e

$$\mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = -\frac{1}{8\pi\mu} \mathbf{F} \cdot \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad (2.33)$$

em que

$$\mathcal{P}(\mathbf{r}) = 2 \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (2.34)$$

e

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \quad (2.35)$$

são funções de Green, $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ e $r = \sqrt{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}}$. Os campos $p(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ e $\mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ são, respectivamente, os distúrbios de pressão e velocidade produzidos por uma singularidade (monopolo) de força \mathbf{F} localizada na posição \mathbf{x}_0 . Esses campos mostram como é a interação hidrodinâmica entre partículas infinitesimais em escoamentos de Stokes. O vetor \mathcal{P} e o tensor de segunda ordem \mathcal{G} são conhecidos como propagadores dos distúrbios de pressão e velocidade, respectivamente. O tensor \mathcal{G} também é referenciado como *tensor de Oseen* (Kim & Karilla, 1991). O campo de velocidade induzido por \mathbf{F} , $\mathbf{u} = (8\pi\mu)^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathcal{G}$, é denominado *Stokeslet* (Batchelor, 1970)³.

Vale ressaltar o fato dos propagadores serem funções geométricas apenas da distância relativa ou configuração de monopolos no espaço. Além disso, os distúrbios propagam-se com decaimento lento $\mathcal{O}(1/r)$. Desta forma, mesmo partículas relativamente afastadas umas das outras interagem de forma significativa em escoamentos de Stokes. Para suspensões diluídas,

³ O termo $\mathcal{G}/(8\pi\mu)$ que aparece no campo de velocidade induzido por \mathbf{F} é muitas vezes referenciada como *tensor de Oseen-Burgers* (Kim & Karilla, 1991).

contudo, é possível aproximar as interações hidrodinâmicas entre as partículas por interações de ponto.

O tensor de tensões para esse escoamento pode ser expresso em termos das funções de Green $\mathcal{P}(\mathbf{r})$ e $\mathcal{G}(\mathbf{r})$. Para isto, substitui-se (2.34) e (2.35) na definição do tensor de tensões, de maneira que $\boldsymbol{\sigma} = (1/8\pi)\mathbf{F} \cdot [\mathcal{P}(\mathbf{r})\mathbf{I} - (\nabla\mathcal{G}(\mathbf{r}) + (\nabla\mathcal{G})^T(\mathbf{r}))]$, sendo possível mostrar que

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = -\frac{1}{8\pi}\mathbf{F} \cdot \mathcal{T}(\mathbf{r}), \quad (2.36)$$

em que

$$\mathcal{T}(\mathbf{r}) = -\frac{6}{r^5}\mathbf{r}\mathbf{r}\mathbf{r}. \quad (2.37)$$

O triádico $\mathcal{T}(\mathbf{r})$ é uma função de Green tensorial de terceira ordem associada à propagação do distúrbio de tensão gerado por um dipolo hidrodinâmico em escoamentos de Stokes com partículas livres de torque.

2.4 Propriedades das funções de Green

As funções de Green (ou funções de mobilidade) relacionadas à solução fundamental do escoamento de Stokes apresentam propriedades importantes para o desenvolvimento da representação integral do escoamento na superfície de gotas.

Considerando a equação da continuidade para escoamentos incompressíveis, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, tem-se que $\int_V \nabla \cdot \mathbf{u} dV = \int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS = 0$. Além disso, para o distúrbio causado por apenas um ponto de força, segue que $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 1/(8\pi\mu)\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{F}$, e, portanto,

$$\int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \quad (2.38)$$

Ainda para o caso de um distúrbio provocado por um ponto de força, note que a equação da quantidade de movimento linear dada pela equação (2.17) pode ser reescrita como $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{F}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$. Assim, sendo $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ dado pela equação (2.36), segue que $\nabla \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = -8\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\mathbf{I}$. Integrando esse resultado em um volume regular V que delimita uma superfície S e utilizando o Teorema da Divergência de Gauss, tem-se que

$$\int_S \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n} dS(\mathbf{x}) = -8\pi\mathbf{I} \int_V \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dV(\mathbf{x}). \quad (2.39)$$

Usando as propriedades da distribuição do Delta de Dirac (Abramovitz & Stegun, 1964) e assumindo que S tenha vetor normal contínuo em toda sua extensão, não apresentando bicos ou quinas⁴, segue que

⁴ Tal qual uma superfície de Lyapunov.

$$\int_V \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) dV(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{x}_o \notin V \\ 1/2, & \mathbf{x}_o \in S \\ 1, & \mathbf{x}_o \in \bar{V} \end{cases}, \quad (2.40)$$

em que $\bar{V} = V - S$ é o conjunto dos pontos que pertencem ao volume V , mas não à superfície S . Dessa maneira, é possível mostrar que

$$\int_S \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = -c\mathbf{I}, \quad (2.41)$$

em que

$$c = \begin{cases} 0, & \mathbf{x}_o \notin V \\ 4\pi, & \mathbf{x}_o \in S \\ 8\pi, & \mathbf{x}_o \in \bar{V} \end{cases} \quad (2.42)$$

representa uma constante que multiplica o tensor unitário e depende da posição relativa entre \mathbf{x}_o e a superfície S .

De forma análoga, partindo da lei de conservação da quantidade de movimento angular (Pozrikidis, 1992) aplicada ao escoamento provocado por um ponto de força, obtém-se

$$\int_S \mathbf{x} \times \mathbf{F} \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = -8\pi \int_V \mathbf{x} \times \mathbf{F} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) dV(\mathbf{x}). \quad (2.43)$$

Sendo \mathbf{F} é um vetor arbitrário, invertendo-se a ordem do produto vetorial em ambos os lados de (2.43) e usando as mesmas propriedades do Delta de Dirac segue que

$$\int_S \mathbf{x} \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = -c\mathbf{x}_o, \quad (2.44)$$

em que c é dado novamente pela equação (2.42).

Por fim, também partindo da equação da quantidade de movimento associada a um ponto de força, é possível mostrar que (Pozrikidis, 1992)

$$\int_S \mathcal{P}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = c. \quad (2.45)$$

Além das propriedades já discutidas, é importante destacar a simetria das funções de Green em relação ao produto escalar por um vetor \mathbf{v} arbitrário, isto é, $\mathcal{P} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \mathcal{P}$, $\mathcal{G} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \mathcal{G}$ e $\mathcal{T} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \mathcal{T}$. Ainda nesse sentido, vale notar que \mathcal{G} é uma função par, de sorte que $\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) = \mathcal{G}(\mathbf{x}_o - \mathbf{x})$, enquanto \mathcal{P} e \mathcal{T} são funções ímpares, tais que $\mathcal{P}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) = -\mathcal{P}(\mathbf{x}_o - \mathbf{x})$ e $\mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) = -\mathcal{T}(\mathbf{x}_o - \mathbf{x})$. Essas propriedades podem ser verificadas diretamente das definições das funções de Green, conforme apresentado na Seção 2.3.

2.5 Representação integral do escoamento de Stokes

A representação integral do escoamento de Stokes fornece a base da formulação do Método Integral de Contorno para a solução do escoamento nas vizinhanças de uma gota (Pozrikidis, 1992). Essa representação transforma o problema tridimensional original em um problema integral de superfície. A redução dimensional é um avanço significativo no sentido de se obter métodos numéricos eficientes para a solução de problemas em Microhidrodinâmica envolvendo superfícies livres, como ocorre no movimento de gotas.

Para obter a representação integral geral para soluções de escoamentos em regimes de baixos números de Reynolds, partimos da identidade recíproca descrita pela equação (2.16) com o par de escoamentos $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{0})$ e $(\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}', \mathbf{f}')$. O primeiro escoamento é livre de forças de campo, de sorte que $\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}' - \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{f}' \cdot \mathbf{u}$. O segundo escoamento, por sua vez, é produzido por um monopolo com intensidade \mathbf{F} na posição \mathbf{x}_0 , tal que $\mathbf{f}' = -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}' = -\mathbf{F}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$. Assim, tem-se que $(8\pi\mu)^{-1} \mathbf{F} \cdot \nabla \cdot [\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mu \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{u}] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \mathbf{F} \cdot \mathbf{u}$. Integrando esse resultado em um volume V qualquer de fluido, aplicando o Teorema da Divergência de Gauss e considerando \mathbf{F} arbitrário, obtém-se

$$\int_V \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \mathbf{u}(\mathbf{x}) dV(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS - \frac{1}{8\pi} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS. \quad (2.46)$$

De forma geral, dependendo da localização do ponto de força em relação ao volume de integração V e usando as propriedades da distribuição Delta de Dirac, a representação integral para o campo de velocidade pode assumir os formatos

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}_o \in V, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}_o) \\ \mathbf{x}_o \in S, \quad \frac{1}{2} \mathbf{u}(\mathbf{x}_o) \\ \mathbf{x}_o \notin V, \quad \mathbf{0} \end{array} \right\} = \frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (2.47)$$

Dessa maneira, desde que $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ e $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ sejam conhecidos em S , a equação (2.47) fornece uma representação integral para o distúrbio de velocidade em uma posição \mathbf{x}_0 arbitrária do domínio. A primeira integral do lado esquerdo da igualdade quantifica os efeitos de uma distribuição contínua de pontos de força de intensidade $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ sobre a superfície S e é referenciada como *simples camada potencial*⁵. Por sua vez, a segunda integral pode ser interpretada como uma distribuição contínua de dipolos hidrodinâmicos ao longo de S , de forma análoga à teoria potencial eletromagnética (Kim & Karilla, 1991), sendo conhecida como *dupla camada potencial*⁶.

⁵ Do inglês *single-layer potential*.

⁶ Do inglês *double-layer potential*.

2.6 Representação integral do escoamento sobre a superfície de gotas

Para obter a formulação do Método Integral de Contorno para o cálculo do escoamento na superfície das gotas (ou de partículas deformáveis, em geral) é necessário dispor de uma representação integral deste escoamento. Para tanto, seja um escoamento não perturbado \mathbf{u}^∞ longe da partícula, de forma que o campo de velocidade em qualquer ponto é dado por $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) + \mathbf{u}^d(\mathbf{x})$, em que $\mathbf{u}^d(\mathbf{x})$ é o distúrbio de velocidade associado à presença da gota. Vale ressaltar que para pontos distantes da partícula os distúrbios de velocidade e tensão podem ser desprezados, visto que decaem à razão de $1/r$ e $1/r^2$, respectivamente, sendo r a distância tomada entre o ponto analisado e o centro da partícula (Happel & Brenner, 1991).

Dessa maneira, seja o fluido 1 – de viscosidade dinâmica $\mu_1 = \lambda\mu$ – o fluido que constitui a gota, e o fluido 2 – de viscosidade dinâmica $\mu_2 = \mu$ – o fluido ambiente que representa a fase contínua, como ilustra a Figura 1. Então, e considerando ambos os fluidos Newtonianos, λ é definido como a razão entre as viscosidades das fases dispersa e contínua, respectivamente.

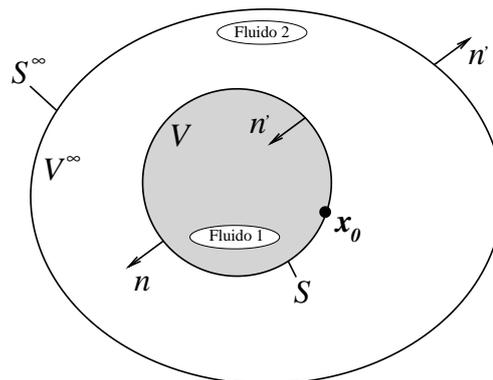


Figura 1 – Representação esquemática para o cálculo do escoamento na superfície de uma gota isolada.

Deseja-se obter uma representação integral para o escoamento exatamente sobre a superfície da gota baseada no salto de tensões através dela. Para tanto, e considerando $\mathbf{x}_0 \in S$, sejam as seguintes expressões para o campo de velocidade sobre a superfície da gota:

1. para $\mathbf{x} \in V$, o fluido confinado pela superfície é o fluido 1. Nessa situação,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\mathbf{u}(\mathbf{x}_0) &= \frac{1}{8\pi\lambda\mu} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot [\boldsymbol{\sigma}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})] dS(\mathbf{x}) \\ &\quad - \frac{1}{8\pi} \int_S \mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.48)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}_1$ é o tensor de tensões determinado pelas propriedades do fluido 1;

2. para $\mathbf{x} \in V^\infty$, o fluido está confinado entre as superfícies S (da gota) e S^∞ (do espaço livre). Então,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\mathbf{u}(\mathbf{x}_o) &= \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_o) + \frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot [\boldsymbol{\sigma}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}'(\mathbf{x})] dS(\mathbf{x}) \\ &- \frac{1}{8\pi} \int_S \mathbf{u}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}'(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S^\infty} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot [\boldsymbol{\sigma}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}'(\mathbf{x})] dS(\mathbf{x}) \\ &- \frac{1}{8\pi} \int_{S^\infty} \mathbf{u}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}'(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Note que para $\mathbf{x} \in S$, os vetores normais unitários são tais que $\mathbf{n}' = -\mathbf{n}$. Assim, contanto que S^∞ esteja longe o suficiente da gota de modo que os distúrbios de velocidade e tensão não sejam relevantes para o escoamento sobre a superfície S (de fato, tais distúrbios tendem a zero com o aumento da distância), a equação (2.49) reduz-se a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\mathbf{u}(\mathbf{x}_o) &= \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_o) - \frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot [\boldsymbol{\sigma}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})] dS(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{8\pi} \int_S \mathbf{u}_2(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.50)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}_2$ é o tensor de tensões calculado pelas propriedades do fluido 2.

Sendo assim, desde que $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2$ para $\mathbf{x} \in S$, multiplicando a equação (2.48) por λ e somando o resultado obtido com a equação (2.50) é possível mostrar que

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}_o) &= \frac{2}{1+\lambda} \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_o) - \frac{1}{4\pi(1+\lambda)\mu} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \Delta \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1-\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_o) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.51)$$

em que $\Delta \mathbf{f}(\mathbf{x}) = [\boldsymbol{\sigma}_2(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\sigma}_1(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$ é o salto de tensões através da superfície S . Para interfaces viscosas com tensão superficial, o salto de tensões ao atravessar a superfície de separação entre os fluidos é dado por (Pozrikidis, 1992)

$$\Delta \mathbf{f} = 2\sigma \bar{\kappa} \mathbf{n} - \nabla_s \sigma - \Delta \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{n}, \quad (2.52)$$

em que σ é o coeficiente de tensão superficial, $\bar{\kappa} = (\nabla_s \cdot \mathbf{n})/2$ é a curvatura média da superfície, $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla$ é o vetor gradiente projetado sobre a superfície e $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2$ é a diferença de massas específicas. Essa formulação considera o salto de tensões normais e tangenciais através de S , bem como o efeito gravitacional líquido devido à diferença entre as massas específicas dos fluidos, sendo discutida em detalhes no Apêndice B. No presente trabalho não se considera os

efeitos do salto de tensões na direção tangencial, embora possam existir devido a gradientes de temperatura ou gradientes superficiais de concentração de surfactantes. Assim sendo, o salto de tensões é reduzido a $\Delta \mathbf{f} = 2\sigma \bar{\kappa} \mathbf{n} - \Delta \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{n}$, sendo esse resultado referenciado na literatura como *Lei de Young-Laplace*.

Ainda que a dependência temporal não tenha sido levada em conta explicitamente nas equações de Stokes para a derivação da representação integral do escoamento, mudanças na configuração da superfície da gota podem ser consideradas. Nesse sentido, supõem-se que o tempo característico de propagação de vorticidade (ou de quantidade de movimento) é muito menor que o tempo característico de mudanças na configuração da superfície. Nessa situação, as mudanças na forma da superfície podem ser determinadas pela relação cinemática evolutiva

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S, \quad (2.53)$$

em um contexto de variações virtuais ou *quasi*-estáticas da posição das partículas que constituem a superfície. Essa condição significa que todo o fluido ajusta-se imediatamente às mudanças de localização das partículas sobre a superfície da gota devido à rápida difusão de vorticidade pelo meio quando comparada com o tempo de relaxação das mesmas.

2.7 Forma adimensional da representação integral

No caso em que apenas o salto de tensões normais é importante, isto é, quando os efeitos gravitacionais são desprezíveis e a superfície da gota é livre de gradientes de tensão superficial, segue que $\Delta \mathbf{f} = 2\sigma \bar{\kappa} \mathbf{n}$. Nessa situação, define-se as escalas tempo características do escoamento e de relaxação da gota como $\dot{\gamma}_c^{-1}$ e $a\mu_c/\sigma$, respectivamente, em que $\dot{\gamma}_c$ é uma taxa de cisalhamento típica do escoamento, a é o diâmetro da gota não deformada, σ é o coeficiente de tensão superficial e $\mu_c = \max\{\mu, \lambda\mu\}$. Então, consideremos as seguintes grandezas adimensionais

$$\tilde{\mathbf{x}}_0 = \frac{\mathbf{x}_0}{a}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{a}, \quad \tilde{\kappa} = \bar{\kappa}a, \quad \tilde{\mathbf{u}}^\infty = \frac{\mathbf{u}^\infty}{\dot{\gamma}_c a}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mu_c \mathbf{u}}{\sigma}, \quad \tilde{dS} = \frac{dS}{a^2}, \quad (2.54)$$

em que o til indica a variável adimensional. Além disso, é possível adimensionalizar as funções de Green associadas aos distúrbios de velocidade e tensão, de modo que $\tilde{\mathcal{G}} = a\mathcal{G}$ e $\tilde{\mathcal{T}} = a^2\mathcal{T}$. Dessa maneira, a equação (2.51) pode ser reescrita em termos das quantidades adimensionais definidas em (2.54) como

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}}(\tilde{\mathbf{x}}_0) &= \frac{2}{1+\lambda} \frac{\dot{\gamma}_c a \mu_c}{\sigma \mu} \tilde{\mathbf{u}}^\infty(\tilde{\mathbf{x}}_0) - \frac{1}{4\pi(1+\lambda)} \frac{\mu_c}{\mu} \int_S 2\tilde{\kappa} \tilde{\mathcal{G}}(\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}_0) \cdot \mathbf{n}(\tilde{\mathbf{x}}) \tilde{dS}(\tilde{\mathbf{x}}) \\ &+ \frac{1-\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \int_S \tilde{\mathbf{u}}(\tilde{\mathbf{x}}) \cdot \tilde{\mathcal{T}}(\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}_0) \cdot \mathbf{n}(\tilde{\mathbf{x}}) \tilde{dS}(\tilde{\mathbf{x}}). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Assim sendo, e suprimindo a distinção explícita das variáveis adimensionais pelo uso do til, segue que

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) &= \frac{2c_\lambda}{(1+\lambda)} Ca \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0) - \frac{c_\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \int_S 2\bar{\kappa} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{(1-\lambda)}{4\pi(1+\lambda)} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.56)$$

em que $Ca = \dot{\gamma}_c a \mu / \sigma$ é o número de capilaridade e $c_\lambda = \mu_c / \mu$ é uma constante. O número de capilaridade é o parâmetro central no estudo da reologia de emulsões, podendo ser interpretado como uma taxa de cisalhamento adimensional que quantifica a intensidade do escoamento que atua sobre a gota. Por outro lado, representa a razão entre um tempo característico de relaxação da gota devido à tensão superficial, $\tau_\sigma \sim \mu a / \sigma$, e um tempo característico do escoamento não perturbado, $\tau_\infty \sim 1 / \dot{\gamma}_c$. Assim, fica evidente a analogia entre o número de capilaridade e o número de Deborah (Bird et al., 1987). Esse último é um parâmetro importante no estudo da reologia de soluções poliméricas, expressando a razão entre um tempo característico de relaxação do polímero e um tempo característico do escoamento não perturbado. Também é o número de capilaridade que correlaciona a macroescala do escoamento e a microhidrodinâmica da gota. A constante c_λ , por sua vez, é um parâmetro que sistematiza a seleção da viscosidade apropriada para a adimensionalização das equações, diferenciando os limites de altas e baixas razões de viscosidade e definindo a viscosidade característica da microescala. Vale destacar que em estudos específicos sobre emulsões de altas razões de viscosidade, define-se o número de capilaridade em função da viscosidade da gota, de maneira que $Ca_\lambda = \lambda Ca$ (Oliveira et al., 2005).

3 Metodologia numérica

Neste capítulo serão abordados os principais tópicos acerca da solução numérica do escoamento na superfície de uma gota utilizando a formulação integral do Método Integral de Contorno. Nesse sentido, deseja-se determinar a forma de uma gota sujeita a um escoamento cisalhante simples e o campo de velocidade sobre sua superfície. Assim, um procedimento para subtração das singularidades presentes na formulação das camadas potenciais simples e dupla é apresentado. O procedimento de discretização espacial da gota em pontos de controle sobre os quais elementos geométricos, tais como vetor normal e curvatura, além da própria velocidade superficial, são conhecidos, também é discutido. Além disso, aborda-se um procedimento de regularização da dupla camada potencial, cuja finalidade é tornar bem condicionado o sistema de equações lineares para o cálculo da velocidade superficial obtido após a discretização da superfície da gota em pontos de controle. Por fim, a metodologia utilizada para marcha temporal a partir de um algoritmo de Euler com passo de tempo adaptativo e para relaxação da malha são discutidos em detalhes.

3.1 Subtração de singularidades

A representação integral para o campo de velocidade sobre a superfície da gota de uma emulsão em regimes de baixos números de Reynolds é singular em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$, causando complicações do ponto de vista numérico para solução de problemas que utilizam essa formulação. Nesse sentido, a subtração das singularidades das camadas potenciais simples e dupla é um procedimento algébrico que permite que as integrais de superfície presentes na representação descrita pela equação (2.56) sejam calculadas numericamente de forma mais acurada (Loewenberg & Hinch, 1996; Zinchenko et al., 1997; Pozrikidis, 1992).

Nessa situação, a contribuição da simples camada potencial na representação integral é dada por

$$\mathbf{I}_S = \frac{c_\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \int_S 2\bar{\kappa}(\mathbf{x}) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (3.1)$$

Por outro lado, para uma superfície S fechada, vale a propriedade descrita pela equação (2.38). Dessa maneira, e admitindo $\bar{\kappa}(\mathbf{x}_0)$ constante em relação à integração na variável \mathbf{x} , podemos escrever

$$\frac{c_\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \int_S 2\bar{\kappa}(\mathbf{x}_0) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \quad (3.2)$$

Então, subtraindo (3.2) de (3.1) obtemos

$$\mathbf{I}_S = \frac{c\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \int_S 2[\bar{\kappa}(\mathbf{x}) - \bar{\kappa}(\mathbf{x}_0)] \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (3.3)$$

A equação (3.3) é a integral original \mathbf{I}_S com a singularidade em \mathbf{x}_0 subtraída. Esse procedimento garante que ao serem computados os valores do integrando em \mathbf{I}_S as ordens de magnitude do numerador e do denominador das frações resultantes do produto entre a diferença de curvaturas, $[\bar{\kappa}(\mathbf{x}) - \bar{\kappa}(\mathbf{x}_0)]$, e o diádico $\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ sejam iguais. Isso acontece porque o termo $[\bar{\kappa}(\mathbf{x}) - \bar{\kappa}(\mathbf{x}_0)]$ tende a zero quando \mathbf{x} aproxima-se de \mathbf{x}_0 . Assim, ainda que o ponto de controle esteja próximo do pólo durante a avaliação do integrando, obtém-se um valor numérico consistente. Todavia, mesmo com a subtração de singularidade, ainda não é possível avaliar o valor de $\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ exatamente em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$. Dessa forma, o cálculo da integral deve ser limitado a uma pequena região nas vizinhanças do pólo \mathbf{x}_0 .

Quando o salto de tensões através da superfície S também considera os efeitos gravitacionais líquidos um procedimento semelhante pode ser adotado. Nesse caso, a singularidade pode ser subtraída facilmente substituindo-se $\bar{\kappa}(\mathbf{x}_0)$ por $\Delta\rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_0$. Todavia, quando existe um salto de tensões também na direção tangencial (isto é, se $\nabla^s\sigma \neq \mathbf{0}$), não há como realizar a subtração de singularidade da simples camada potencial. Nessas situações, torna-se fundamental a utilização de soluções exatas das integrais ou de formulações não singulares para a descrição do campo de velocidade sobre a superfície da gota.

Por fim, seja a contribuição da dupla camada potencial na representação integral, dada por

$$\mathbf{I}_D = \frac{1-\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (3.4)$$

Para realizar a subtração de singularidade da dupla camada potencial utiliza-se o resultado de (2.41) para o caso em que $\mathbf{x}_0 \in S$, de modo que

$$\frac{1-\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) \cdot \left[\int_S \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + 4\pi\mathbf{I} \right] = \mathbf{0}. \quad (3.5)$$

Assim sendo, subtraindo (3.5) de (3.4) obtém-se

$$\mathbf{I}_D = \frac{1-\lambda}{4\pi(1+\lambda)} \left[\int_S [\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_0)] \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - 4\pi\mathbf{u}(\mathbf{x}_0) \right], \quad (3.6)$$

que é a integral \mathbf{I}_D após a subtração da singularidade em \mathbf{x}_0 . Os mesmos comentários acerca dos efeitos da subtração de singularidade feitos no caso de \mathbf{I}_S valem para \mathbf{I}_D , com a vantagem de que nesse último caso o procedimento é de certa forma universal, visto que não depende da equação constitutiva para o salto de tensões através de S .

3.2 Discretização espacial

A discretização espacial da superfície da gota é feita por meio do posicionamento de pontos de controle sobre mesma. Considerando uma configuração inicial esférica, o método empregado inicia-se com a geração de um icosaedro regular¹. As faces desse sólido são subdivididas em triângulos equiláteros e cada novo vértice é projetado sobre a esfera que circunscreve o icosaedro original. O refinamento da discretização é controlado por um parâmetro f , numericamente igual ao número de subdivisões das arestas do icosaedro, como indica a Figura 2. As quantidades da malha são função de f , de modo que o número de elementos, nós e arestas valem, respectivamente, $N_{\Delta} = 20f^2$, $N_{\bullet} = 10f^2 + 2$ e $N_{\ell} = 30f^2$.

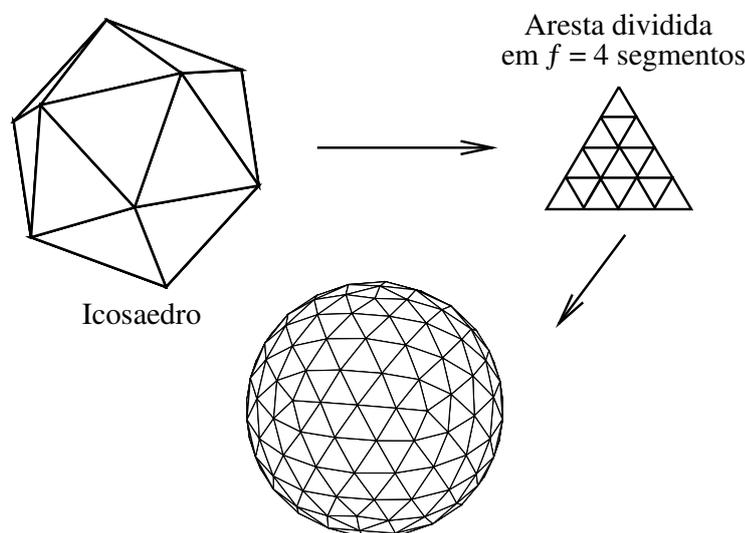


Figura 2 – Processo de geração da malha esférica a partir de um icosaedro regular.

Os pontos de controle são conectados utilizando uma estrutura de dados composta por uma tabela de coordenadas dos nós e uma tabela de conexão dos elementos triangulares, na qual são listados os nós que compõem cada triângulo sobre a superfície da esfera, na ordem destrógera². Ainda são necessárias estruturas para organização dos nós e elementos vizinhos de cada um dos nós; essas tabelas também foram geradas na ordem destrógera. Em virtude do método utilizado para geração da malha, o número de elementos e nós vizinhos de cada ponto de controle pode variar entre cinco e seis.

Vale destacar que esse processo de discretização é bastante difundido na literatura (Loewenberg & Hinch, 1996; Zinchenko et al., 1997; Bazhlevkov et al., 2004). De fato, é um procedimento relativamente simples e que produz malhas de boa qualidade, apresentando triângulos praticamente equiláteros e pouca variação no número de elementos e nós vizinhos.

¹ Poliedro convexo de 20 faces triangulares regulares.

² Isto é, no sentido anti-horário.

3.3 Elementos geométricos da superfície

Para o cálculo do vetor normal \mathbf{n} e da curvatura média local $\bar{\kappa}$ em cada nó da malha é possível utilizar uma variação do Teorema de Stokes, tal que vale a identidade

$$\bar{\kappa}(\mathbf{x}_c)\mathbf{n}(\mathbf{x}_c) = -\frac{1}{S_x} \int_C \mathbf{t} \, dl, \quad (3.7)$$

em que S_x é uma superfície que contém o ponto de controle \mathbf{x}_c , C é o contorno desta superfície sobre a esfera e \mathbf{t} é um vetor unitário tangente à face triangular e ortogonal à trajetória C , como ilustra a Figura 3. Note que $\bar{\kappa}(\mathbf{x}_c)$ é a curvatura média da superfície que contém o ponto de controle \mathbf{x}_c . Esse método será referenciado como *método da integral de linha* e foi empregado de forma pioneira por Loewenberg & Hinch (1996).

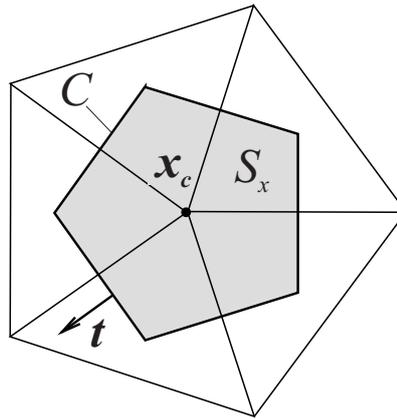


Figura 3 – Definições geométricas para o cálculo da curvatura local e do vetor normal pelo método da integral de linha.

A definição da trajetória C é muito relevante na precisão obtida no cálculo da curvatura pelo método da integral de linha. Originalmente, Loewenberg & Hinch (1996) definiram a trajetória C como o caminho que passa pelas linhas bisectoras de cada triângulo³ vizinho do nó \mathbf{x}_c . No entanto, esse procedimento torna-se impreciso quando o triângulo é obtusângulo, já que o circuncentro, neste caso, fica fora de seu perímetro. Assim sendo, esta definição não é robusta o suficiente para ser implementada em simulações de gotas deformando arbitrariamente.

De maneira alternativa, o contorno de S_x pode ser definido pela trajetória composta pelos segmentos que unem os pontos médios dos lados do triângulo ao seu baricentro \mathbf{x}_b (Bazhlekov et al., 2004). Dessa forma, \mathbf{x}_b é sempre interno ao triângulo, como ilustra a Figura 4.

³ Segmento que une o ponto médio de uma aresta do triângulo ao seu circuncentro.

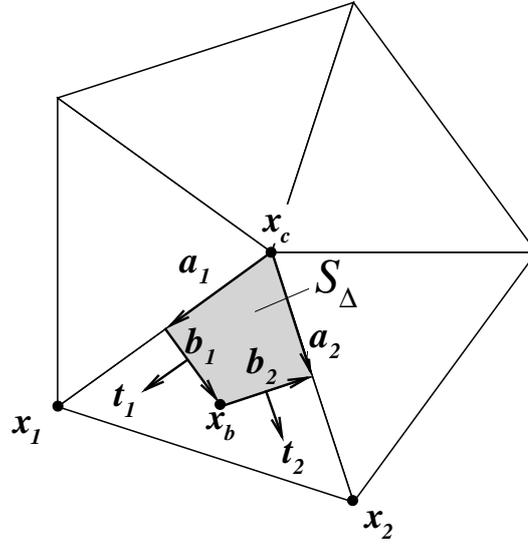


Figura 4 – Detalhes dos vetores auxiliares para o cálculo da curvatura média local pelo método da integral de linha.

A integral de linha em (3.7) é calculada somando-se as contribuições de cada elemento vizinho do nó. Utilizando a nomenclatura da Figura 4 e considerando que são conhecidas as coordenadas no espaço dos pontos de controle \mathbf{x}_c , \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 temos que $\mathbf{x}_b = (\mathbf{x}_c + \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/3$, $\mathbf{a}_1 = (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_c)/2$, $\mathbf{a}_2 = (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_c)/2$, $\mathbf{b}_1 = \mathbf{x}_c - \mathbf{x}_b - \mathbf{a}_1$ e $\mathbf{b}_2 = \mathbf{x}_b - \mathbf{x}_c - \mathbf{a}_2$. O vetor normal ao triângulo é dado por $\mathbf{n} = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)/\|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2\|$. Os vetores tangentes são calculados como $\mathbf{t}_1 = \mathbf{b}_1 \times \mathbf{n}$ e $\mathbf{t}_2 = \mathbf{b}_2 \times \mathbf{n}$. Esses últimos têm a orientação desejada e norma igual ao comprimento do segmento \mathbf{a}_1 a \mathbf{x}_b , no caso de \mathbf{t}_1 , e \mathbf{a}_2 a \mathbf{x}_b , no caso de \mathbf{t}_2 . Portanto, podemos escrever

$$\int_C \mathbf{t} dl = \sum \mathbf{t}_i, \quad (3.8)$$

em que a soma é realizada sobre todos os vetores tangentes em todos os elementos vizinhos do nó.

Embora existam diversos outros métodos para determinação da curvatura local sobre a superfície da gota, verifica-se que o método da integral de linha é sempre ligeiramente mais preciso quando adota-se \mathbf{x}_b como o baricentro dos elementos. Levando-se em consideração que um código baseado no Método Integral de Contorno tem sua principal aplicação em regimes de moderadas e grandes deformações, esse será o método utilizado para as simulações e o único apresentado neste trabalho. Vale ressaltar que o método da integral de linha apresenta uma implementação computacional extremamente simples, de sorte que o tempo de processamento necessário para os cálculos da curvatura média local e do vetor normal é, em qualquer caso, proporcional à N_Δ .

3.4 Regularização da dupla camada potencial

Para determinada configuração geométrica da gota, realiza-se um processo de discretização espacial em que um número finito de pontos de controle \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, N$, são definidos sobre sua superfície S . Dessa forma, substitui-se \mathbf{x} por \mathbf{x}_i , de modo que a equação (2.56) represente um sistema linear de $3N$ incógnitas. Um procedimento simples para solucionar esse problema consiste no Método de Gauss-Seidel, que baseia-se em realizar substituições sucessivas a partir de uma condição inicial até que não haja, dentro de determinada tolerância, variação no valor do campo de velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i)$ em cada ponto. Usualmente, a condição inicial é obtida a partir do valor de \mathbf{u} calculado para $\lambda = 1$, já que nesse caso a dupla camada potencial anula-se e a equação (2.56) pode ser resolvida diretamente. Todavia, ao passo que λ afasta-se da unidade, isto é, quando $\lambda \gg 1$ ou $\lambda \ll 1$, o sistema linear de (2.56) torna-se cada vez mais mal condicionado. Assim, sua solução passa a ser de difícil convergência, mesmo quando métodos numéricos mais robustos e sofisticados para solução de sistemas lineares são utilizados. Esse problema está associado à existência de autossoluções da parte homogênea (dupla camada potencial) da equação (2.56). Tais soluções estão relacionadas à movimentos de corpo rígido e expansões uniformes da gota. Dessa maneira, para que o Método Integral de Contorno seja implementado para determinação do campo de velocidade sobre sua superfície, é necessário retirar essas autossoluções do espectro de solução da dupla camada potencial.

Inserido nesse contexto, note que a equação (2.56) pode ser representada algebricamente como

$$\mathbf{u} = \beta \mathbf{L} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{b}, \quad (3.9)$$

em que $\beta = (1 - \lambda)/(1 + \lambda)$, \mathbf{b} é o vetor resultante das contribuições do escoamento não perturbado e da simples camada potencial e \mathbf{L} é uma aplicação linear definida em função da dupla camada potencial, dada por

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{4\pi} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (3.10)$$

A forma homogênea da equação (3.9) é obtida impondo-se $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, tal que $\mathbf{L} \cdot \mathbf{u} = \alpha \mathbf{u}$, em que $\alpha = 1/\beta$. Portanto, se α for um autovalor de \mathbf{L} ou de seu operador adjunto \mathbf{L}^A , é possível mostrar que o sistema (3.9) não admite solução (Lima, 1996).

Movimentos de corpo rígido são descritos como $\mathbf{u} = \mathbf{V} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x}$, em que \mathbf{V} e $\boldsymbol{\Omega}$ são velocidades de translação e rotação arbitrárias e denotam autovetores de (3.9) (Pozrikidis, 1992). Considerando separadamente os movimentos de translação e rotação, faz-se, inicialmente, $\mathbf{u} = \mathbf{V}$, e substitui-se esse resultado na versão homogênea da equação (2.56), de modo que

$$\frac{1}{4\pi} \mathbf{V} \cdot \int_S \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \alpha \mathbf{V}. \quad (3.11)$$

Utilizando a propriedade descrita em (2.41) para $\mathbf{x}_0 \in S$, a integral de superfície em (3.11) vale $-4\pi\mathbf{I}$. Assim sendo, $\alpha = -1$ é um autovalor associado ao autovetor \mathbf{V} . De forma semelhante, usando $\mathbf{u} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x}_0$ na parte homogênea de (2.56) tem-se

$$\frac{1}{4\pi}\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x}_0 \cdot \int_S \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \alpha\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x}_0. \quad (3.12)$$

Utilizando novamente (2.41) para $\mathbf{x}_0 \in S$, segue que a integral de superfície em (3.12) também vale $-4\pi\mathbf{I}$, de maneira que $\alpha = -1$ também é autovalor do autovetor $\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x}$. Lembrando que $\beta = 1/\alpha$, note que no limite $\beta \rightarrow -1$ o sistema linear descrito pela equação (2.56) torna-se cada vez mais mal condicionado. Fisicamente, $\beta \rightarrow -1$ é equivalente a $\lambda \rightarrow \infty$, denotando que a viscosidade da gota é muito maior que a viscosidade do fluido ambiente. Nessa situação, a partícula comporta-se como um corpo rígido que translada e rotaciona junto com a vorticidade do escoamento, e não como uma gota que deforma-se por sua ação.

Da mesma maneira, os autovetores do operador adjunto de \mathbf{L} também produzem o mal condicionamento do sistema linear descrito por (2.56), e também devem ser retirados do espectro de solução. Por definição, o operador adjunto \mathbf{L}^A é tal que

$$\mathbf{L}^A \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{4\pi}\mathbf{n}(\mathbf{x}_0) \cdot \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}). \quad (3.13)$$

O problema linear $\mathbf{L}^A \cdot \mathbf{u} = \alpha\mathbf{u}$ admite $\mathbf{u} = \mathbf{n}$ como autovetor. O autovalor associado é obtido fazendo

$$-\frac{1}{4\pi}\mathbf{n}(\mathbf{x}_0) \cdot \int_S \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) = \alpha\mathbf{n}(\mathbf{x}_0). \quad (3.14)$$

Mais uma vez usando (2.41) para $\mathbf{x}_0 \in S$, segue que $\alpha = 1$ é um autovalor associado ao autovetor \mathbf{n} . A interpretação física para esse resultado é obtida notando que para $\alpha \rightarrow 1$, é preciso que $\lambda \rightarrow 0$, de sorte que a gota comporte-se como uma bolha invíscida imersa no escoamento.

Dessa maneira, os autovalores $\alpha_1 = -1$ ($\lambda \rightarrow \infty$) e $\alpha_2 = 1$ ($\lambda \rightarrow 0$), relativos à movimentos de corpo rígido e de bolha invíscida (movimento de expansão uniforme), respectivamente, prejudicam o condicionamento e impossibilitam a solução numérica do sistema linear obtido após a discretização espacial de (2.56). Assim, é necessário remover esses autovetores do espectro de \mathbf{L} . Um procedimento adequado para essa finalidade é referenciado como *Deflação de autovalores de Wielandt* (Wilkinson, 1965). Tal método consiste em substituir o operador \mathbf{L} por $\mathbf{L}' = \mathbf{L} - \alpha_1\mathbf{v}_1\mathbf{r} - \alpha_2\mathbf{s}\mathbf{v}_2$, em que $\{\alpha_1, \mathbf{v}_1\}$ e $\{\alpha_2, \mathbf{v}_2\}$ são os pares de autovalores e autovetores de \mathbf{L} e \mathbf{L}^A , respectivamente. Além disso, seja o espaço de funções vetoriais $A = \{\mathbf{a}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3; a_i \in C^0; (\mathbf{a}, \mathbf{a}) < \infty\}$, de dimensão infinita, em que C^0 é o espaço das funções contínuas, no qual está definido o produto interno $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \int_S \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x})$, em que $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\} \in A$. Dessa forma, é necessário que $(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1) = 1$ e $(\mathbf{s}, \mathbf{v}_2) = 1$. Finalmente, note que o operador modificado \mathbf{L}' apresenta os mesmos autovalores de \mathbf{L} com exceção de α_1 e α_2 , que foram substituídos por zero.

Portanto, no presente contexto, o problema original dado pela equação (2.56) é substituído por (Zinchenko et al., 1997; Pozrikidis, 1992)

$$\mathbf{w} = \beta[\mathbf{L} \cdot \mathbf{w} - \alpha_1 \mathbf{v}_1(\mathbf{r}, \mathbf{w}) - \alpha_2 \mathbf{s}(\mathbf{v}_2, \mathbf{w})] + \mathbf{b}, \quad (3.15)$$

sendo que o vetor velocidade original \mathbf{u} é recuperado por

$$\mathbf{u} = \mathbf{w} + \frac{\beta\alpha_1}{1 - \beta\alpha_1} \mathbf{v}_1(\mathbf{r}, \mathbf{w}). \quad (3.16)$$

O termo $\mathbf{v}_1(\mathbf{r}, \mathbf{w}) = \mathbf{w}'$ pode ser entendido como a projeção de \mathbf{w} em um espaço de vetores de movimento de corpo rígido, sendo calculado por

$$\mathbf{w}' = \mathbf{V} + \boldsymbol{\Omega} \times \hat{\mathbf{x}}, \quad (3.17)$$

em que $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_c$, sendo \mathbf{x}_c a coordenada do centróide da gota. Sendo S sua área superficial, segue que $\mathbf{V} = \int_S \mathbf{w} dS$ é a projeção de \mathbf{w} na direção de uma velocidade de translação arbitrária e $\boldsymbol{\Omega} = \Omega_i \mathbf{e}_i$ é a projeção de \mathbf{w} na direção de uma velocidade de rotação arbitrária, cujas componentes podem ser determinadas pela solução do sistema

$$\mathcal{D}_{ij} \Omega_j = \int_S \mathbf{w} \cdot (\mathbf{e}_i \times \hat{\mathbf{x}}) dS, \quad (3.18)$$

em que \mathbf{e}_i são os vetores da base canônica do \mathbb{R}^3 e \mathcal{D} é o tensor momento de inércia da superfície S , dado por

$$\mathcal{D} = \int_S [\mathbf{I}(\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{x}}) - \hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}] dS. \quad (3.19)$$

O termo $\mathbf{s}(\mathbf{v}_2, \mathbf{w})$ pode ser calculado observando-se que se $\mathbf{v}_2 = \mathbf{n}$, uma escolha apropriada para \mathbf{s} é $\mathbf{s} = \mathbf{n}/S$, dado que $(\mathbf{n}, \mathbf{n}/S) = 1$. Dessa forma, a projeção de \mathbf{w} no espaço de movimentos de expansão livre pode ser determinada por

$$\mathbf{v}_2(\mathbf{s}, \mathbf{w}) = \frac{\mathbf{n}}{S} \int_S \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.20)$$

A implementação do processo de regularização da dupla camada potencial descrito faz com que os sistemas lineares para determinação de $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i)$ obtidos após a discretização da superfície sejam bem condicionados. Assim, métodos iterativos como o de Gauss-Seidel atingem a convergência rapidamente, podendo ser utilizados sem maiores dificuldades do ponto de vista numérico. Finalmente, para a solução numérica do sistema de equações lineares definido pela equação (2.56) deve-se proceder da seguinte maneira: (i) resolve-se (3.15) em que $\mathbf{v}_1(\mathbf{r}, \mathbf{w})$ é determinado pela equação (3.17), e $\mathbf{s}(\mathbf{v}_2, \mathbf{w})$, por (3.20); (ii) para a determinação de $\mathbf{L} \cdot \mathbf{w}$ e \mathbf{b} , as singularidades das camadas potenciais simples e dupla devem ser subtraídas utilizado as equações (3.3) e (3.5); (iii) a solução para \mathbf{u} deve ser obtida utilizando a equação (3.16).

3.5 Cálculo da velocidade

Considerando-se a formulação integral singular baseada no Método Integral de Contorno, a velocidade sobre a superfície da gota é determinada solucionando-se a equação (2.56) após a subtração das singularidades e a regularização da dupla camada potencial, como descrito nas Seções 3.1 e 3.4. Então, temos de solucionar numericamente integrais de superfícies de equações vetoriais do tipo $\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) = \int_S \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x})$, em que $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$ é uma função vetorial de \mathbf{x} e de parâmetro \mathbf{x}_0 . A integração sobre S pode ser realizada pela soma das integrais realizadas sobre cada um dos elementos, de maneira que $\int_S \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_\Delta} \int_{S^e} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x})$, em que S^e denota a superfície do elemento e , em que $e = 1, 2, \dots, N_\Delta$. Para integração nas superfícies S^e utiliza-se a Regra do Trapézio para o cálculo de integrais sobre um triângulo de vértices $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ e \mathbf{x}_3 no espaço, de modo que (Press et al., 1992)

$$\int_S \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{N_\Delta} \frac{S^e}{3} \sum_{i=1}^3 \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0). \quad (3.21)$$

O uso da fórmula de integração (3.21) introduz um erro $\mathcal{O}(N_\Delta^{-1})$, que é o mesmo cometido no cálculo da curvatura pelo método da integral de linha com elementos triangulares planos, descrito na Seção 3.3.

A maneira mais natural de calcular integrais como aquela descrita em (3.21) é visitar elemento por elemento e somar cada uma das contribuições. No entanto, considerando que, em geral, cada nó pertence à seis triângulos, o valor do integrando é calculado em cada nó repetidamente, em média, seis vezes. Uma alternativa para esse problema é realizar uma varredura por nós (Rallison, 1981), de forma que

$$\int_S \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N_\bullet} S_i^{viz} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0), \quad (3.22)$$

em que S_i^{viz} é o somatório das áreas dos elementos vizinhos do nó na posição \mathbf{x}_i . Realizando o cálculo das integrais de superfície dessa forma, o tempo por iteração diminui para cerca de 17% do tempo que seria necessário se a integração fosse realizada segundo a equação (3.21) (Oliveira, 2007).

O cálculo da velocidade dos pontos de controle sobre a superfície da gota é realizado pela solução do sistema linear representado de forma algébrica pela equação (3.15). Dessa maneira, utiliza-se um algoritmo de substituições sucessivas para solução numérica do sistema. Portanto, conhecendo-se \mathbf{w}^p e adotando-se determinada tolerância Δ_w , segue que

$$\left[\begin{array}{l} 1. \quad \mathbf{w}^{p+1} \leftarrow \beta [\mathbf{L} \cdot \mathbf{w}^p - \alpha_1 \mathbf{v}_1^p(\mathbf{r}^p, \mathbf{w}^p) - \alpha_2 \mathbf{s}(\mathbf{v}_2, \mathbf{w}^p)] + \mathbf{b} \\ 2. \quad \text{Se } \varepsilon_w = \max\{\|\mathbf{w}^{p+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{w}^p(\mathbf{x})\|\} < \Delta_w, \text{ então } \rightarrow \mathbf{FIM} \\ 3. \quad \mathbf{w}^p(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{w}^{p+1}(\mathbf{x}) \end{array} \right. \quad (3.23)$$

Uma vez que os valores de $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ são atualizados à medida que são calculados durante a iteração, o algoritmo descrito em (3.23) reproduz o Método de Gauss-Seidel para solução de sistemas lineares (Kreyszig, 1999). Destaca-se que para altas razões de viscosidade e altos números de capilaridade, a convergência de \mathbf{w} dentro de uma tolerância $\Delta_w = 10^{-6}$ ocorre por volta de 6 iterações. Em casos de gotas deformando de forma mais significativa, a convergência é obtida, em geral, após 3 iterações. Além disso, o refinamento da malha não afeta de forma significativa o número de iterações necessárias para convergência (Oliveira, 2007). Após a determinação de \mathbf{w} a velocidade \mathbf{u} é obtida pela equação (3.16), tal que

$$\mathbf{u} = \mathbf{w}^{p+1} + \frac{\beta\alpha_1}{1 - \beta\alpha_1} \mathbf{v}_1^{p+1}(\mathbf{r}^{p+1}, \mathbf{w}^{p+1}). \quad (3.24)$$

Depois que o processo iterativo para \mathbf{w} converge, o valor de \mathbf{u} é utilizado no lado direito da equação (2.56), em que apenas a subtração de singularidades é realizada. Assim, obtém-se uma solução sem a remoção dos autovalores espúrios, \mathbf{u}_p . Se $\varepsilon_u = \max\{|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}_p(\mathbf{x})|\} > \Delta_u = 10^{-4}$, então o valor de Δ_w é reduzido a 10% do valor original e as iterações em \mathbf{w} são repetidas. Essa segunda conferência é feita com a finalidade de garantir que apenas as autossoluções associadas a movimentos de corpo rígido e de bolha invíscida sejam extraídas do espectro de soluções da representação integral. Por fim, vale comentar que mesmo com um chute inicial preciso tal que $\varepsilon_u < \Delta_u$, processos iterativos em que a remoção dos autovalores espúrios não é realizada divergem para $\lambda \geq 5$ (Oliveira, 2007).

No caso particular em que $\lambda = 1$ a representação integral do escoamento sobre a superfície da gota reduz-se à simples camada potencial. Assim sendo, a expressão para $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0)$ é explícita e não é necessário solucionar um sistema linear de forma iterativa. Tipicamente, a aproximação inicial para $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0)$ necessária quando $\lambda \neq 1$ é obtida desse caso.

3.6 Evolução da superfície da gota

A evolução da superfície da gota é feita por um algoritmo de Euler de segunda ordem aplicado à solução da equação evolutiva $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{u}$. O tempo físico da simulação é evoluído segundo passos de tempo adaptativos. Nesse caso, o parâmetro utilizado consiste em uma medida de deformação da gota. Essa medida será referenciada por D_2 e é descrita em detalhes na Seção 5.4. Dessa maneira, a posição dos pontos de controle sobre a superfície da gota é evoluída de duas formas distintas: (i) com um avanço temporal de Δt ; (ii) com dois avanços consecutivos de $\Delta t/2$. Assim, D_2 é calculado para as duas situações e define-se $\Delta_D = |D_2^{(i)} - D_2^{(ii)}|$. Enfim, o passo de tempo de cada iteração é calculado baseando-se na relação entre o valor de Δ_D e faixas de tolerância previamente estabelecidas. O algoritmo que segue é utilizado para determinar o passo de tempo de cada iteração.

$$\left[\begin{array}{l}
 1. \quad D_2^{(i)} \leftarrow D_2(\Delta t) \\
 2. \quad D_2^{(ii)} \leftarrow D_2\left(\frac{\Delta t}{2} + \frac{\Delta t}{2}\right) \\
 3. \quad \Delta_D \leftarrow |D_2^{(i)} - D_2^{(ii)}| \\
 4. \quad \text{Se } \Delta_D > \Delta_M, \text{ então } \Delta t \leftarrow \Delta t(\Delta_m/\Delta)^{1/3} \\
 5. \quad \text{Se } \Delta_D < \Delta_m, \text{ então } \Delta t \leftarrow \Delta t(\Delta_M/\Delta)^{1/3} \\
 6. \quad \text{Se } \Delta t > 1, \text{ então } \Delta t \leftarrow 1
 \end{array} \right. \quad (3.25)$$

Nesse caso, os limites máximo e mínimo para Δ (Δ_M e Δ_m , respectivamente), são calculados por um desvio de $\pm 10\%$ em relação a uma tolerância padrão previamente definida, de sorte que $\Delta_M = 1,10\varepsilon_r$ e $\Delta_m = 0,90\varepsilon_r$, em que $\varepsilon_r = 10^{-5}$. As simulações são inicializadas com um passo de tempo $\Delta t = 10^{-2}$. Além disso, com o objetivo de conter os erros numéricos associados ao método, o sexto passo do algoritmo indica que o passo de tempo é limitado por um valor máximo de uma unidade. De fato, quando o escoamento atinge o regime permanente e D_2 permanece praticamente constante, o método tende a aumentar consideravelmente o passo de tempo entre duas iterações consecutivas, causando complicações do ponto de vista numérico em relação à estabilidade da malha.

O caráter Lagrangeano da discretização espacial, em que cada ponto da malha é uma partícula material sobre a superfície da gota, dá origem a um problema de instabilidade da malha. Mesmo que a forma da gota não varie mais, ainda há escoamento em sua superfície (bem como dentro e fora da gota). Assim, os pontos de controle estão sempre em movimento, distorcendo os elementos até que a malha entre em colapso. Uma possível solução para esse tipo de problema consiste em utilizar técnicas de relaxação para malha. Tais procedimentos buscam eliminar a dependência temporal da posição dos nós sobre a gota, de forma que a malha não dependa mais da história do escoamento.

Loewenberg & Hinch (1996) convectam os pontos de controle sobre a superfície alterando a equação evolutiva para $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{u} + \mathbf{\Pi}$, em que $\mathbf{\Pi}$ é uma velocidade tangencial arbitrariamente definida com o intuito de conter a distorção da malha. Esse parâmetro deve ser calculado localmente, de forma que o tempo de processamento necessário ao procedimento de relaxação é $\mathcal{O}(N_\Delta)$. Esse método pode evitar que a malha distorça-se em simulações de longo tempo. Além disso, a definição de $\mathbf{\Pi}$ pode levar em consideração fatores como a curvatura média local, variações na área dos elementos, distância entre duas ou mais gotas, velocidade sobre a superfície, concentração de surfactantes, entre outros, caracterizando a técnica como um método de relaxação ativo. Desta forma, a recolocação dos pontos de controle sobre a malha pode privilegiar as regiões de alta curvatura ou altos gradientes de concentração de surfactantes, por exemplo. Neste trabalho emprega-se um método semelhante ao de Loewenberg & Hinch (1996), de modo a resolver a equação

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \mathbf{\Pi}, \quad (3.26)$$

com o valor de $\mathbf{\Pi}$, para cada nó \mathbf{x}_i da malha, dado por (Loewenberg & Hinch, 1996)

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{x}_i) = \psi^{-1} \frac{N_{\Delta}^{3/2}}{1 + \lambda} [\mathbf{I} - \mathbf{n}(\mathbf{x}_i)\mathbf{n}(\mathbf{x}_i)] \sum_j (C_{r1} + C_{r2}|\bar{\kappa}|^{3/2}) S_j^e(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (3.27)$$

em que ψ , C_{r1} e C_{r2} são constantes positivas, j é um índice que corre sobre os nós vizinhos do ponto de controle \mathbf{x}_i e S_j^e é a área do elemento à esquerda da aresta formada por \mathbf{x}_i e \mathbf{x}_j . A expressão para $\mathbf{\Pi}$ é definida de forma heurística e otimizações cuidadosas são desnecessárias, segundo os autores. O termo $[\mathbf{I} - \mathbf{n}(\mathbf{x}_i)\mathbf{n}(\mathbf{x}_i)]$ garante que $\mathbf{\Pi}$ seja uma componente de velocidade tangente à superfície. A constante C_{r1} controla a tendência da malha em manter os elementos com mesma área, enquanto C_{r2} controla a tendência da relaxação em concentrar pontos nas regiões de maior curvatura. Para tornar a velocidade de relaxação sensível à outros parâmetros, tais como concentrar pontos da malha nas proximidades de outra gota ou em regiões com alta concentração de surfactantes, é preciso adicionar termos similares. A constante ψ , por sua vez, está associada à magnitude de $\mathbf{\Pi}$. Neste trabalho, as simulações foram realizadas com $\psi = 300$, $C_{r1} = 10$ e $C_{r2} = 5$.

Vale comentar que a nova forma da equação evolutiva descreve um processo de relaxação a cada iteração. Todavia, esse procedimento pode não ser suficiente para tornar a malha independente da história do escoamento. Então, os pontos sobre a superfície da gota devem ser submetidos a novos processos de evolução temporal em um contexto virtual, distinto e independente da escala de tempo físico. Nessa situação, apenas a velocidade de relaxação $\mathbf{\Pi}$ é utilizada, e o passo de tempo adimensional é ajustado de acordo com os parâmetros físicos do problema, tal que $\Delta t_r = \min\{\Delta x / [(\lambda + 1)Ca], 10^{-2}\}$, em que $\Delta x = \sqrt{4\pi/N_{\Delta}}$. O critério de parada para o processo consiste em avaliar o comportamento do desvio padrão das áreas dos elementos da malha. Sendo assim, observa-se que utilizando 10 iterações extras de relaxação a cada passo de tempo físico, o desvio padrão das áreas dos elementos é da ordem de 0,2%, e permanece praticamente constante. Dessa forma, o caráter Lagrangeano da malha é anulado e a posição dos nós sobre a superfície da gota torna-se independente da história do escoamento. Mais detalhes sobre o procedimento de relaxação extra num contexto de tempo virtual são descritos por Siqueira et al. (2011).

4 Formulação não singular

No que tange aos procedimentos numéricos aplicados a escoamentos de Stokes, o ponto de maior relevância para determinação da solução de escoamentos com base no Método Integral de Contorno é resolver as integrais de superfície descritas na equação (2.56). A maior dificuldade consiste nas singularidades das funções de Green presentes na formulação,

$$\mathcal{P}(\mathbf{r}) = 2\frac{\mathbf{r}}{r^3}, \mathcal{G}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \text{ e } \mathcal{T}(\mathbf{r}) = -6\frac{\mathbf{r}\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^5}, \quad (4.1)$$

em que $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$. Vale notar que o propagador do distúrbio de velocidade, $\mathcal{G}(\mathbf{r})$, cai com r e possui uma singularidade de primeira ordem, enquanto os propagadores dos distúrbios de pressão e tensão, $\mathcal{P}(\mathbf{r})$ e $\mathcal{T}(\mathbf{r})$, respectivamente, caem com r^2 e apresentam singularidades de segunda ordem.

Nesse sentido, caso um método de integração de acurácia insuficiente seja utilizado nos pontos da vizinhança do pólo \mathbf{x}_0 , os erros por ele produzidos podem afetar consideravelmente os resultados para o campo de velocidade sobre a superfície da gota e a evolução temporal dos pontos de controle sobre ela. Uma quantidade considerável de técnicas de aproximação numérica tem sido desenvolvidas com o objetivo de melhorar a performance dos cálculos das integrais de superfície para solução desse tipo de escoamento. Nesse contexto, destaca-se a utilização de técnicas de integração de alta ordem combinadas com processos de refinamento de malhas nas vizinhanças do ponto singular (Stone & Leal, 1989; Yon & Pozrikidis, 1999; Pozrikidis, 2001), muito embora as identidades expressas pelas equações (2.38), (2.41) e (2.45) não sejam satisfeitas exatamente, violando propriedades físicas de conservação do escoamento. Outro procedimento que merece destaque é o de subtração de singularidades (Loewenberg & Hinch, 1996; Zinchenko et al., 1997; Loewenberg & Hinch, 1997), descrito na Seção 3.1. Nesse caso as propriedades das funções de Green são completamente satisfeitas, todavia, o cálculo ainda deve ser limitado à uma pequena região em torno do pólo. Por outro lado, técnicas analíticas de aproximação no sentido de regularizar a singularidade do problema (Mukherjee, 2002) e métodos exatos de integração (Salvadori, 2001) também têm sido estudados. Todavia, esses procedimentos não são aplicáveis no caso de superfícies tridimensionais deformando arbitrariamente.

Inserido nesse contexto, este capítulo trata de uma alternativa ao cálculo das integrais de superfície singulares. Apresentamos uma formulação não singular baseada em integrais de linha para representar as integrais de superfície das funções de Green singulares (Bazhlekov et al., 2004). Assim, as integrações sobre os elementos discretizados sobre a superfície da gota são realizadas considerando-se apenas seu contorno. Então, desde que o contorno não contenha o pólo \mathbf{x}_0 , a singularidade é eliminada da formulação. Além de não singulares, as integrais

de linha atendem exatamente às propriedades das funções de Green descritas na Seção 2.4 e apresentam bons resultados quando associadas à métodos numéricos de integração.

Consideremos, então, uma superfície tridimensional D , delimitada pelo contorno Γ , como mostra a Figura 5. Assume-se que tanto D quanto Γ são limitadas e regulares. Sejam ainda \mathbf{n}_D o vetor unitário normal e exterior à D e \mathbf{t} o vetor unitário tangente à Γ , definido por $\mathbf{t} = \mathbf{b} \times \mathbf{n}_D$, em que \mathbf{b} é o vetor unitário normal à Γ contido em um plano tangente à D . Note que D , no contexto deste trabalho, representa parte da superfície de uma gota, não sendo, portanto, necessariamente plana.

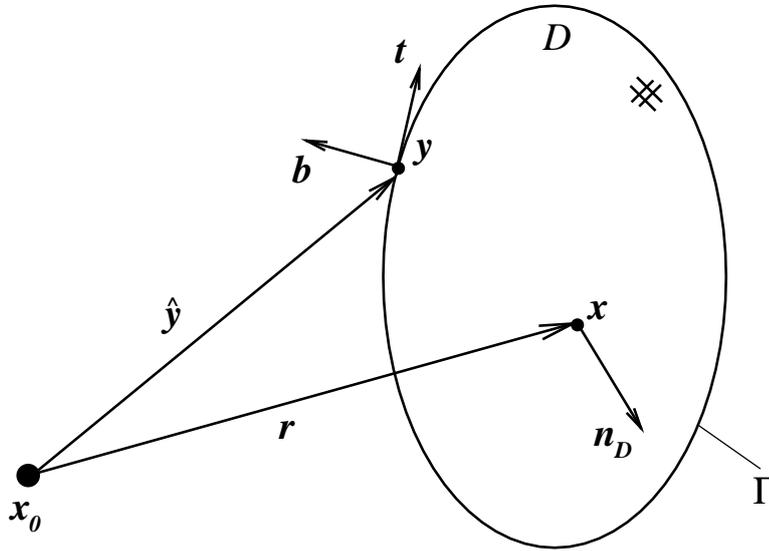


Figura 5 – Esquema representativo de uma superfície tridimensional D e seu contorno Γ .

Dessa maneira, este capítulo tem por finalidade mostrar que (Bazhlevkov et al., 2004)

$$\int_D \mathcal{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \oint_{\Gamma} \frac{\mathbf{t}(\mathbf{y}) \times \hat{\mathbf{y}}}{|\hat{\mathbf{y}}|} dl(\mathbf{y}), \quad (4.2)$$

$$\int_D \mathcal{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = 2 \oint_{\Gamma} \frac{\hat{\mathbf{y}}(\hat{\mathbf{y}} \times \mathbf{t}(\mathbf{y}))}{|\hat{\mathbf{y}}|^3} dl(\mathbf{y}), \quad (4.3)$$

$$\int_D \mathcal{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = 2 \oint_{\Gamma} \frac{\mathbf{a} \cdot (\hat{\mathbf{y}} \times \mathbf{t}(\mathbf{y}))}{|\hat{\mathbf{y}}|(|\hat{\mathbf{y}} + \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{y}}|)} dl(\mathbf{y}) + c, \quad (4.4)$$

em que $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \mathbf{x}_0$, $\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathbf{I}\mathcal{P}$ é um tensor de terceira ordem auxiliar e \mathbf{a} é um vetor unitário arbitrário. A constante c depende da orientação de \mathbf{a} em relação ao contorno Γ e é dada pela equação (2.42). Note que as equações (4.2), (4.3) e (4.4) permanecem regulares mesmo quando o pólo \mathbf{x}_0 está localizado exatamente sobre a superfície D . De fato, a única limitação para essas representações é que o pólo não pertença ao contorno Γ da superfície de integração.

4.1 Formulação não singular da simples camada potencial

De acordo com a representação dada pela equação (2.56), a parte integral da simples camada potencial é $\mathbf{I}^S = \int_S 2\bar{\kappa} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x})$, em que $\bar{\kappa} = \bar{\kappa}(\mathbf{x})$ é a curvatura média local da superfície de integração. Todavia, partindo do Teorema do Valor Médio para $\bar{\kappa}(\mathbf{x})$ sobre S , mostra-se que considerar constante a curvatura média da superfície em que a integral é avaliada introduz um erro $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ no resultado de \mathbf{I}^S (Bazhlekov et al., 2004). Assim sendo, uma aproximação razoável para os objetivos deste trabalho consiste em reescrever a integração da simples camada potencial como

$$\mathbf{I}^S = 2\bar{\kappa} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (4.5)$$

em que $\bar{\kappa}$ representa, dessa vez, a curvatura média sobre uma pequena porção S da gota. Dessa forma, os problemas numéricos associados ao cálculo de $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0)$ estão relacionados apenas com a integração do tensor $\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, singular em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$, sobre a superfície da gota. Ainda considerando o esquema representado na Figura 5, estamos interessados em calcular a contribuição integral da simples camada potencial para o campo de velocidade,

$$\mathbf{I}^G = \int_D \mathcal{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (4.6)$$

Seja então a superfície cônica S que conecta o contorno Γ da superfície D ao pólo \mathbf{x}_0 , como mostra a Figura 6. Por simplicidade e sem perda de generalidade, supõe-se que o pólo \mathbf{x}_0 esteja localizado na origem do sistema de coordenadas, tal que $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0} = (0, 0, 0)$. Assim, segue que $\mathbf{r} = \mathbf{x}$ e $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y}$. Caso o pólo esteja sobre a superfície, isto é, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0} \in D$, ainda é necessário assumir que D não tenha bicos ou quinhas na origem.

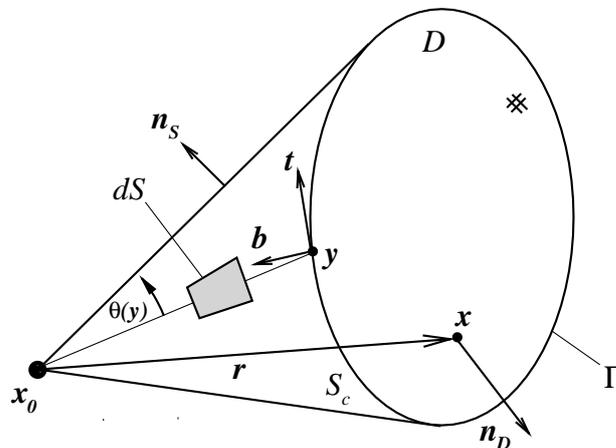


Figura 6 – Detalhes da superfície cônica S que liga o contorno Γ ao pólo \mathbf{x}_0 .

Dessa maneira, define-se uma superfície fechada $S_c = S \cup D$, de sorte que a propriedade descrita pela equação (2.38) seja válida. Assim,

$$\int_{S_c} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \int_S \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_S(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \int_D \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (4.7)$$

ou, de forma equivalente,

$$\mathbf{I}^G = - \int_S \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_S(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (4.8)$$

Voltando à definição de $\mathbf{G}(\mathbf{r})$, usando que $\mathbf{I} \cdot \mathbf{n}_S = \mathbf{n}_S$ e notando que \mathbf{x} e \mathbf{n}_S são ortogonais para $\mathbf{x} \in S$, a integral sobre S pode ser reescrita como

$$\int_S \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_S(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \int_S \frac{1}{r} \mathbf{n}_S(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad (4.9)$$

em que $r = \sqrt{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}}$.

Consideremos agora a introdução de um sistema de coordenadas polares $\mathbf{0}(r, \theta(\mathbf{y}))$, local com respeito a $\mathbf{y} \in \Gamma$, de sorte que $dS(\mathbf{x}) = r dr d\theta$. Então, podemos escrever

$$\mathbf{I}^G = - \oint_{\Gamma} \int_0^{|\mathbf{y}|} \frac{1}{r} \mathbf{n}_S(\mathbf{y}) r dr d\theta. \quad (4.10)$$

Notando ainda que $d\theta = |d\mathbf{y} \times \mathbf{y}|/|\mathbf{y}|^2$ e $\mathbf{n}_S(\mathbf{y}) = (\mathbf{y} \times d\mathbf{y})/|\mathbf{y} \times d\mathbf{y}|$, a equação (4.10) pode ser reescrita como

$$\mathbf{I}^G = - \oint_{\Gamma} \frac{d\mathbf{y} \times \mathbf{y}}{|\mathbf{y}|}. \quad (4.11)$$

Por fim, verificando que $d\mathbf{y} = \mathbf{t}(\mathbf{y})d\ell(\mathbf{y})$ e substituindo esse resultado em (4.11), a integral da simples camada potencial pode ser expressa a partir de uma integral de linha não singular no contorno fechado Γ , tal que

$$\mathbf{I}^G = \int_D \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) \cdot dS(\mathbf{x}) = \oint_{\Gamma} \frac{\mathbf{t}(\mathbf{y}) \times \mathbf{y}}{|\mathbf{y}|} d\ell(\mathbf{y}). \quad (4.12)$$

É fácil verificar que (4.12) independe da posição do pólo \mathbf{x}_0 . De fato, mesmo que pólo esteja localizado sobre a própria superfície D , mas fora do contorno Γ , a formulação ainda é não singular.

4.2 Formulação não singular da dupla camada potencial

Ainda de acordo com a representação integral de (2.56), a parte integral da dupla camada potencial é $\mathbf{I}^D = \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x})$, que, após a discretização espacial da superfície da gota em N pontos de controle \mathbf{x}_i , representa um sistema linear de $3N$ incógnitas. Partindo do Teorema do Valor Médio para $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, mostra-se que (Bazhlekov et al., 2004)

$$\mathbf{I}^D = \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \int_S \mathcal{T}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (4.13)$$

em que $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ representa, nesse caso, uma média espacial do campo de velocidade tomado sobre uma porção S da superfície da gota. Note que essa representação é conveniente para solução do sistema via métodos iterativos de substituições sucessivas a partir de uma condição inicial, como descrito na Seção 3.4. Dessa forma, a solução para o vetor velocidade sobre cada ponto de controle é atingida quando a diferença entre os valores obtidos em duas iterações consecutivas for inferior a uma determinada tolerância.

Assim, ainda com base na Figura 6, seja Γ_1 a projeção radial de Γ sobre uma esfera unitária centrada na origem, isto é, $\Gamma_1 = \{\mathbf{z} = \mathbf{y}/|\mathbf{y}|, \mathbf{y} \in \Gamma\}$, e seja S parte da superfície do cone limitada por Γ e Γ_1 , como mostra Figura 7. Em geral, a esfera unitária é dividida em duas partes pelo contorno Γ_1 , embora os resultados aqui apresentados sejam válidos para qualquer situação. Para essa demonstração, consideremos D_1 a parte da superfície da esfera cujo vetor unitário normal aponta para fora da superfície fechada $S_c = D \cup S \cup D_1$, isto é, $\mathbf{n}_{D_1}(\mathbf{x}) = -\mathbf{x}$. O vetor \mathbf{n}_D pode apontar para fora ou para dentro de S_c , e embora consideremos aqui o primeiro caso, o outro difere apenas pelo sinal. Por fim, caso $\mathbf{x}_o \in D$, a superfície projetada D_1 é escolhida como a parte da esfera unitária cujo vetor unitário normal \mathbf{n}_{D_1} tenha mesma orientação de \mathbf{n}_D em relação a S_c .

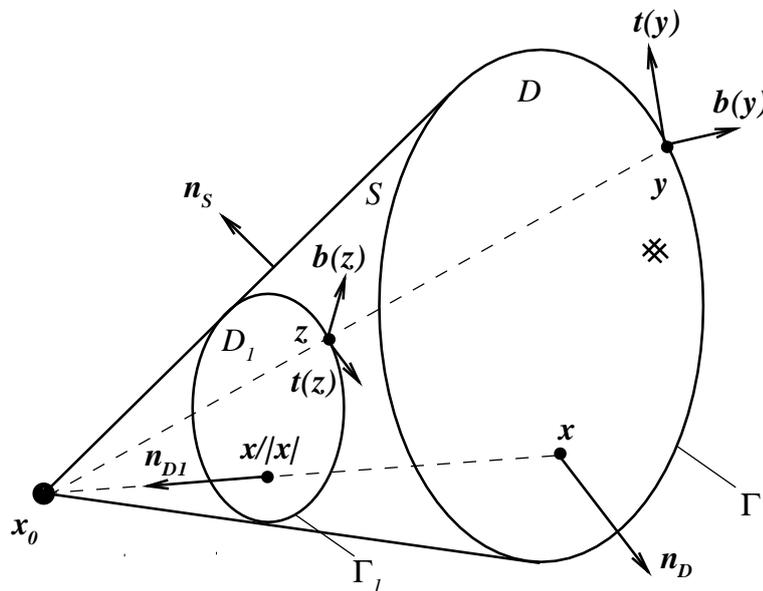


Figura 7 – Projeção do contorno Γ sobre a esfera unitária centrada em $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$.

Dessa forma, sendo D parte da superfície da gota, a grande dificuldade associada ao cálculo dupla dupla camada potencial consiste em determinar

$$\mathbf{I}^T = \int_D \mathcal{T}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (4.14)$$

Para obter uma formulação não singular para \mathbf{I}^T , consideremos o triádico auxiliar $\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \mathcal{T}(\mathbf{r}) + \mathbf{I}\mathcal{P}(\mathbf{r})$, tal que (Pozrikidis, 1992)

$$\int_{S_c} \mathcal{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (4.15)$$

em que S_c é uma superfície fechada. Assim como as propriedades descritas na Seção 2.4, a equação (4.15) está associada às propriedades de conservação do escoamento. Dessa maneira, estamos interessados em determinar $\mathbf{I}^H = \int_D \mathcal{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x})$, que pode ser reescrita como

$$\mathbf{I}^H = \int_{S_c} \mathcal{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - \int_S \mathcal{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_S(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - \int_{D_1} \mathcal{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{D_1}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (4.16)$$

A primeira integral da equação (4.16) anula-se por consequência da propriedade (4.15). Note ainda que $\mathbf{n}_S(\mathbf{x})$ é ortogonal a \mathbf{x} em S , de maneira que a segunda integral também vale zero. Além disso, para $\mathbf{x} \in D_1$ segue que $r = |\mathbf{x}| = 1$ e $\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_{D_1}(\mathbf{x}) = -1$, de modo que

$$\mathbf{I}^H = \int_{D_1} (2\mathbf{I} - 6\mathbf{x}\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = 2 \oint_{\Gamma_1} \mathbf{z}\mathbf{b}(\mathbf{z}) d\ell(\mathbf{z}), \quad (4.17)$$

em que $\mathbf{b}(\mathbf{z})$ é o vetor unitário normal à Γ_1 e tangente à D_1 . Note que a equação (4.17) já denota uma representação não singular para o cálculo das integrais sobre D_1 , sendo sua única limitação o fato de o pólo não poder pertencer ao contorno Γ_1 .

Para obter o resultado para a superfície tridimensional genérica D , sejam $\mathbf{z} = \mathbf{y}/|\mathbf{y}|$, $\mathbf{b}(\mathbf{z}) = (\mathbf{y} \times \mathbf{t}(\mathbf{y})) / |\mathbf{y} \times \mathbf{t}(\mathbf{y})|$ e $d\ell(\mathbf{z}) = |\mathbf{y} \times \mathbf{t}(\mathbf{y})| / |\mathbf{y}|^2$. Dessa forma, segue que

$$\mathbf{I}^H = \int_D \mathcal{H}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = 2 \oint_{\Gamma} \frac{\mathbf{y}(\mathbf{y} \times \mathbf{t}(\mathbf{y}))}{|\mathbf{y}|^3} d\ell(\mathbf{y}). \quad (4.18)$$

Por fim, consideremos a terceira integral a ser avaliada, $I^P = \int_D \mathcal{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D dS(\mathbf{x})$. Utilizando a mesma construção da Figura 7 para Γ_1 , D_1 e S temos que

$$I^P = \int_{S_c} \mathcal{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - \int_S \mathcal{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_S(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - \int_{D_1} \mathcal{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{D_1}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}). \quad (4.19)$$

De acordo com a propriedade (2.45), o resultado da primeira integral de (4.19) é c , e varia de acordo com a posição do pólo \mathbf{x}_0 em relação à superfície S_c . A segunda integral, por sua vez, torna-se nula pois $\mathbf{n}_S(\mathbf{x})$ é ortogonal a \mathbf{x} em S . Além disso, para $\mathbf{x} \in D_1$ tem-se que $\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_{D_1}(\mathbf{x}) = -1$ e $|\mathbf{x}| = 1$; então, usando a própria definição de $\mathcal{P}(\mathbf{r})$ é possível escrever

$$I^P = c + 2 \int_{D_1} dS(\mathbf{x}). \quad (4.20)$$

Como consequência da escolha de D_1 , há duas possibilidades para a posição do pólo: ou \mathbf{x}_0 está localizado fora do volume delimitado pela superfície fechada S_c , de maneira que $c = 0$; ou \mathbf{x}_0 pertence à superfície D , isto é, $\mathbf{x}_0 \in S_c$ com vetor unitário normal apontando para dentro

do volume delimitado por S_c , de modo que $c = -4\pi$. Note ainda que a integral descrita na equação (4.20) representa o ângulo sólido definido pelo pólo \mathbf{x}_0 e o contorno de D . Assim como para I^Q , a única limitação para a posição do pólo é que ele não deve estar localizado sobre o contorno de D_1 .

Com a finalidade de expressar a integral de superfície de (4.20) como uma integral de linha, consideremos um sistema de coordenadas esféricas $\mathbf{O}(r, \theta, \varphi)$, como mostra a Figura 8 a seguir. Nesse caso, \mathbf{a} é um vetor unitário arbitrário cuja origem coincide com a posição do pólo, isto é, $\mathbf{a} = (r = 1, \theta = 0)$. Note que o contorno de D_1 é $\Gamma_1 = \{r = 1, \theta = \theta(\varphi)\}$.

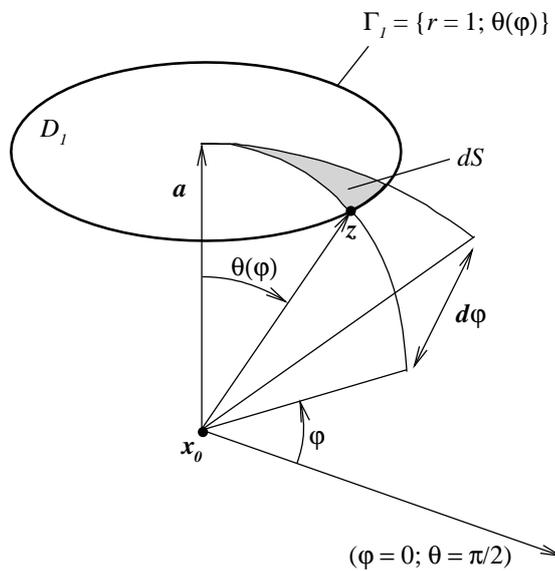


Figura 8 – Detalhes do sistema de coordenadas esféricas utilizadas para o cálculo de I^P .

De acordo com a montagem da Figura 8, segue que $|\mathbf{w}|^2 = 2(1 - \cos(\theta(\varphi)))$, em que $\mathbf{w} = \mathbf{z} - \mathbf{a}$. Assim, o elemento diferencial de superfície é dado por $dS = |\mathbf{w}|^2 \sin(d\varphi)/2 = (1 - \cos(\varphi))d\varphi$. Notando ainda que $\cos(\theta(\varphi)) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{z}$ e $d\varphi = (-\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{z})/\sin^2(\theta))d\ell(\mathbf{z})$, segue que

$$\int_{D_1} dS(\mathbf{x}) = \int_{\varphi} (1 - \cos(\theta(\varphi))) d\varphi = \oint_{\Gamma_1} \frac{-\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{z})}{1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{z}} d\ell(\mathbf{z}). \quad (4.21)$$

Por fim, a integral sobre Γ_1 pode ser escrita em função do contorno Γ a partir das mesmas relações utilizadas para passar de (4.17) para (4.18). Assim sendo, tem-se que

$$I^P = \int_D \mathcal{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_D(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = c - 2 \oint_{\Gamma} \frac{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{y} \times \mathbf{t}(\mathbf{y}))}{|\mathbf{y}| + (|\mathbf{y}| + \mathbf{a} \cdot \mathbf{y})} d\ell(\mathbf{y}). \quad (4.22)$$

Vale ressaltar que não há restrições para a posição do vetor \mathbf{a} sobre a esfera unitária. Todavia, se \mathbf{x}_0 estiver dentro de S_c e $-\mathbf{a} \in D_1$, a constante c deve ser acrescida de 8π para que a propriedade descrita pela equação (2.45) seja satisfeita.

Finalmente, a integral original do triádico $\mathcal{T}(\mathbf{r})$ sobre a superfície D pode ser expressa como $\mathbf{I}^T = \mathbf{I}^H - \mathbf{I}I^P$, em que \mathbf{I} é o tensor unitário de segunda ordem. Utilizando a formulação não singular, segue que

$$\mathbf{I}^T = 2 \left(\oint_{\Gamma} \frac{\mathbf{y}(\mathbf{y} \times \mathbf{t}(\mathbf{y}))}{|\mathbf{y}|^3} d\ell(\mathbf{y}) + \oint_{\Gamma} \frac{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{y} \times \mathbf{t}(\mathbf{y}))}{|\mathbf{y}| + (|\mathbf{y}| + \mathbf{a} \cdot \mathbf{y})} d\ell(\mathbf{y}) - \frac{c}{2} \right). \quad (4.23)$$

4.3 Solução analítica da formulação não singular

Na maior parte das aplicações do Método Integral de Contorno, as superfícies são discretizadas por elementos poligonais, de forma que o contorno de cada uma delas possa ser expresso como $C = \cup_i C_i = \cup_i [\mathbf{y}^i, \mathbf{y}^{i+1}]$, em que $[\mathbf{y}^i, \mathbf{y}^{i+1}]$ denota um segmento de reta entre os pontos \mathbf{y}^i e \mathbf{y}^{i+1} . Nesse sentido, a Figura 9 a seguir mostra a representação de um contorno C_i arbitrário definido por um segmento de reta em relação ao pólo \mathbf{x}_0 . Nesse caso, D é parte da superfície da gota e o pólo \mathbf{x}_0 está localizado sobre um dos nós obtidos pela discretização. Por outro lado, os pontos \mathbf{y}^i e \mathbf{y}^{i+1} não são nós da malha. De fato, e mantendo a referência da Figura 4, a contribuição de \mathbf{x}_c para $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0)$ é obtida, dessa vez, por integrais de linha consecutivas sobre o contorno da superfície que contém o ponto de controle de \mathbf{x}_c . Assim, os pontos \mathbf{y}^i e \mathbf{y}^{i+1} assumem duas posições distintas e alternadas: os baricentros \mathbf{x}_b de todos os elementos formados por \mathbf{x}_c e os pontos médios dos segmentos entre \mathbf{x}_c e seus nós vizinhos. Por fim, é possível concluir que para nós que participam de 5 ou 6 elementos, as integrais de superfície são computadas por meio de 10 ou 12 integrais de linha, respectivamente, realizadas sempre no sentido anti-horário com relação ao nó. Além disso, mesmo quando $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$, o contorno definido pelos segmentos \mathbf{y}^i e \mathbf{y}^{i+1} não contém o pólo, mantendo regularidade da formulação.

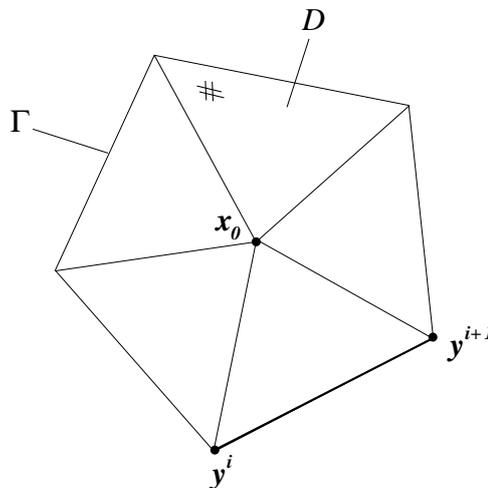


Figura 9 – Representação do caminho de integração adequado para a utilização da formulação não singular sobre a superfície da gota.

Consideremos agora detalhes sobre o caminho de integração Γ^i formado por \mathbf{y}^i e \mathbf{y}^{i+1} , como mostra a Figura 10. O segmento Γ_1^i é tal que $\Gamma_1^i = \{\mathbf{z} = \mathbf{y}/|\mathbf{y}|\}$. Além disso, o vetor \mathbf{a} determina os ângulos θ_i e θ_{i+1} com os vetores \mathbf{y}^i e \mathbf{y}^{i+1} , respectivamente.

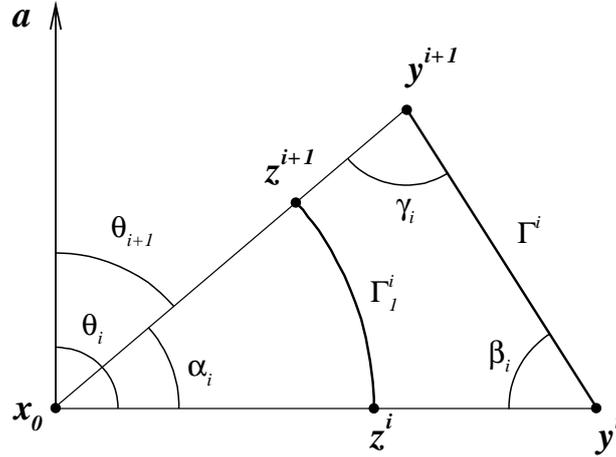


Figura 10 – Esquema representativo para obtenção da solução analítica da formulação não singular das camadas potenciais simples e dupla sobre um caminho definido por um segmento de reta.

Assim sendo, é possível mostrar que as integrais de linha da formulação não singular das camadas potenciais simples e dupla possuem soluções analíticas, de maneira que (Bazhlekov et al., 2004)

$$I^G = \int_{\Gamma^i} \frac{\mathbf{t}(\mathbf{y}) \times \mathbf{y}}{|\mathbf{y}|} d\ell(\mathbf{y}) = |\mathbf{y}^i| \sin(\beta_i) \log \left| \frac{(1 + \cos(\beta_i))(1 + \cos(\gamma_i))}{\sin(\beta_i) \sin(\gamma_i)} \right| \frac{\mathbf{y}^i \times \mathbf{y}^{i+1}}{|\mathbf{y}^i \times \mathbf{y}^{i+1}|}, \quad (4.24)$$

$$I^P = \int_{\Gamma_1^i} \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{z})}{1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{z}} d\ell(\mathbf{z}) = \frac{2\mathbf{a} \cdot (\mathbf{z}^i \times \mathbf{z}^{i+1})}{g_i |\mathbf{z}^i \times \mathbf{z}^{i+1}|} \left[\tan^{-1} \left[\frac{(1 - f_i) \tan\left(\frac{\alpha_i}{2}\right) + e_i}{g_i} \right] - \tan^{-1} \left(\frac{e_i}{g_i} \right) \right], \quad (4.25)$$

$$I^H = \int_{\Gamma_1^i} \mathbf{z} \mathbf{b}(\mathbf{z}) d\ell(\mathbf{z}) = \frac{(\mathbf{z}^i + \mathbf{z}^{i+1})(\mathbf{z}^i \times \mathbf{z}^{i+1})}{1 + \mathbf{z}^i \cdot \mathbf{z}^{i+1}}, \quad (4.26)$$

em que $e_i = [\cos(\theta_{i+1}) - \cos(\theta_i) \cos(\alpha_i)] / \sin(\alpha_i)$, $f_i = \cos(\theta_i)$ e $g_i = \sqrt{1 - e_i^2 - f_i^2}$.

É importante notar que embora as equações (4.24), (4.25) e (4.26) sejam válidas para contornos definidos por um segmento de reta, as integrais podem ser avaliadas sobre toda a superfície, desde que seja imposta uma orientação adequada para o sentido de integração, evitando a sobreposição de segmentos.

4.4 Validação da formulação não singular

Consideremos então um exemplo numérico com a finalidade de comparar os resultados produzidos pela formulação singular (baseada em integrais de superfície) e pela formulação não singular (baseada em integrais de linha). Nesse caso, seja D um triângulo equilátero de lados unitários definido pelos vértices \mathbf{A} , \mathbf{B} e \mathbf{C} . O triângulo está definido no plano $x = 0$ e seu centro geométrico está localizado sobre a origem de sistema de referência, de forma que $\mathbf{A}=(0, 0, -1/\sqrt{3})$, $\mathbf{B}=(0, 1/2, 1/\sqrt{12})$ e $\mathbf{C}=(0, -1/2, 1/\sqrt{12})$. O pólo \mathbf{x}_0 pode assumir qualquer posição ao longo de um eixo perpendicular ao triângulo e que passa pelo seu centro geométrico, isto é, $\mathbf{x}_0 = (r, 0, 0)$, em que $|r|$ é a distância do pólo ao triângulo.

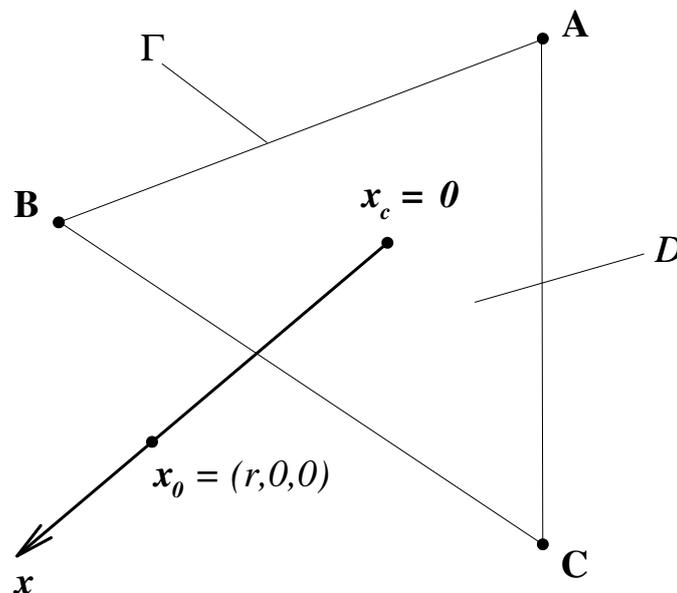


Figura 11 – Triângulo equilátero utilizado para validar a formulação não singular das camadas potenciais simples e dupla.

A Figura 12 a seguir mostra a primeira componente da simples camada potencial, I_1^G , em função da posição do pólo relativa ao centro do triângulo. Note que, nesse caso, as outras duas componentes de \mathbf{I}^G são identicamente nulas. Os resultados numéricos para formulação singular foram obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à integrais de superfície com uma varredura por nós, conforme descrito na Seção 3.5. Dessa maneira, o triângulo original D é dividido em N_Δ triângulos menores, e o resultado final é obtido pela contribuição das integração em cada uma das subdivisões. A solução exata, por sua vez, foi obtida pela aplicação da equação (4.24) aos três lados do triângulo original, consecutivamente.

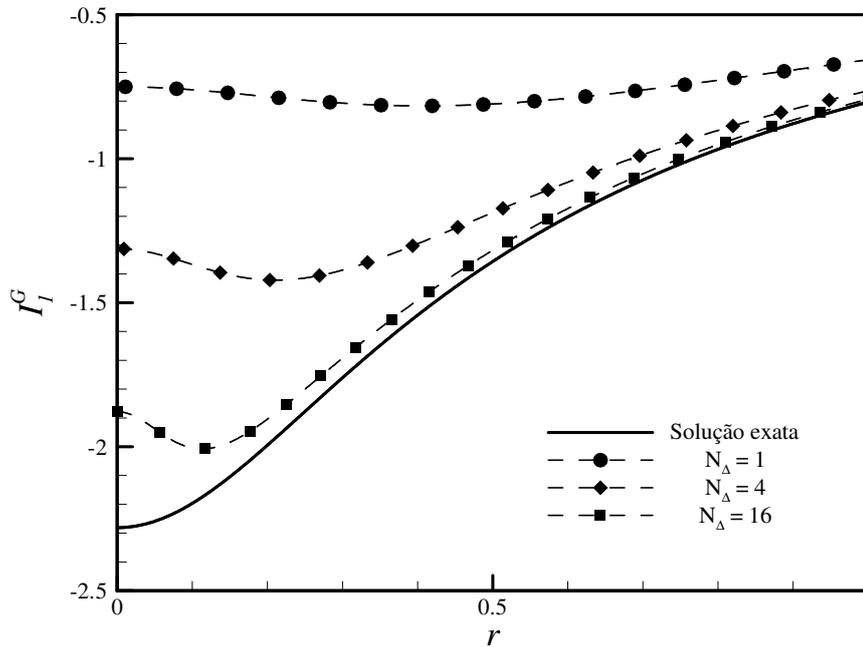


Figura 12 – Primeira componente de \mathbf{I}^G como função distância do pólo \mathbf{x}_0 à superfície D . Comparação entre a solução exata da formulação regular e resultados numéricos obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à formulação singular.

Nesse sentido, o teste verifica que os resultados produzidos pelos dois métodos convergem para o mesmo valor, contanto que o pólo esteja suficientemente afastado da superfície. Assim, nessas situações, mesmo a formulação singular produz resultados consistentes com aqueles obtidos pela solução analítica. Todavia, quando o pólo aproxima-se da superfície e r decresce, a integração de $\int_D \mathbf{g}(r) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x})$ pela Regra do Trapézio falha (tanto mais à medida que $r \rightarrow 0$). De fato, as inflexões nas proximidades de $r = 0$ caracterizam a singularidade do método nesse ponto. Mais que isso, a formulação singular não permite fazer $r = 0$ exatamente; isto é, o pólo \mathbf{x}_0 não pode assumir uma posição exatamente sobre a superfície D do triângulo. Por outro lado, a formulação baseada em integrais de linha permanece regular mesmo quando $\mathbf{x}_0 \in D$.

Outro resultado importante consiste em verificar o comportamento da formulação não singular baseada em integrais de linha quando associada à métodos numéricos de integração. Nesse sentido, consideremos regras de quadratura baseadas nas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas. Tais fórmulas baseiam-se em aproximar a integral sobre cada um dos lados do triângulo pela integral de um polinômio interpolado de grau n . O valor de n corresponde ao número de pontos da fórmula de quadratura (Press et al., 1992). Assim sendo, com $n = 1$ a função é aproximada por um segmento de reta; com $n = 2$, por um arco de parábola; e com $n = 3$, por um polinômio de terceiro grau. Essas variações são referenciadas na literatura como Regra

do Trapézio¹, Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson e Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson, respectivamente. Dessa forma, a Figura 13 compara a solução analítica de I^G com resultados numéricos obtidos pelas fórmulas de quadratura aplicadas à integral de linha da formulação regular dada em (4.12). Mais uma vez, considera-se apenas a primeira componente da simples camada potencial.

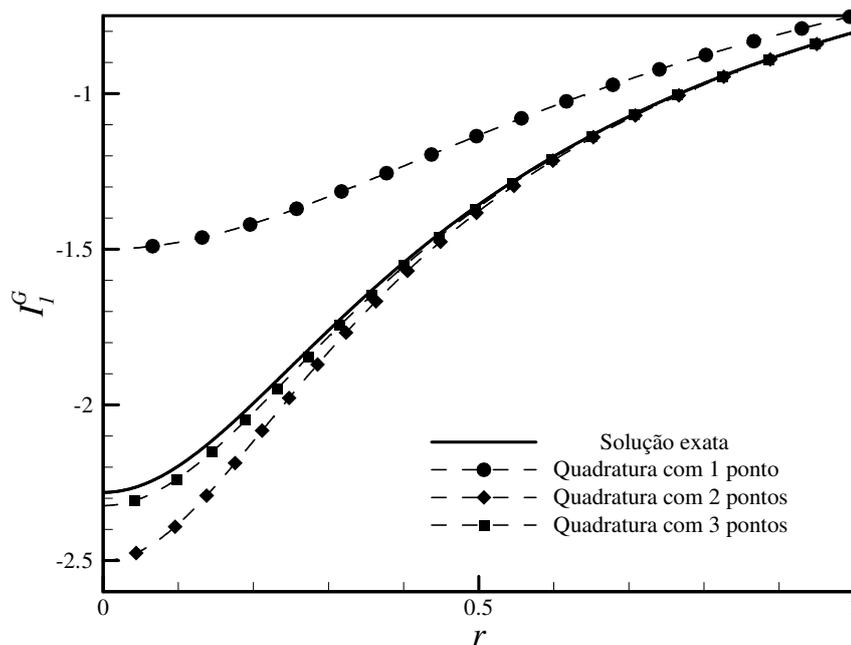


Figura 13 – Primeira componente de I^G como função distância do pólo \mathbf{x}_0 à superfície D . Comparação entre a solução exata da formulação regular e resultados numéricos obtidos pelas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas aplicada à formulação não singular.

Novamente é possível verificar que ambos os métodos convergem para o mesmo resultado quando \mathbf{x}_0 está suficientemente distante de D . Todavia, assim como para a Regra do Trapézio aplicada à formulação singular, a integração numérica da formulação regular da simples camada potencial também falha quando r aproxima-se de 0. Vale notar, contudo, que nesse caso não existem inflexões das curvas nas proximidades da origem, caracterizando a regularidade da formulação baseada em integrais de linha mesmo quando $r = 0$.

Ainda nesse sentido, o gráfico da Figura 14 a seguir mostra o erro relativo local R^G cometido pelas soluções numéricas quando comparadas com a solução exata em função de r . O refinamento da Regra do Trapézio para formulação é singular é especificado pelo número de triângulos N_Δ em que a superfície do triângulo original é dividida. Para a integração numérica das integrais de linha da formulação regular, considera-se o número n de pontos de quadratura utilizados nas Fórmulas de Newton-Cotes. Assim sendo, avaliando o comportamento do erro produzido pela Regra do Trapézio aplicada às integrais de superfície nas proximidades de $r = 0$,

¹ Essa técnica é distinta daquela aplicada à integrais de superfície.

fica evidente a singularidade do método nesse ponto. De fato, mesmo que a técnica numérica seja implementada com alto grau de refinamento, os erros numéricos apresentam altas taxas de crescimento nas proximidades da origem.

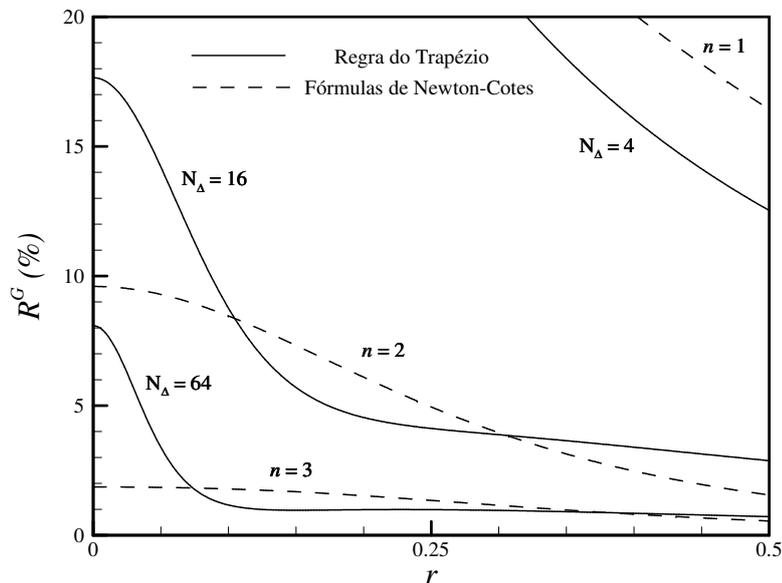


Figura 14 – Erro relativo cometido pelas soluções numéricas das formulações singular e não singular da simples camada potencial I^G .

Dessa maneira, é possível verificar que, dependendo da distância do pólo à superfície, qualquer uma das técnicas numéricas produz resultados consistentes com a solução exata do problema. De fato, para $r > 10^{-1}$ o desvio máximo cometido pela Regra do Trapézio com $N_\Delta = 64$ é de 1,2%; no caso das fórmulas de quadratura com 3 pontos de interpolação, esse valor cai para 1,8%.

Ainda é necessário realizar a mesma avaliação para as integrais associadas ao cálculo numérico da dupla camada potencial. Assim, os gráficos das Figuras 15 e 16 comparam a solução exata de I_{11}^H de I^P , respectivamente, com resultados numéricos obtidos a partir das duas formulações. De forma semelhante ao caso de I_1^G , nota-se que as duas técnicas numéricas produzem resultados consistentes contanto que o pólo esteja afastado o suficiente da superfície de integração. Todavia, ambas falham à medida que \mathbf{x}_0 aproxima-se de D , fazendo com que $r \rightarrow 0$. Novamente é possível identificar as inflexões que a Regra do Trapézio aplicada à formulação singular apresenta nas proximidades do ponto $r = 0$, evidenciando a singularidade do método nesse ponto. As fórmulas de quadratura aplicadas sobre a formulação baseada em integrais de linha, por sua vez, permanecem regulares mesmo quando o pólo \mathbf{x}_0 está localizado exatamente sobre a superfície D do triângulo.

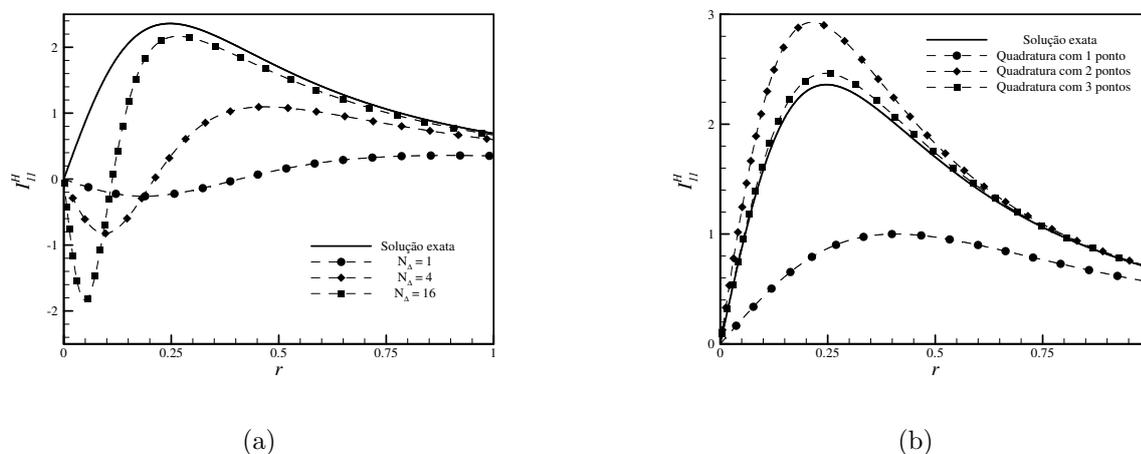


Figura 15 – Primeira componente de I^H como função da distância relativa do pólo à superfície. Em (a), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à formulação singular; em (b), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pelas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas aplicadas à formulação regular.

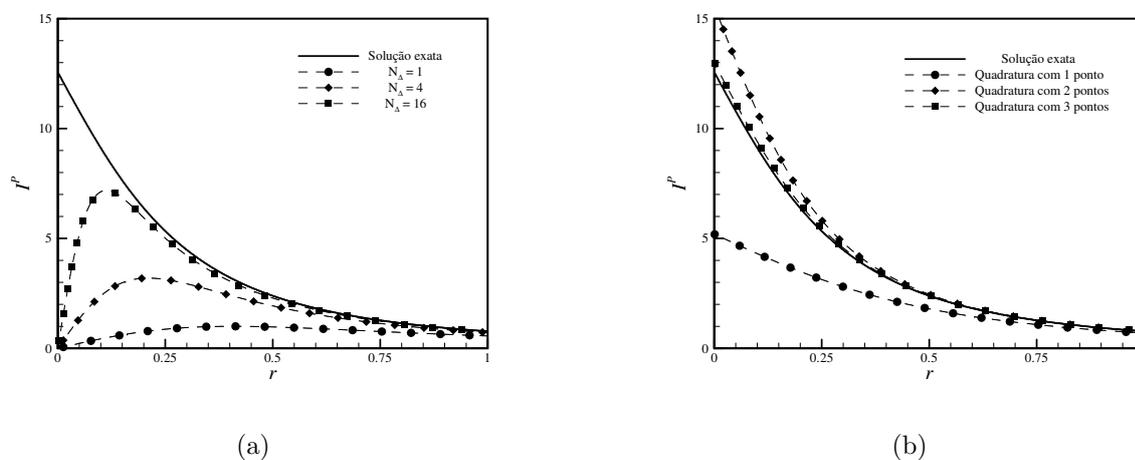


Figura 16 – Escalar I^P como função da distância relativa do pólo à superfície. Em (a), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à formulação singular; em (b), comparação entre a solução exata e resultados numéricos obtidos pelas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas aplicadas à formulação regular.

Por fim, os gráficos da Figura 17 mostram os erros relativos R^H e R^P associados ao cálculo de I^H e I^P , respectivamente, como função de r . Avaliando o comportamento do erro local produzido pela Regra do Trapézio quando $r \rightarrow 0$, fica evidente, mais uma vez, a singularidade do método baseado em integrais de superfície nesse ponto. De fato, à medida que o pólo aproxima-se da superfície de integração, a taxa de crescimento do desvio relativo cometido por esse método em relação à solução exata aumenta consideravelmente.

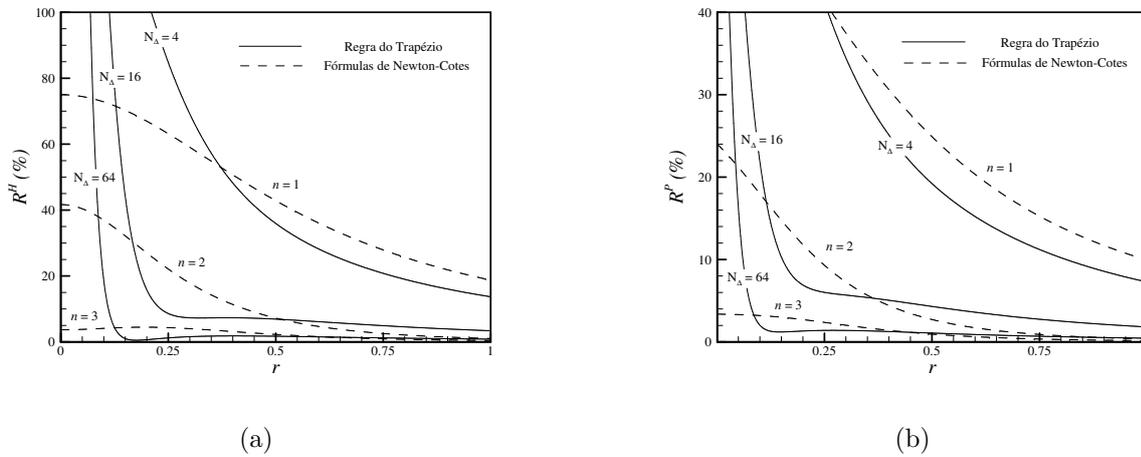


Figura 17 – Erro relativo cometido pelas soluções numéricas das formulações singular e não singular para a dupla camada potencial. Em (a), para I^H ; em (b) para I^P .

Vale destacar que os erros numéricos associados ao cálculo de I^H são consideravelmente maiores que os erros associados a I^P . Todavia, caso consideremos pontos suficientemente distantes da origem, as duas técnicas numéricas produzem resultados consistentes para os dois casos. Para I^H e considerando $r > 10^{-1}$, o desvio máximo cometido pela Regra do Trapézio com $N_\Delta = 64$ é de 18,6%; utilizando 3 pontos de quadratura nas Fórmulas de Newton Cotes esse valor é reduzido para 4,1%. No caso de I^P e considerando as mesmas distâncias e refinamentos numéricos, os desvios máximos são da ordem de 2,0% e 3,2%, respectivamente.

Por fim, e considerando as medidas de erro relativo entre os métodos numéricos adotados e a solução exata das camadas potenciais simples e dupla, bem como o esforço em termos de tempo computacional necessário para as simulações utilizando cada uma das formulações, conclui-se que é viável considerar suas implementações apenas em termos de soluções numéricas. De fato, mesmo para gotas com $\lambda = 1$, isto é, em que apenas a contribuição da simples camada potencial é significativa, a diferença em termos do tempo computacional exigido nas simulações é considerável. Embora a quantidade de iterações para completar as simulações seja praticamente o mesmo em todos os casos de capilaridade, verifica-se grande diferença no tempo requerido por cada iteração para o cálculo do vetor velocidade sobre a superfície da gota. No caso particular de escoamentos com $Ca = 0, 10$ e considerando gotas refinadas por malhas com $f = 6$, a implementação da Regra do Trapézio sem qualquer refinamento local consome apenas 2,80% do tempo que seria necessário para utilizar a solução analítica da formulação regular, considerando as mesmas condições

5 Teorias de pequenas deformações

Emulsões de altas razões de viscosidades são muito comuns em diversos processos industriais, especialmente aqueles relacionados à extração de petróleo em águas profundas, preparos farmacológicos e alimentos industrializados. Além disso, emulsões de água e óleo – muito comuns na prática de laboratório – são, em geral, formadas por gotas com altas razões de viscosidades. Assim sendo, é de fundamental importância a determinação da forma de uma gota em escoamentos cisalhantes em regimes de pequenas deformações. Para tanto, é viável utilizar métodos assintóticos que consideram pequenas variações em relação ao formato esférico original, sendo de especial interesse o limite de pequenas deformações em altas razões de viscosidades. Nesse contexto, o presente capítulo aborda teorias assintóticas de primeira ordem para determinação da forma da gota.

5.1 Equação evolutiva para a forma da gota

Considere que a fase contínua de uma emulsão seja constituída por um fluido Newtoniano de viscosidade μ . Imersa na fase contínua, há uma gota, também de fluido Newtoniano, de viscosidade $\lambda\mu$. Levando-se em consideração as dimensões típicas de gotas em emulsões diluídas e as escalas características já discutidas no Capítulo 1, considera-se que o escoamento na escala das gotas seja livre dos efeitos de inércia ($Re_a \ll 1$) e que as gotas sejam não Brownianas ($Pe \gg 1$). A Figura 18 mostra uma representação esquemática do escoamento na escala da gota.

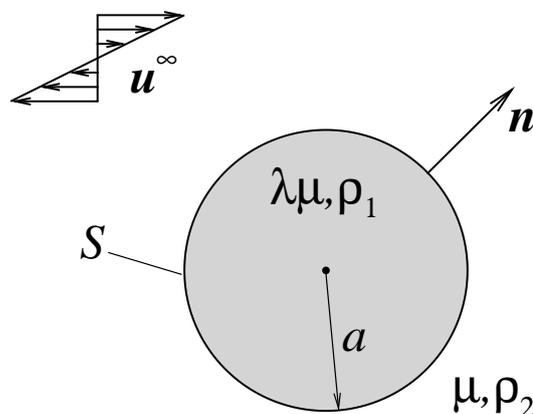


Figura 18 – Representação do escoamento na escala das gotas.

Uma série de Taylor nas vizinhanças da gota aproxima o escoamento não perturbado por

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{0}) + \nabla\mathbf{u}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2}\nabla\nabla\mathbf{u}(\mathbf{0}) : \mathbf{x}\mathbf{x} + \dots \quad (5.1)$$

A equação (5.1) pode ser adimensionalizada de acordo com

$$\tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{a}, \quad \tilde{t} = \dot{\gamma}_c t, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{a\dot{\gamma}_c}, \quad \text{e} \quad \tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\nabla\mathbf{u}}{\dot{\gamma}_c}. \quad (5.2)$$

Assim, sendo $\dot{\gamma}_c = U_\ell/\ell$ a taxa de cisalhamento característica do escoamento, em que U_ℓ e ℓ são escalas características de velocidade e comprimento, respectivamente, segue que

$$\tilde{\mathbf{u}}^\infty(\tilde{\mathbf{x}}) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{0}) + \left(\frac{a}{\ell}\right)\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{0}) \cdot \tilde{\mathbf{x}} + \frac{1}{2}\left(\frac{a}{\ell}\right)^2\tilde{\nabla}\tilde{\nabla}\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{0}) : \tilde{\mathbf{x}}\tilde{\mathbf{x}} + \dots \quad (5.3)$$

Desde que $(a/\ell) \ll 1$, despreza-se os termos $\mathcal{O}(a^2/\ell^2)$, de sorte que

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) \sim \mathbf{u}(\mathbf{0}) + \nabla\mathbf{u}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{x}. \quad (5.4)$$

Na ausência de forças de campo e de inércia atuando sobre a gota, decorre da Segunda Lei de Newton que a força hidrodinâmica do escoamento também é nula. De fato, como observado na Seção 2.1, a força hidrodinâmica em escoamentos de Stokes é proporcional à velocidade relativa entre a partícula e o fluido, isto é, $\mathbf{F}_H \propto \mathbf{U} - \mathbf{u}(\mathbf{0})$, em que \mathbf{U} e $\mathbf{u}(\mathbf{0})$ são as velocidades da gota e do escoamento na posição ocupada pela gota, respectivamente. Como $\mathbf{F}_H \approx \mathbf{0}$, segue que $\mathbf{U} \approx \mathbf{u}(\mathbf{0})$, indicando que a gota é convectada pelo escoamento do fluido ambiente. Em um sistema de referência que translada com a partícula, $\mathbf{U} = \mathbf{0}$; assim, $\mathbf{u}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ e o campo de velocidade do escoamento não perturbado pode ser escrito como (Stone, 1994)

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) = \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}, \quad (5.5)$$

ou ainda, $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) = (\mathbf{E} + \mathbf{W}) \cdot \mathbf{x}$, em que \mathbf{E} e \mathbf{W} são as partes simétrica e antissimétrica do tensor gradiente de velocidade, respectivamente.

Assim sendo, deseja-se examinar a distorção de primeira ordem causada pelo escoamento \mathbf{u}^∞ sobre uma gota viscosa livre de inércia. Para tanto, é necessário obter uma equação para descrever a superfície da gota S durante o escoamento. Em um contexto de pequenas deformações, é possível mostrar que

$$S(t) = r(t) - a \left(1 + \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}}{r^2} + \frac{3}{2} \frac{\mathbf{x}\mathbf{x} : \mathbf{A}\mathbf{A} : \mathbf{x}\mathbf{x}}{r^4} \right), \quad (5.6)$$

em que $r(t) = a(1 + e)$ é o raio da gota modificado pela elongação normal e , $r = \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}}$ e \mathbf{A} é o tensor distorção da gota. Mostra-se ainda que \mathbf{A} é positivo, definido e simétrico, podendo ser escrito como $\mathbf{A} = \epsilon\mathbf{B}$, em que $\|\mathbf{B}\| \sim 1$. O parâmetro ϵ tem diferentes definições dependendo do limite assintótico em que se trabalha. No caso de escoamentos fracos, isto é, em que as taxas de

cisalhamento são pequenas em relação à tensão superficial, ϵ pode ser identificado como sendo o número de capilaridade. No limite de altas razões de viscosidades, tal que $\lambda \gg 1$, tem-se que $\epsilon = \lambda^{-1}$. Nesse caso, $\|\mathbf{A}\| \sim \lambda^{-1} \ll 1$, de sorte que a deformação causada pelo escoamento na gota é pequena. À medida que avançamos no limite de $\lambda \gg 1$, a gota aproxima-se de um corpo rígido imerso no escoamento, tendendo a girar rapidamente com velocidade angular próxima da do escoamento \mathbf{u}^∞ . Dessa forma, antes que as deformações sofridas pela gota no quadrante extensional do cisalhamento tornem-se significativas, a partícula gira e passa para o quadrante compressional. Alternativamente, sendo $\dot{\gamma}_c$ uma taxa de cisalhamento característica do escoamento, verifica-se que o tempo para gota deformar, $\tau_d = (1 + \lambda)/\dot{\gamma}_c$, é muito maior que o tempo de rotação, $\tau_\omega = \dot{\gamma}_c^{-1}$. De fato, a razão entre esses dois tempos característicos é $\tau_d/\tau_\omega = (1 + \lambda)$, ou, no caso de $\lambda \gg 1$, simplesmente $\tau_d/\tau_\omega \approx \lambda$. Esse processo da origem a um mecanismo de restauração da forma da gota, evitando que as deformações cresçam em escoamentos cisalhantes, mesmo em altos números de capilaridade (Rallison, 1980). Vale notar, contudo, que esse mecanismo só está presente em escoamentos rotacionais, já que baseia-se na rotação da gota com vorticidade próxima da do escoamento não perturbado.

O tensor distorção \mathbf{A} define a geometria da gota. Sendo assim, para determinar a evolução temporal da distorção, utiliza-se a condição de contorno cinemática na superfície da partícula, tal que $DS(t)/Dt = 0$. Essa condição deriva diretamente da hipótese do contínuo, tal que uma superfície material é sempre constituída das mesmas partículas durante todo o movimento. Assim sendo, e considerando apenas os termos $\mathcal{O}(1)$ e $\mathcal{O}(\epsilon)$ da equação (5.6) é possível mostrar que

$$\mathbf{x} \cdot \frac{\mathfrak{D}\mathbf{A}}{\mathfrak{D}t} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{u}^s, \quad (5.7)$$

em que $\mathfrak{D}(\mathbf{A})/\mathfrak{D}t = D\mathbf{A}/Dt - \mathbf{W} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{W}$ é a derivada corrotativa de Jaumman. Esse operador mede a taxa de variação de determinada grandeza a partir de um referencial que translada e rotaciona junto com a partícula. Além disso, \mathbf{u}^s é o campo de velocidade sobre a superfície da gota, o qual pode ser obtido pela superposição de funções harmônicas esféricas (Lamb, 1932), conforme discutido na Seção 2.1.

Considerando uma aproximação de primeira ordem, os termos envolvidos no cálculo das condições de contorno são todos avaliados sobre a superfície da gota não deformada. Nesse caso, é necessário impor a continuidade de velocidades e de tensões tangenciais através da superfície, bem como o salto de tensões normais devido à tensão superficial. A única exceção consiste no cálculo da curvatura da superfície, o qual considera a gota com um pequeno desvio da forma esférica (Schowalter et al., 1968). Assim sendo, uma equação evolutiva para o tensor distorção, já em termos adimensionais, pode ser escrita como (Oliveira & Cunha, 2011)

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = Ca_\lambda \mathbf{W} \cdot \mathbf{A} - Ca_\lambda \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} + \frac{5}{2\lambda} Ca_\lambda \mathbf{E} - c\mathbf{A}, \quad (5.8)$$

em que $c = 20/19$, $Ca_\lambda = \dot{\gamma}_c \lambda \mu a / \sigma = \lambda Ca$ é o número de capilaridade definido em função da

viscosidade da gota e σ é o seu coeficiente de tensão superficial. Do ponto de vista matemático, a equação (5.8) é um sistema de equações diferenciais ordinárias linear. A presença dos termos $Ca_\lambda \mathbf{W} \cdot \mathbf{A}$ e $Ca_\lambda \mathbf{A} \cdot \mathbf{W}$ faz com que esse sistema seja, em geral, acoplado, requerendo técnicas de diagonalização para obter sua solução. Fisicamente, esses termos estão associados à rotação da gota devido à ação da vorticidade do escoamento. Assim, as deformações ficam restritas a pequenos desvios da forma esférica, mesmo em altas taxas de cisalhamento. Além disso, o termo $5Ca_\lambda \mathbf{E}/(2\lambda)$ representa a deformação da gota pela ação do escoamento não perturbado, enquanto $c\mathbf{A}$ é um termo de relaxação da forma da gota pela ação da tensão superficial.

Vale comentar, mais uma vez, que o número de capilaridade é um grupo adimensional definido como a razão entre um tempo característico de relaxação pela tensão superficial, $t_\sigma \sim \lambda\mu a/\sigma$, e um tempo característico do escoamento não perturbado, $t_\infty \sim 1/\dot{\gamma}_c$. Assim, Ca_λ é um parâmetro equivalente ao número de Deborah, o qual representa a razão entre um tempo característico de relaxação do material um tempo representativo do escoamento (Bird et al., 1987). Além disso, o número de capilaridade pode ser interpretado como a taxa de cisalhamento do escoamento adimensionalizada por t_σ .

5.2 Deformação de Taylor

Em um trabalho pioneiro, Taylor (1934) define uma quantidade associada à geometria da gota em termos dos semi-eixos de sua projeção em um plano paralelo à direção do escoamento imposto sobre ela, como mostra Figura 19a. A Figura 19b, por sua vez, mostra a orientação da gota – descrita pelo ângulo θ – em relação ao escoamento não perturbado. Os vetores \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 representam as direções dos eixos x e y do plano definido na figura. Nesse caso, o escoamento não perturbado é $\mathbf{u}^\infty = u^\infty \mathbf{e}_1$.

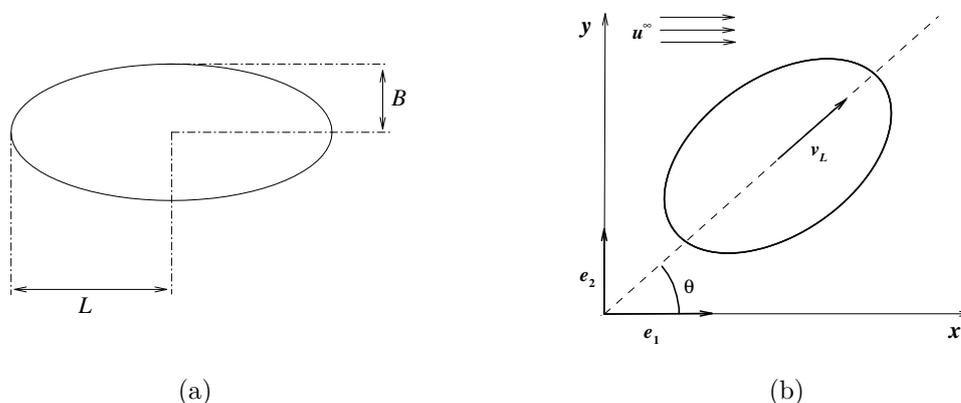


Figura 19 – Esquema representativo das medidas de deformação da gota. Em (a), os semi-eixos utilizados na medida de deformação de Taylor; em (b), a orientação da gota em relação ao escoamento.

Dessa maneira, Taylor (1934) define

$$D_T = \frac{L - B}{L + B}. \quad (5.9)$$

Note que para uma gota de formato esférico, tem-se $D_T = 0$. Por outro lado, à medida que sua superfície deforma-se, $D_T \rightarrow 1$.

Para o cálculo da deformação de Taylor a partir de uma superfície discretizada, o procedimento inicia-se com a determinação da orientação da gota em relação ao escoamento. De forma geral, o tensor de inércia da gota pode ser calculado como

$$\mathcal{D} = \frac{1}{5} \int_S [(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})\mathbf{I} - \mathbf{x}\mathbf{x}](\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}) dS. \quad (5.10)$$

Dessa maneira, o menor autovalor de \mathcal{D} está associado à direção que oferece menor resistência à rotação. Portanto, seu autovetor é paralelo ao vetor unitário \mathbf{v}_L mostrado na Figura 19b. Assim, a orientação da gota pode ser obtida como $\theta = \cos^{-1}(\mathbf{v}_L \cdot \mathbf{e}_1)$. Uma vez determinada a orientação da gota, a direção do semi-eixo associado ao comprimento B pode ser obtida diretamente por $\mathbf{v}_B = \mathbf{v}_L \times \mathbf{e}_3$, em que $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2$ é o vetor unitário na direção normal ao plano da Figura 19b. Finalmente, para determinação de L e B é necessário realizar uma pesquisa sequencial sobre todos os pontos da malha, buscando aqueles cujas projeções no plano do escoamento nas direções \mathbf{v}_L e \mathbf{v}_B são as maiores.

5.3 Emulsão diluída em baixos números de capilaridade

No caso específico de emulsões diluídas em regimes de baixos números de capilaridade e supondo gotas inicialmente esféricas, o modelo dado pela equação (5.8) fica modificado em alguns aspectos. O parâmetro pequeno da análise é o número de capilaridade, Ca , e não mais o inverso da razão de viscosidades, λ^{-1} . Assim, o número de capilaridade representativo desse tipo de escoamento é Ca , e não $Ca_\lambda = \lambda Ca$. Dessa maneira, um modelo constitutivo para o tensor distorção de emulsões diluídas em regimes de baixos números de capilaridade pode ser escrito como (Oliveira & Cunha, 2011)

$$\mathbf{A} = C_1 Ca \mathbf{E} (1 - e^{-C_2 t}), \quad (5.11)$$

em que \mathbf{E} é o tensor taxa de deformação e

$$C_1 = \frac{19\lambda + 16}{8(\lambda + 1)} \quad \text{e} \quad C_2 = \frac{40(\lambda + 1)}{(19\lambda + 16)(2\lambda + 3)} \quad (5.12)$$

são constantes e dependem apenas da razão de viscosidades da fase dispersa e contínua. Além disso, tomando apenas a resposta em regime permanente, obtém-se $\mathbf{A} = C_1 Ca \mathbf{E}$.

Ainda para emulsões diluídas em baixos números de capilaridade, e conhecendo-se os autovalores e autovetores do tensor \mathbf{A} , $\{\alpha_i, \mathbf{v}_i\}$, é possível determinar a deformação e a

orientação da gota em relação ao escoamento. Da equação (5.6) adimensionalizada pelo raio da gota não deformada, segue que $r = 1 + \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$. Além disso, sendo $\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}_i = \alpha_i \mathbf{v}_i$ com $\mathbf{x} = \mathbf{v}_i$, segue que $r = 1 + \alpha_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i$. Assim, desde que $\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = 1$, tem-se que $r = 1 + \alpha_i$ na direção dos autovetores de \mathbf{A} . No caso de um escoamento cisalhante simples, em que $\mathbf{E} = (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1)/2$, e desprezando-se os transientes iniciais, segue que $\{\alpha_1, \mathbf{v}_1\} = \{C_1 Ca/2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2\}$ e $\{\alpha_2, \mathbf{v}_2\} = \{-C_1 Ca/2, -\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2\}$. O ângulo θ entre a gota e a direção do escoamento é dado por $\theta = \cos^{-1}(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1 / \|\mathbf{v}_1\|) = \pi/4$, recuperando o resultado de Taylor (1934). Além disso, vale notar que a inclinação da gota em relação ao escoamento é constante e independente do tempo. Por fim, considerando os autovalores de \mathbf{A} , conclui-se que $L = 1 + \alpha_1$ e $B = 1 + \alpha_2$. Assim sendo, a deformação de Taylor para esse caso é $D_T = C_1 Ca/2$, ou ainda,

$$D_T = \frac{19\lambda + 16}{16\lambda + 16} Ca, \quad (5.13)$$

recuperando o resultado de Taylor (1934). Além disso, a equação (5.13) mostra que em regimes de baixos números de capilaridade, a deformação de Taylor é uma função linear do número de capilaridade. Esses resultados são válidos apenas para regimes em baixas taxas de cisalhamento, visto que decorrem de uma teoria de pequenas deformações $\mathcal{O}(Ca)$.

5.4 Emulsão diluída de altas razões de viscosidades

Voltando ao contexto de emulsões de altas razões de viscosidades, aplica-se o modelo descrito pela equação (5.8). Além disso, para escoamentos cisalhantes simples, segue que os tensores taxa de deformação e vorticidade são $\mathbf{E} = (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1)/2$ e $\mathbf{W} = (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1)/2$, respectivamente. Assim sendo, resolvendo a equação evolutiva para \mathbf{A} e tomando o limite $t \rightarrow \infty$ para obter a resposta permanente, segue que (Oliveira & Cunha, 2011).

$$\mathbf{A} = \frac{5}{4\lambda} \frac{Ca_\lambda}{(c^2 + Ca_\lambda^2)} \begin{bmatrix} Ca_\lambda & c \\ c & -Ca_\lambda \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

Nesse caso, os autovetores e autovalores de \mathbf{A} são

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{5}{4\lambda} \frac{Ca_\lambda}{\sqrt{c^2 + Ca_\lambda^2}} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_1 = \left[(Ca_\lambda/c) + \sqrt{(Ca_\lambda/c)^2 + 1} \right] \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \\ \alpha_2 &= -\frac{5}{4\lambda} \frac{Ca_\lambda}{\sqrt{c^2 + Ca_\lambda^2}} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_2 = \left[(Ca_\lambda/c) - \sqrt{(Ca_\lambda/c)^2 + 1} \right] \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Assim, a deformação de Taylor pode ser escrita como $D_T = \frac{5}{4\lambda} \frac{Ca_\lambda}{\sqrt{c^2 + Ca_\lambda^2}}$. Dessa forma, infere-se que no limite $Ca_\lambda \rightarrow \infty$, segue que $D_T \rightarrow 5/(4\lambda)$. Para orientação da gota, se $Ca_\lambda \rightarrow 0$,

então $\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2$ e $\theta \rightarrow \pi/4$. Alternativamente, se $Ca_\lambda \rightarrow \infty$, tem-se $\mathbf{v}_1 \rightarrow (2Ca_\lambda/c)\mathbf{e}_1$, tal que $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{e}_1 / \|\mathbf{v}_1\| \rightarrow 1$; assim, $\theta \rightarrow 0$. Sendo assim, gotas de altas razões de viscosidade sujeitas à cisalhamentos simples orientam-se a 45° com relação a \mathbf{e}_1 em baixos números de capilaridade. À medida que a taxa de cisalhamento aumenta, a partícula deforma-se e alinha-se na direção do escoamento.

Além da deformação típica definida por Taylor, é possível definir duas outras medidas de deformação para monitorar a geometria da gota,

$$D_1 = A_{12} \quad \text{e} \quad D_2 = \frac{A_{11} - A_{22}}{2}. \quad (5.16)$$

Note que essas medidas dependem apenas das componentes do tensor distorção da gota, estando intrinsecamente ligadas ao comportamento reológico da emulsão. Além disso, vale notar que D_2 e D_T relacionam-se por $D_2 = (4\lambda/5)D_T^2$. Destaca-se ainda que esses resultados decorrem de uma teoria de pequenas deformações $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$, sendo válidos para emulsões com gotas com altas razões de viscosidades escoando em regimes de cisalhamento arbitrário. Nesse sentido, as curvas da Figura 20 mostram o comportamento da geometria da superfície de gota de alta razão de viscosidade em função do número de capilaridade. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 20$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$.

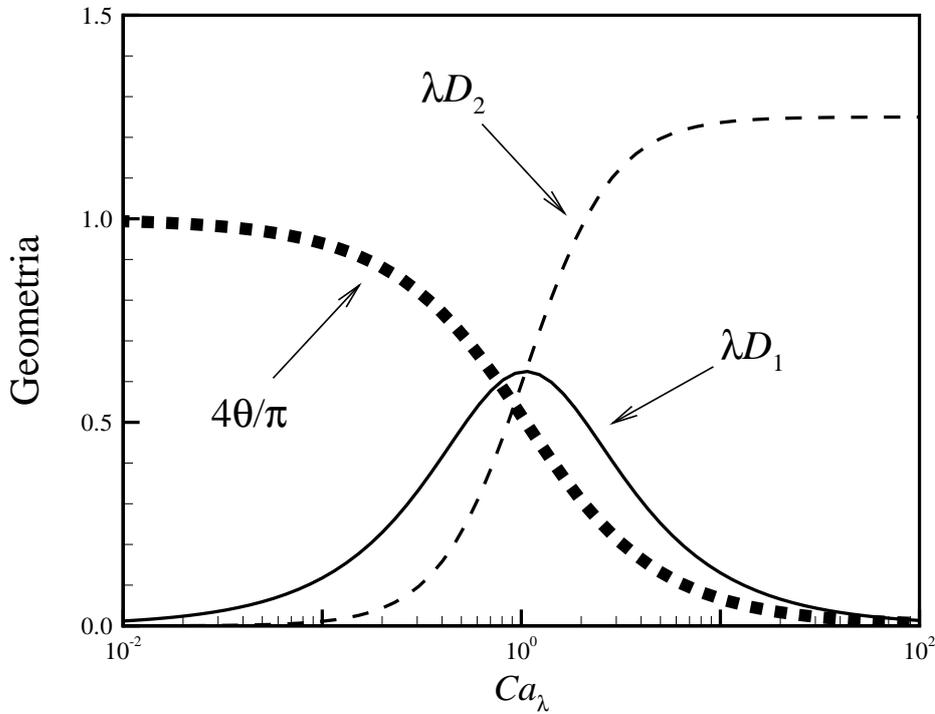


Figura 20 – Medidas da geometria de uma gota de alta razão de viscosidades previstas pela teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 20$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$.

Como consequência direta da deformação e orientação de gotas com altas razões de viscosidades em relação ao número de capilaridade, verifica-se que emulsões diluídas desse tipo apresentam comportamento não linear. O fato da gota deformar-se e alinhar-se na microescala do escoamento induz uma anisotropia de tensões, provocando o aparecimento de efeitos elásticos. Além disso, o escoamento no interior da gota deformada tende a facilitar o fluxo do fluido ambiente nas vizinhanças de sua superfície, promovendo um efeito pseudo-plástico. Mais detalhes sobre os efeitos não Newtonianos e sobre o comportamento reológico de uma emulsão com gotas de alta razão de viscosidades vista como um fluido contínuo equivalente são descritos por Oliveira & Cunha (2011).

Por fim, vale ressaltar que teorias assintóticas de segunda ordem, isto é, teorias $\mathcal{O}(\lambda^{-2})$, também podem ser exploradas. Nesses casos, as condições de contorno de velocidade e tensão são aplicadas sobre a superfície da gota deformada. Assim, no cálculo do campo de velocidade obtido pela solução de Lamb (1932), aplica-se as condições de contorno em $r = a(1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{n})$, e não em $r = a$, em que a é o raio da gota esférica. Este procedimento foi realizado de maneira generalizada por Barthès-Biesel & Acrivos (1973) e é discutido em detalhes para diversos tipos de escoamentos por Oliveira (2007).

6 Resultados numéricos e discussões

Neste capítulo serão apresentados e discutidos os principais resultados numéricos obtidos neste trabalho. Inicialmente, verifica-se a condição de incompressibilidade da formulação avaliando o fluxo de massa espúrio através da superfície de uma gota isolada. Considerando o escoamento incompressível, o fluxo de massa pode ser interpretado como uma medida do erro global do método associado ao cálculo do campo de velocidade sobre a gota, servindo de base para comparação entre suas formulações singular e regular para diferentes valores de λ e Ca . Dessa maneira, é possível definir em quais condições do escoamento é mais viável utilizar cada uma das formulações do Método Integral de Contorno. Além disso, apresenta-se um estudo de convergência de malha, visando simular os resultados que seriam obtidos no limite termodinâmico da discretização, de sorte que a gota fosse representada por uma superfície perfeitamente contínua. Então, as medidas de deformação de Taylor e baseadas no tensor distorção da superfície são avaliadas ao longo do escoamento, considerando tanto a formulação regular quanto a formulação singular. Por fim, para validar o código desenvolvido para simulações de gotas de baixas, moderadas e altas razões de viscosidades, os resultados numéricos são comparados com as teorias assintóticas de pequenas deformações $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ e $\mathcal{O}(Ca)$ apresentadas e com dados experimentais disponíveis na literatura.

6.1 Fluxo de massa

A análise Lagrangeana da formulação e a condição de incompressibilidade do modelo, dada por $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, garantem que o volume das partículas fluidas (incluindo uma gota inteira) se conservam. Dessa forma, embora a gota deforme sob ação cisalhamento, seu volume e sua massa total devem permanecer constantes. Contudo, os procedimentos numéricos associados ao método integral para o cálculo do campo de velocidade e do vetor normal unitário à cada ponto de controle sobre a superfície da gota podem provocar desvios dessa condição. Assim sendo, o fluxo de massa líquido através da gota pode ser interpretado como uma medida do erro global associado ao método utilizado para o cálculo de \mathbf{u} . Para avaliar essa condição, consideremos o fluxo de massa líquido através da superfície da gota, dado por

$$\Psi = \int_S (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS. \quad (6.1)$$

Note que a determinação do fluxo de massa através da gota envolve a integração do produto $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ sobre todos os nós de sua superfície. Dessa maneira, o procedimento numérico para avaliação de

Ψ consiste em uma varredura por nós sobre toda a malha, de forma semelhante àquela descrita na Seção 3.5.

Nesse sentido, consideremos os resultados para Ψ apresentados na Figura 21 a seguir. Os campos de velocidade foram calculados numericamente considerando as duas formulações. No caso da formulação singular, utilizou-se a Regra do Trapézio sem qualquer refinamento, de modo que a integração foi realizada diretamente sobre a superfície de cada um dos elementos da malha, isto é, $N_{\Delta} = 1$; no caso da formulação não singular, utilizou-se a Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson, definindo uma regra de quadratura de três pontos. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 2,0$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$. Além disso, considerou-se casos distintos para o número de capilaridade, buscando regimes de grandes e moderadas deformações.

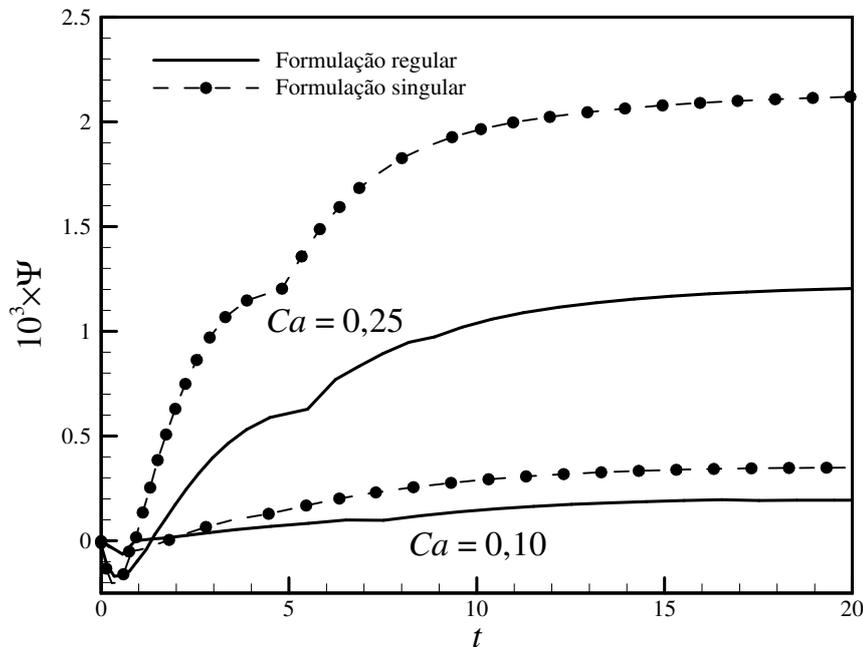


Figura 21 – Fluxo de massa através da superfície da gota para campos de velocidade calculados numericamente pelas formulações singular e não singular. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 2,0$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$.

De acordo com a Figura 21, é possível verificar que em todas as situações o valor de Ψ sofre um discreto decréscimo inicial; então, cresce com o tempo até estabilizar-se em um valor positivo Ψ_p . Note que, para essa situação, a utilização da formulação regular para o vetor velocidade produz valores menores para o fluxo de massa através da superfície da gota. Assim, quando comparada à formulação singular, a formulação não singular baseada em integrais de linha produz resultados mais consistentes com aqueles esperados do ponto de vista teórico. Além disso, vale destacar que o aumento do número de capilaridade provoca um aumento no tempo necessário até a estabilização ser atingida e um aumento do fluxo de

massa nessa condição, afastando cada vez mais os resultados numéricos daqueles previstos para escoamentos incompressíveis. Esse resultado encontra fundamento na interpretação do número de capilaridade como uma taxa de cisalhamento adimensional e pode ser observado na Figura 22. De fato, seu aumento implica maiores deformações na superfície da gota, incrementando os erros numéricos associados ao cálculo de \mathbf{n} e \mathbf{u} . Quanto ao tempo das simulações, vale notar que a utilização da formulação singular para os casos em que $Ca = 0,10$ e $Ca = 0,25$ requer apenas 4,29% e 3,93% do tempo associado à implementação da formulação não singular, respectivamente. De toda forma, em ambos os casos o fluxo de massa estabiliza-se em um valor maior que zero, caracterizando um erro numérico sistemático e indicando que a massa da gota aumenta continuamente durante as simulações, levando-as a um colapso com o passar do tempo.

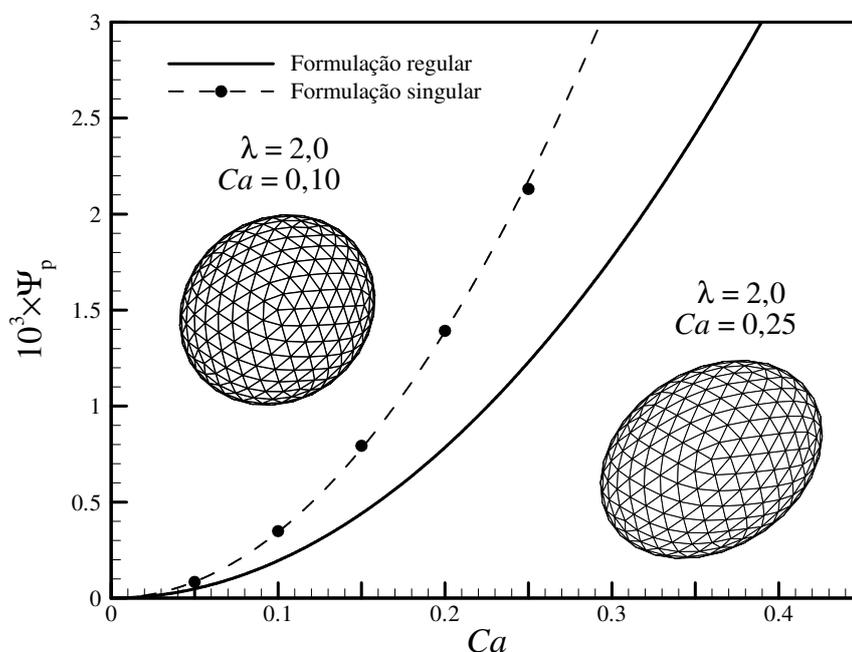


Figura 22 – Fluxo de massa estabilizado através da superfície da gota como função do número de capilaridade do escoamento. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 2,0$ discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$. Detalhes do formato e orientação das gotas em escoamentos com $Ca = 0,10$ e $Ca = 0,25$.

O gráfico da Figura 23 também compara os fluxos de massa através da superfície da gota considerando as duas formulações para o cálculo do campo de velocidade. Os procedimentos numéricos são os mesmos utilizados anteriormente, e as malhas permanecem com refinamento $f = 6$. Todavia, dessa vez o número de capilaridade do escoamento é constante e vale $Ca = 0,25$, variando-se apenas a razão de viscosidades das gotas. Assim, verifica-se um comportamento semelhante aos anteriores para Ψ : após um pequeno decréscimo inicial, o fluxo de massa aumenta com o tempo, até estabilizar-se em um valor positivo. Além disso, à medida que λ

aumenta e a gota aproxima-se de um corpo rígido imerso no escoamento, o fluxo de massa estável diminui. De fato, nessas situações o movimento de rotação da gota predomina sobre sua tendência de deformar-se; assim, a gota tende a girar com velocidade angular cada mais próxima da do escoamento não perturbado, apresentando menores deformações e, conseqüentemente, menores erros numéricos associados aos cálculos de \mathbf{u} e \mathbf{n} .

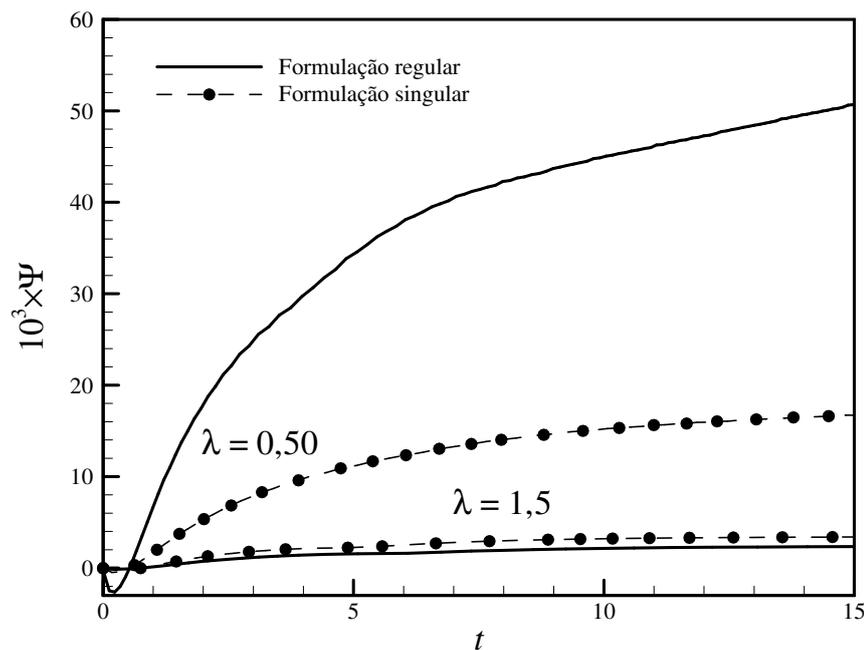


Figura 23 – Fluxo de massa através da superfície da gota para campos de velocidade calculados numericamente pelas formulações singular e não singular. As simulações foram realizadas para gotas discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca = 0,25$.

É importante ressaltar que a Figura 23 mostra um resultado interessante. Note que para $\lambda = 1,5$ a formulação regular produz resultados mais consistentes com a teoria, calculando com maior precisão a velocidade sobre a gota e gerando menores fluxos de massa através de sua superfície, conforme esperado. Por outro lado, para $\lambda = 0,50$ verifica-se um comportamento oposto, isto é, a formulação singular com integrais de superfície é mais consistente com a teoria de escoamentos incompressíveis que a formulação não singular baseada em integrais de linha. Mais que isso, verifica-se a recorrência desses resultados delimitada pelo caso de gotas nas proximidades de $\lambda = 1,0$, como mostra a Figura 24. Assim, caminhando na direção do limite assintótico de bolhas, tal que $\lambda < 1,0$, a formulação singular produz resultados para o fluxo de massa mais consistentes com a teoria que a formulação regular. Por outro lado, para gotas viscosas, isto é, para $\lambda > 1,0$, a formulação não singular com integrais de linha é mais precisa que a formulação singular com integrais de superfície no que tange ao cálculo do fluxo

de massa através da gota. Essa conclusão está associada intrinsecamente a cada uma das formulações utilizadas para o cálculo do vetor velocidade sobre a superfície da gota. Nesse sentido, embora a formulação baseada em integrais de superfície seja singular em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$, a curvatura média é calculada localmente sobre cada elemento e utilizada no integrando da simples camada potencial, como indica a equação (2.56). A formulação não singular, por sua vez, baseia-se em uma aproximação de segunda ordem ao considerar constante a curvatura média da superfície de integração e utilizar a velocidade média sobre a superfície, como mostram as equações (4.5) e (4.13). Assim sendo, acredita-se que para gotas com baixas razões de viscosidades e em regimes de escoamentos que provocam grandes deformações, as considerações adotadas para obter uma expressão não singular para as camadas potenciais simples e dupla são mais relevantes que as singularidades presentes nas integrais de superfície utilizadas para a representação da velocidade sobre a superfície da gota. Além disso, vale considerar, mais uma vez, o impacto em termos do tempo requerido para simulações utilizando cada uma das formulações: no caso de $\lambda = 0,50$, a formulação singular consome apenas 3,77% do tempo associado à utilização da formulação regular; quando $\lambda = 1,5$, esse valor é de 4,54%. Dessa maneira, e no que tange ao fluxo de massa espúrio através da gota, conclui-se que para gotas em que $\lambda < 1,0$ é mais conveniente implementar a formulação singular do Método Integral de Contorno.

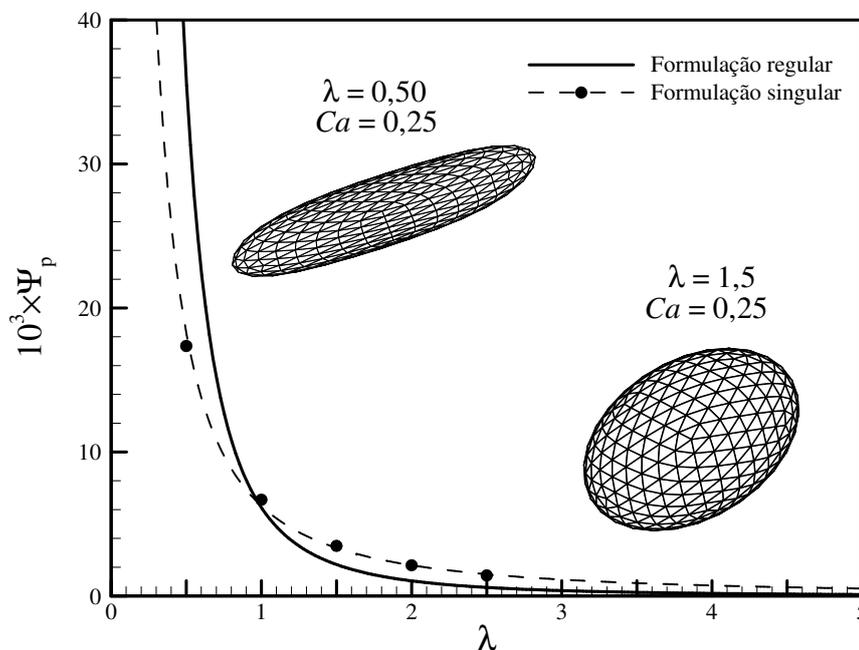


Figura 24 – Fluxo de massa estabilizado através da superfície da gota como função da sua razão de viscosidades. As simulações foram realizadas para gotas discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca = 0,25$. Detalhes do formato e orientação de gotas com $\lambda = 0,50$ e $\lambda = 1,5$.

Com base nos gráficos das Figura 23 e 24, verifica-se que à medida que avançamos no limite assintótico de bolhas, o transiente inicial é cada vez maior, indicando a predominância da tendência de deformação em relação à de rotação da superfície da gota e incrementando os erros numéricos associados ao cálculo do fluxo de massa. Por outro lado, avançando no limite oposto, de sorte que as gotas tendam a corpos rígidos imersos no escoamento, verifica-se que a estabilização de Ψ é rapidamente atingida. Nesses casos, as deformações são discretas e os efeitos de distorção da superfície são rapidamente contidos pela tendência de rotação da gota, como indica o mecanismo de restauração vinculado às teorias de pequenas deformações em altas razões de viscosidades descrito na Seção 5.1. Assim, o fluxo de massa estabiliza-se cada vez mais rápido e em valores cada vez menores.

Ainda nesse sentido, o gráfico da Figura 25 apresenta o comportamento temporal do fluxo de massa através de gotas de altas razões de viscosidades. Considerou-se uma gota de $\lambda = 20$ discretizada por uma malha com $f = 6$ e escoando com $Ca_\lambda = 10$, de sorte que verifique-se um regime de pequenas deformações. Note que nesse regime o número de capilaridade é definido em função da viscosidade da fase dispersa. Além disso, o formato da gota permanece praticamente esférico, de sorte que a geometria da gota pouco influencia no cálculo de \mathbf{u} .

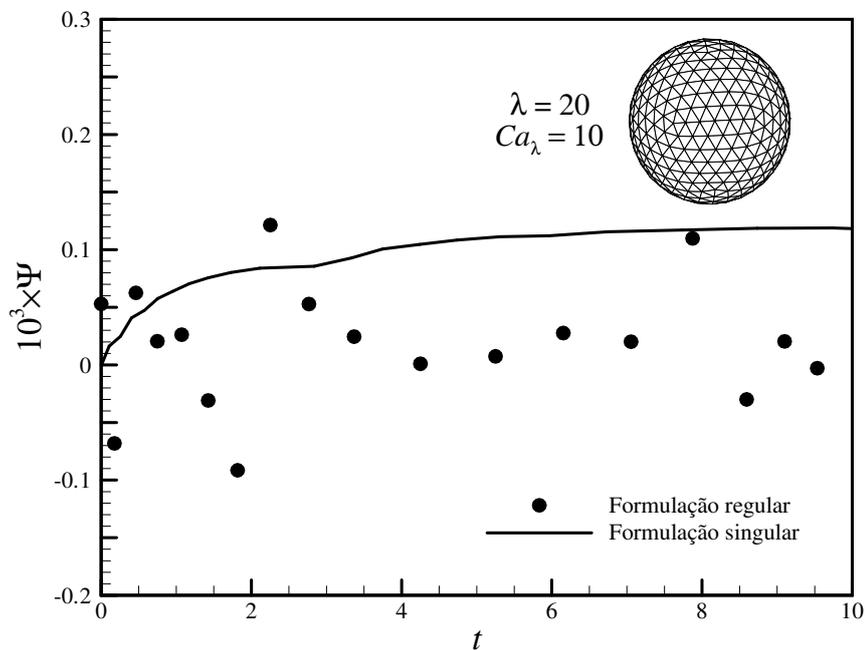


Figura 25 – Fluxo de massa através da superfície da gota para campos de velocidade calculados numericamente pelas formulações singular e não singular. A simulação foi realizada para gotas com $\lambda = 20$ e discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca_\lambda = 10$, caracterizando um regime de pequenas deformações. Detalhes para o formato e orientação da gota após a estabilização do fluxo de massa.

A formulação regular está associada a um fluxo de massa oscilatório, tal que a massa da gota pode aumentar e/ou diminuir de forma alternada durante o escoamento. Assim, em um contexto de pequenas deformações, o erro sistemático associado ao crescimento contínuo da gota em baixas e moderadas razões de viscosidades é substituído por um erro de flutuação numérica. Esse comportamento irregular para o fluxo de massa espúrio através da superfície de gotas é observado a partir de $\lambda > 5,0$. Ademais, considerando a análise numérica de toda simulação, verifica-se que ao passo que λ aumenta, a média global de Ψ tomada ao longo de todo escoamento atinge valores cada vez menores, indicando que o método Lagrangeano em sua formulação não singular tende a ser conservativo da massa em limites de altas razões de viscosidade, em média. Por outro lado, utilizando a formulação singular, nota-se o mesmo comportamento dos casos anteriores: o fluxo de massa estabiliza-se em um valor positivo, indicando que a massa da gota aumenta continuamente durante a simulação. Todavia, o valor absoluto de Ψ é sistematicamente menor à medida que aumenta-se o valor de λ . Ressalta-se ainda a implementação da formulação singular consome apenas 0,73% do tempo requerido caso a formulação regular fosse implementada. Assim sendo, e considerando o esforço em termos do tempo computacional requerido nas simulações, acredita-se que em limites de altas razões de viscosidades e pequenas deformações, isto é, para $\lambda > 5,0$, seja mais viável utilizar a formulação singular do Método Integral de Contorno.

Por fim, é possível concluir que mesmo que o campo de velocidade seja calculado a partir da formulação não singular baseada em integrais de linha, o fluxo de massa através da superfície da gota não é identicamente nulo em nenhum dos casos estudados, discordando do resultado esperado para o caso incompressível. Assim sendo, o método Lagrangeano empregado viola leis físicas do escoamento, não sendo perfeitamente conservativo da massa. Todavia, vale notar que o cálculo de Ψ decorre tanto do cálculo do campo de velocidade quanto do vetor normal unitário aos pontos de controle sobre a superfície da gota, como mostra a equação (6.1). Dessa maneira, ainda que a formulação regular seja implementada, sempre existirão erros numéricos associados ao cálculo do vetor normal sobre a gota. Essa análise encontra fundamento na metodologia de discretização e geração da malha sobre sua superfície. A integral de superfície descrita pela equação (6.1) é realizada de forma discreta, sendo obtida através de uma varredura por nós. Portanto, o vetor normal não é calculado continuamente sobre toda extensão da gota; na prática, ele é obtido a partir de um processo discreto realizado sobre cada um dos nós da malha. Sendo assim, a Figura 26 a seguir apresenta um estudo de convergência de malha, de sorte que o valor estável do fluxo de massa através da superfície da gota, Ψ_p , é avaliado em função do refinamento da malha, dado pela sua quantidade de nós, N_\bullet . As simulações foram realizadas para dois casos distintos da combinação λ e Ca , sendo as gotas discretizadas por malhas refinadas com $f = 6$, $f = 8$ e $f = 10$. Mais uma vez, \mathbf{u} é calculado numericamente tanto a partir da formulação regular quanto a partir da formulação singular.

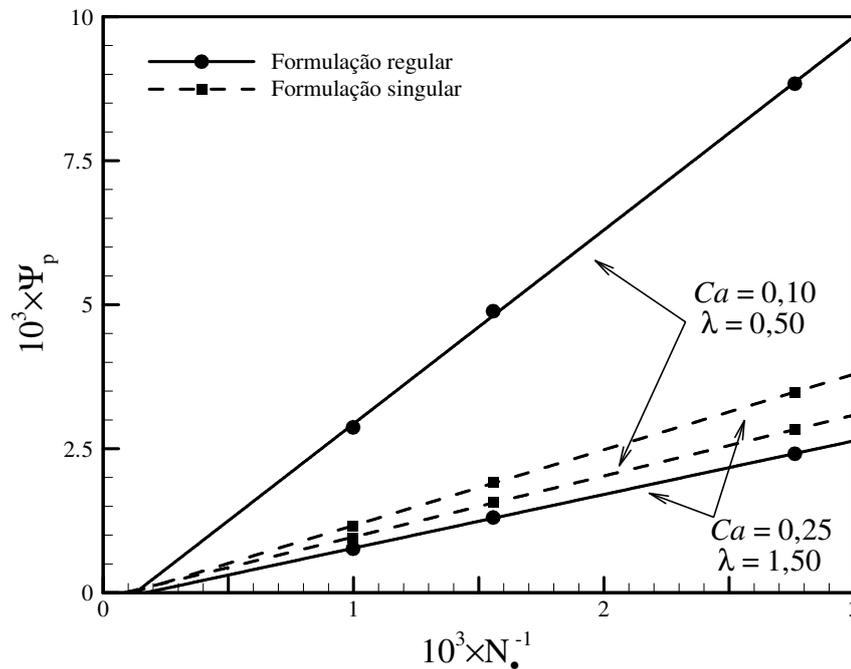


Figura 26 – Estudo de convergência de malha a partir do fluxo de massa estável como função do inverso do número de nós da malha.

Vale destacar que os pontos no gráfico da Figura 26 pertencem a uma reta. Uma análise de regressão linear confirma esse resultado, uma vez que o menor coeficiente de correlação entre os pontos obtidos pelas simulações numéricas é de 0,9994, e ocorre para o caso em que $\lambda = 1,5$ e $Ca = 0,25$ utilizando a formulação não singular. O coeficiente linear das retas de ajuste apresentadas é resultado de uma extrapolação que pretende prever o fluxo de massa estável para gotas discretizadas por malhas com infinitos nós. Essa condição estabelece o limite termodinâmico da malha, de sorte que a gota é representada por uma superfície perfeitamente contínua. Nesse sentido, verifica-se a coerência com os resultados previstos pela teoria de escoamentos incompressíveis; de fato, o maior coeficiente linear obtido é da ordem de $-4,33 \times 10^{-1}$, e acontece para a formulação $\lambda = 0,50$ e $Ca = 0,10$. Dessa maneira, o valor de estabilização do fluxo de massa para uma malha contínua, nesse caso, é $\mathcal{O}(10^{-3})$. Além disso, considerando a aproximação de um vetor normal calculado continuamente em todos os casos, a diferença entre as inclinações das retas geradas pelas duas formulações para as mesmas condições de escoamento decorrem simplesmente da diferença associada ao cálculo numérico \mathbf{u} . Dessa forma, a premissa defendida até aqui é ratificada: para gotas com $1,0 < \lambda < 5,0$ em que se verifica um regime de deformações moderadas, é mais conveniente utilizar a formulação regular do Método Integral de Contorno; para gotas com $\lambda < 1,0$ ou $\lambda > 5,0$, em que verificam-se regimes de grandes e pequenas deformações, respectivamente, a formulação singular é mais consistente.

O teste de convergência realizado fundamenta a adoção de um novo procedimento para avaliar o comportamento mecânico da gota no escoamento. Assim sendo, são realizadas, para cada caso, duas simulações com malhas com refinamentos distintos. Para cada par de resultados, uma reta de ajuste é considerada: a variável dependente é a grandeza que se quer determinar, e a variável independente, o inverso do número de nós da malha. Dessa forma, a resposta da simulação para cada caso é tomada como sendo o coeficiente linear da reta ajustada, isto é, o valor previsto pela regressão linear para uma malha perfeitamente contínua.

6.2 Comparação com teorias de pequenas deformações

Outro resultado importante consiste em avaliar o comportamento de medidas de deformação da gota ao longo do escoamento. Assim, o gráfico da Figura 27 mostra a evolução temporal de D_1 e D_2 considerando o campo de velocidade calculado pelas duas formulações do Método Integral de Contorno. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 10$ e discretizadas por malhas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca_\lambda = 9$. Nesse caso, verifica-se que para as mesmas condições do escoamento, as deformações calculadas a partir da formulação regular baseada em integrais de linha são maiores em relação ao cálculo baseada na formulação singular. No caso de D_1 , o desvio entre a formulação singular e a formulação regular é de 13,57%; no caso de D_2 , 20,58%.

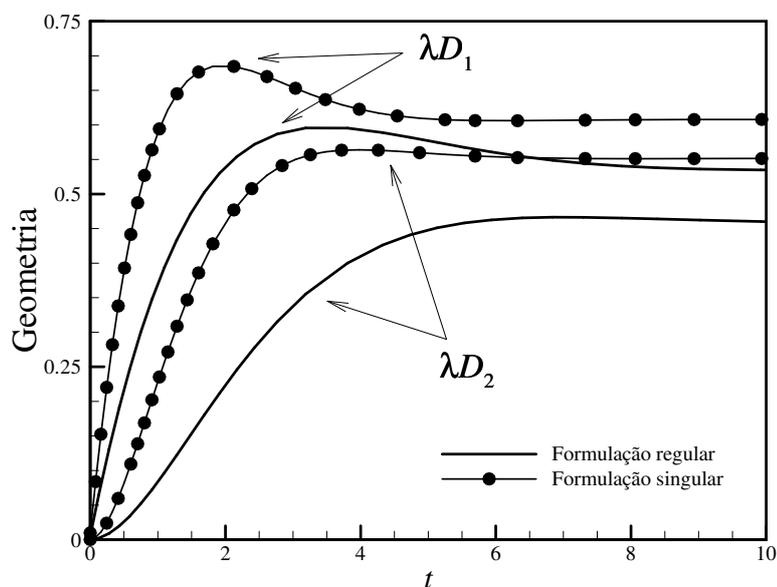


Figura 27 – Evolução temporal de medidas de deformação D_1 e D_2 da superfície de gota de alta razão de viscosidades em regime de pequenas deformações. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 10$ e discretizadas por malhas com $f = 6$ em escoamentos com $Ca_\lambda = 9$.

Considerando que a escala de tempo é adimensional, é possível verificar como os transientes iniciais podem ser complexos e duradouros. Além disso, nota-se que a duração do transiente inicial decresce com a razão de viscosidades. Chama atenção também o fato de que as maiores deformações não acontecem na forma estacionária da superfície. Em condições de ruptura, contudo, verifica-se que mesmo que o escoamento não perturbado seja permanente, a superfície da gota não atinge uma forma estacionária.

Ainda nesse contexto, vale comparar as previsões decorrentes da teoria de pequenas deformações $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ com os resultados numéricos obtidos pelo Método Integral de Contorno. Para tanto, foram realizadas diversas simulações de uma gota com $\lambda = 10$ em escoamentos cisalhantes simples distintos distribuídos no intervalo $Ca_\lambda \in [10^{-1}, 10]$. Com a finalidade de otimizar o tempo computacional empregado nas simulações, e considerando a pequena diferença relativa entre as deformações calculadas pelas duas formulações, considerou-se apenas resultados obtidos pela formulação singular da formulação integral para o campo de velocidade. O comportamento das quantidades geométricas da superfície da gota como função da taxa de cisalhamento do escoamento pode ser observado na Figura 28. As malhas utilizadas nas simulações eram refinadas com $f = 5$ e $f = 6$, de sorte que o procedimento de extrapolação para $N_\bullet \rightarrow \infty$ descrito na Seção 6.1 foi empregado.

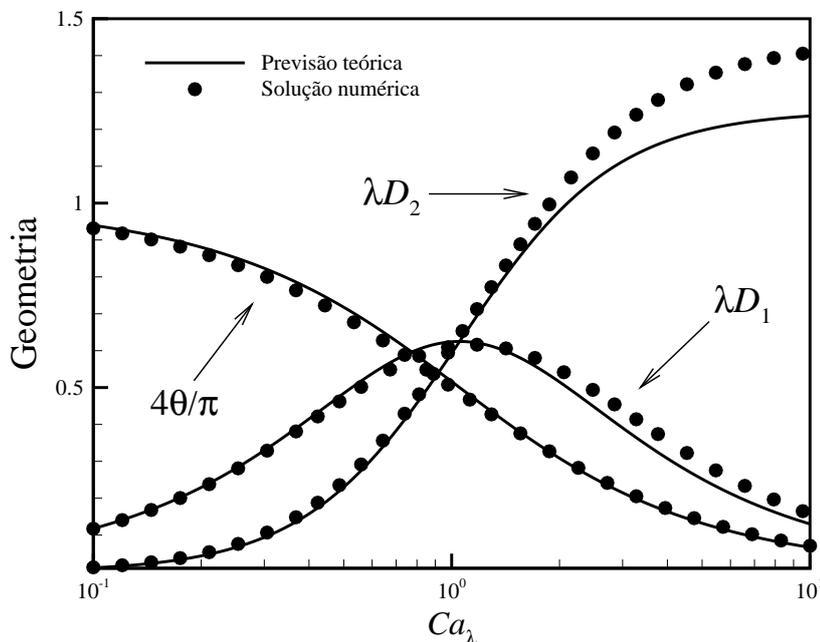


Figura 28 – Quantidades geométricas de gotas de altas razões de viscosidades em função do número de capilaridade em escoamentos cisalhantes simples. Comparação entre os resultados numéricos obtidos pela formulação singular do Método Integral de Contorno e as previsões da teoria assintótica $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$.

Assim, verifica-se que a teoria assintótica e o método numérico apresentam comportamento similar para o caso abordado, validando os resultados numéricos para o estudo de emulsões diluídas de altas razões de viscosidades. Note que caso a formulação regular fosse implementada, os desvios entre os resultados numéricos e teóricos seriam menores nas situações de altas taxas de cisalhamento.

6.3 Comparação com resultados experimentais

Para ratificar o suporte quantitativo dos resultados numéricos obtidos pelo Método Integral de Contorno é viável realizar comparações com dados experimentais disponíveis na literatura. Nesse caso, destaca-se a relevância da medida de deformação de Taylor, conforme descrito na Seção 5.2. Dessa forma, a Figura 29 mostra a evolução temporal de D_T para gotas de baixas e moderadas razões de viscosidades. No primeiro caso, considera-se gotas com $\lambda = 0,50$ escoando com $Ca = 0,10$; no segundo, gotas com $\lambda = 5$ escoando com $Ca = 0,25$. Em ambos os casos as malhas são discretizadas com $f = 6$ e os escoamentos são cisalhantes simples.

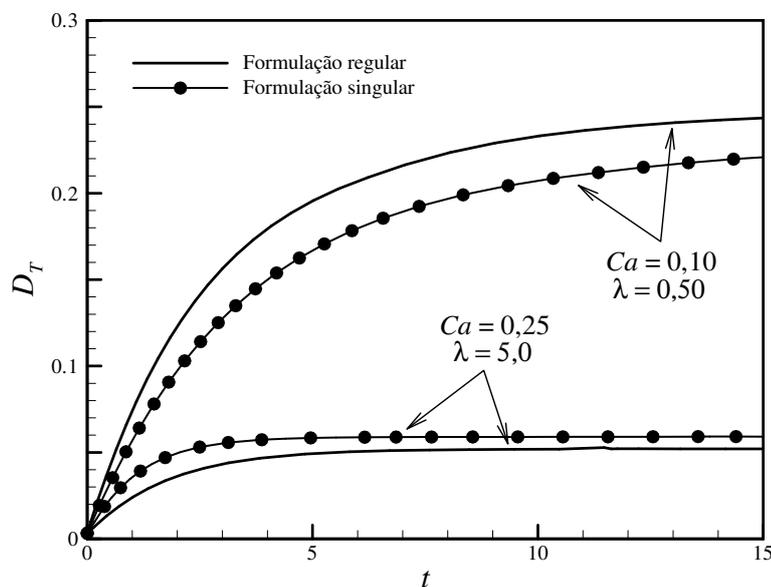


Figura 29 – Evolução temporal de medida de deformação de Taylor da superfície de gotas em baixas e moderadas razões de viscosidades. As simulações foram realizadas para gotas com $\lambda = 0,50$ e $\lambda = 5$ em escoamentos com $Ca = 0,10$ e $Ca = 0,25$, respectivamente. Ambas as gotas foram discretizadas por malhas com $f = 6$.

Assim sendo, no caso de baixas razões de viscosidades, a deformação calculada pela formulação regular é cerca de 9,44% superior àquela determinada pela formulação singular. Considerando-se razões de viscosidades moderadas, o resultado é oposto, de sorte que a formulação singular produz resultados aproximadamente 13,69% superiores. Verifica-se ainda que tanto os transientes iniciais quanto a deformação em regime permanente aumentam à medida que nos aproximamos do limite assintótico de bolhas.

Ainda nesse contexto, Torza et al. (1972) apresentam resultados para a deformação de Taylor para gotas com $\lambda = 0,08$ e $\lambda = 3,6$. Assim sendo, as Figuras 30 e 31 comparam os resultados numéricos e experimentais, mostrando sua concordância de forma satisfatória. Considerando os resultados obtidos para o fluxo de massa e para deformação de Taylor de gotas em baixas e moderadas razões de viscosidades considerou-se formulações distintas do Método Integral de Contorno para cada caso. Para $\lambda = 0,08$, a formulação singular foi implementada, enquanto que para $\lambda = 3,6$ utilizou-se a formulação regular. Além disso, o procedimento de extrapolação buscando o limite termodinâmico da malha foi utilizado. As figuras ainda apresentam o formato da gota, considerando tanto sua deformação quanto sua orientação em relação ao escoamento, para as respostas permanentes no caso das maiores capilaridades utilizadas no experimento. Assim, fica clara a diferença entre o comportamento mecânico de emulsões diluídas com gotas em pequenas e moderadas razões des viscosidades.

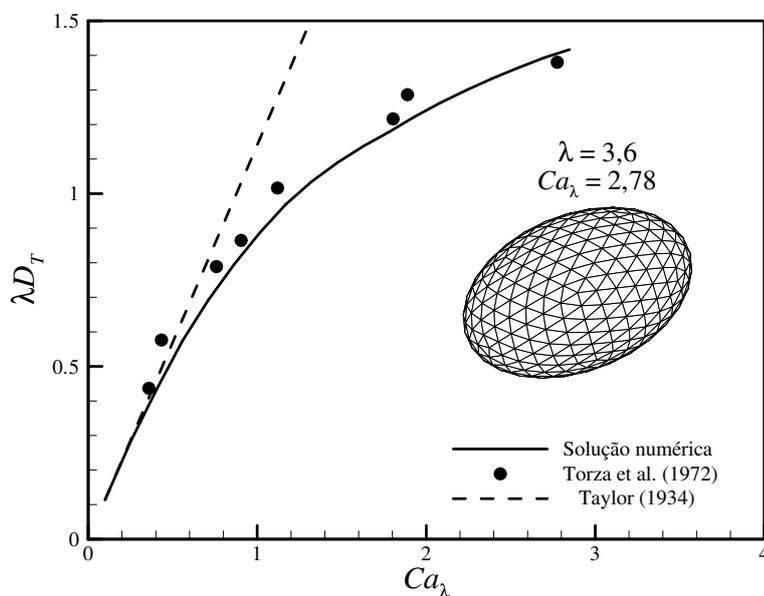


Figura 30 – Deformação de Taylor em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 3,6$. Comparação entre os resultados numéricos obtidos pela formulação regular do Método Integral de Contorno com o resultado experimental obtido por Torza et al. (1972).

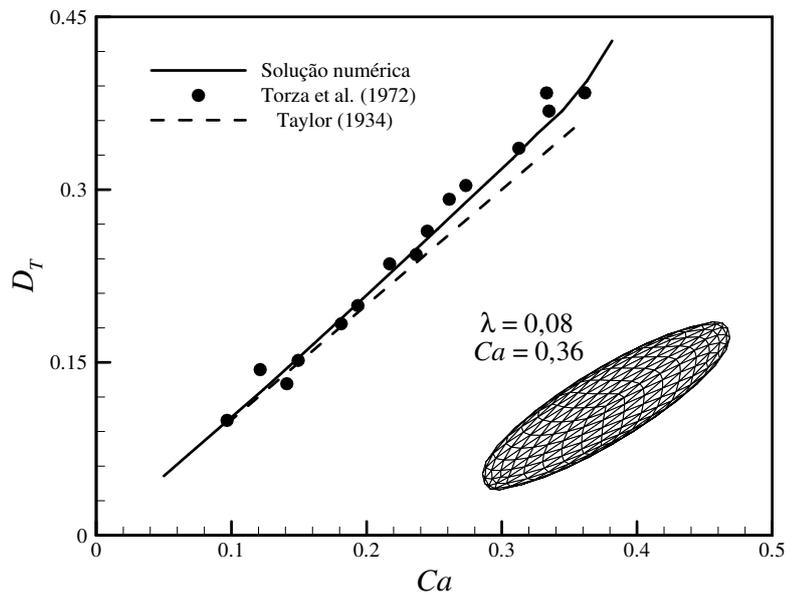


Figura 31 – Deformação de Taylor em função do número de capilaridade em cisalhamento simples para $\lambda = 0,08$. Comparação entre os resultados numéricos obtidos pela formulação singular do Método Integral de Contorno com o resultado experimental obtido por Torza et al. (1972).

Chama atenção o fato de que o código numérico recupera a teoria de Taylor (1934) para as duas situações. Além disso, note que os resultados numéricos subestimam de forma discreta o valor de D_T em relação ao experimento. Todavia, esse resultado não é suficiente para invalidar a precisão numérica do método; de fato, as incertezas associadas às medidas experimentais utilizadas como referência não são conhecidas.

7 Conclusões e trabalhos futuros

7.1 Conclusões

O presente trabalho abordou o comportamento mecânico de gotas de emulsões diluídas em cisalhamento simples. Na escala das gotas, o escoamento pode ser considerado livre dos efeitos de inércia, sendo governado pelas equações de Stokes. Como consequência da linearidade das equações governantes, diversas técnicas analíticas e numéricas podem ser utilizadas para explorar sua solução. O campo de velocidade sobre a superfície da gota foi determinado pelo Método Integral de Contorno aplicado às equações de Stokes (Ladyzheskaya, 1969). Para tanto, foram obtidas formas integrais do campo de velocidade para os fluidos interno e externo à gota. A conciliação desses resultados na superfície da gota é obtida em função do salto de tensões na interface. No contexto deste trabalho, admite-se que não há gradientes de temperatura ou de concentração de surfactantes na superfície das gotas, de sorte que o salto de tensões ocorre apenas na direção normal à superfície. O Método Integral de Contorno, contudo, baseia-se em integrais de superfície que envolvem funções de Green singulares. Assim, um procedimento de subtração de singularidades é descrito e os resultados numéricos são obtidos pela Regra do Trapézio aplicada à integrais de superfície. Todavia, esse procedimento não permite que as integrais sejam avaliadas exatamente sobre o ponto de singularidade. Assim, grandes erros numéricos são produzidos quando os cálculos são realizados nas proximidades do pólo (Loewenberg & Hinch, 1996; Pozrikidis, 1992).

Nesse contexto, uma formulação não singular para o campo de velocidade na superfície de gotas com razões de viscosidades arbitrárias é apresentada e discutida em detalhes (Bazhlekov et al., 2004). Essa formulação baseia-se em integrais de linha, apresenta solução analítica e, desde que o pólo não esteja sobre o contorno que define caminho de integração, permanece regular mesmo quando a singularidade está exatamente sobre a superfície de integração. Testes numéricos com objetivo de validar a nova formulação são apresentados. No caso da formulação singular, utilizou-se a Regra do Trapézio aplicada à integrais de superfície; no caso da formulação regular, fórmulas de quadratura baseadas nas Fórmulas de Newton-Cotes fechadas. Como resultado dos testes, acredita-se que seja conveniente implementar apenas soluções numéricas das duas formulações. De fato, o esforço em termos do tempo computacional de simulação associado ao cálculo exato das camadas potenciais simples e dupla é muito superior àquele necessário quando utiliza-se métodos numéricos de integração.

A metodologia numérica utilizada nas simulações também foi discutida em detalhes. Nesse sentido, destacam-se o procedimento de discretização da malha sobre a superfície da gota e o cálculo do vetor normal e da curvatura sobre cada nó (Loewenberg & Hinch, 1996; Bazhlekov et al., 2004). Além disso, um procedimento de regularização da dupla camada potencial baseando-se na subtração de autovalores espúrios do espectro de solução é abordado (Oliveira, 2007). O procedimento de relaxação da malha também é considerado. Nesse caso, apresenta-se um método de relaxação da malha computacional, de maneira que a posição dos nós sobre a superfície da gota torne-se independente da história do escoamento. Para isso, antes de cada passo do processo de avanço temporal físico, uma sequência de passos de relaxação é realizada até que a distribuição dos pontos de controle da malha não se altere mais (Loewenberg & Hinch, 1996; Siqueira et al., 2011). O processo de evolução temporal baseia-se em um algoritmo de Euler de segunda ordem que utiliza passos de tempo adaptativos. A determinação dos passos de tempo é baseada em medidas de deformação da gota e em uma tolerância previamente estabelecida. Dessa forma, durante os transientes iniciais em que a gota deforma-se rapidamente, o método produz passos mais curtos, refinando o cálculo nesse intervalo. À medida que o regime aproxima-se do estado permanente, o formato da gota para de variar e os intervalos de tempo entre duas iterações aumenta.

No caso particular de emulsões de altas razões de viscosidades, as gotas tendem a girar com vorticidade próxima da do escoamento não perturbado. Nessa condição, antes que as deformações sofridas pela gota no quadrante extensional do cisalhamento tornem-se significativamente grandes, a partícula gira e passa ao quadrante compressional. Esse mecanismo tende a restaurar a forma da gota. Em outras palavras, sendo o tempo característico de deformação muito maior que o tempo característico de rotação da superfície, a gota tende assintoticamente a uma esfera. Portanto, verifica-se um limite de pequenas deformações na condição de altas razões de viscosidades. Nesse sentido, teorias assintóticas $\mathcal{O}(Ca)$ e $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ para a evolução da superfície da gota foram apresentadas (Oliveira & Cunha, 2011). Essas teorias são capazes de prever medidas de deformação e orientação das gotas no escoamento, evidenciando efeitos não lineares no escoamento de emulsões em altas razões de viscosidades.

Com o objetivo de validar os resultados numéricos produzidos pelo Método Integral de Contorno, calculou-se o fluxo de massa líquido através da superfície da gota. A modelagem do problema baseia-se em um escoamento incompressível, de maneira que o fluxo de massa total através da superfície da gota deve ser identicamente nulo; isto é, o volume da gota deve permanecer constante. Todavia, os resultados numéricos acusam que o fluxo de massa atinge um valor positivo e estável. Verifica-se ainda que a formulação que produz resultados que mais se aproximam da previsão teórica depende do regime de escoamento em estudo. No caso de gotas de razões de viscosidades moderadas ($1, 0 < \lambda < 5, 0$), a implementação da formulação não singular apresenta grandes avanços no sentido de atender à expectativa incompressível. De fato, o fluxo de massa calculado utilizando integrais de linha para descrever o campo de velocidade é sempre menor que quando calculado pela formulação singular baseada em integrais de

superfície. Todavia, em ambas as situações verifica-se um fluxo de massa positivo quando o valor estável é atingido, indicando um erro numérico sistemático e representando que a massa da gota aumenta continuamente durante a simulação. Em regimes de pequenas deformações em que as gotas apresentam altas razões de viscosidades ($\lambda > 5, 0$), o fluxo de massa calculado pela formulação singular apresenta caráter oscilatório, caracterizando um erro de flutuação numérica. Todavia, a média temporal do fluxo de massa tomada ao longo de todo o escoamento tende à zero tanto mais quanto a razão de viscosidades da gota aumenta e ela aproxima-se de um corpo rígido imerso no escoamento. A utilização da formulação singular ainda produz um fluxo de massa crescente, estabilizando-se em um valor positivo. À medida que a gota torna-se mais viscosa, o valor absoluto do fluxo diminui consideravelmente. Para gotas de baixas razões de viscosidade em regimes de grandes deformações ($\lambda < 1, 0$), verifica-se que a implementação da formulação regular não produz avanços significativos em relação ao cálculo do fluxo de massa. Assim, o fluxo calculado pela formulação não singular é sempre maior que quando calculado pela formulação singular, considerando as mesmas condições de escoamento. Dessa maneira, a formulação singular produz resultados mais próximos da previsão teórica. Nesses casos, portanto, as hipóteses de considerar constante a curvatura local da superfície e utilizar uma média espacial para o campo de velocidade adotadas nas formulações não singulares das camadas potenciais simples e dupla são grosseiras. Sendo assim, em regimes de grandes deformações, observa-se que a influência dessas considerações o cálculo da velocidade superficial é muito mais relevante que a singularidade presente no método. Acredita-se que a implementação da formulação singular do Método Integral de Contorno para descrever a velocidade na superfície de gotas seja conveniente apenas no caso de razões de viscosidades moderadas.

Ainda vale notar, que as duas formulações para o campo de velocidade violam leis físicas do escoamento. De fato, o fluxo de massa total através da superfície das gotas é constantemente não nulo durante as simulações, evidenciando que o método Lagrangeano empregado não é conservativo da massa. Esse resultado encontra fundamento na avaliação discreta do vetor normal ao longo da superfície da gota. De fato, o vetor normal é calculado localmente sobre cada nó da discretização. Assim, realizou-se um estudo de convergência da malha, em que o parâmetro é o inverso do número de nós da discretização. Dessa maneira, é possível prever o comportamento da gota quando discretizada por uma malha com infinitos nós, caracterizando, de fato, uma superfície contínua.

Medidas de deformação da superfície da gota também foram calculadas considerando as duas formulações. No caso particular de pequenas deformações, considerou-se medidas baseadas no tensor distorção da superfície da gota (Oliveira & Cunha, 2011). Essas medidas foram monitoradas ao longo do escoamento até que o regime permanente fosse atingido. Verificou-se um pequeno desvio entre os resultados obtidos pelas duas formulações, sendo a deformação em regime permanente calculada pela formulação regular sempre inferior à mesma grandeza calculada pela formulação singular. Além disso, a formulação singular foi comparada com a teoria $\mathcal{O}(\lambda^{-1})$ apresentada para prever resultados quanto à deformação e orientação das gotas.

Nesse caso, foi possível observar boa concordância entre os resultados numéricos e teóricos. No caso de regimes de deformações moderadas e grandes, considerou-se a medida de deformação de Taylor (1934), que baseia-se na projeção dos semi-eixos da superfície da gota no plano do escoamento. A evolução temporal dessa medida também foi monitorada, e os resultados indicam que para gotas de baixas razões de viscosidades, a deformação de Taylor calculada pela formulação não singular é sempre superior à mesma medida calculada pela formulação singular. No caso de razões de viscosidades moderadas, o resultado é oposto, de sorte que a formulação regular produz resultados inferiores à formulação singular. Finalmente, e ainda para o caso de gotas de baixas e moderadas razões de viscosidades, resultados experimentais disponíveis na literatura são utilizados como critério de comparação (Torza et al., 1972). Observou-se, mais uma vez, boa concordância entre os resultados numéricos e as referências utilizadas, validando o código numérico desenvolvido para o estudo de emulsões diluídas.

7.2 Trabalhos futuros

Considerando a formulação desenvolvida e os resultados numéricos apresentados neste trabalho, uma ampla frente de estudos pode ser explorada. Nesse contexto, destaca-se a necessidade de implementar um método numérico híbrido que utilize simultaneamente as duas formulações do Método Integral de Contorno para descrição da velocidade na superfície das gotas. De fato, a formulação regular é particularmente importante em situações que o ponto de singularidade encontra-se nas proximidades da superfície de integração. Por outro lado, para pólos suficientemente afastados da superfície, a formulação singular pode ser utilizada sem comprometer os resultados obtidos. Assim, espera-se obter resultados mais consistentes em relação ao fluxo de massa e medidas de deformação tendo a teoria e resultados experimentais como referência, além dos ganhos em termos do tempo computacional exigido nas simulações. Além disso, grandes esforços podem ser realizados no sentido de melhorar o cálculo de grandezas geométricas da superfície, tais como a curvatura local e o vetor normal em cada nó da malha.

Além disso, destaca-se a necessidade de implementar uma malha adaptativa com topologia variável para discretizar a superfície da gota. Esse procedimento viabilizaria o estudo de gotas em regimes de grandes deformações e dos processos de formação e/ou ruptura de gotas. Para malhas desse tipo, além do procedimento relaxação já utilizado neste trabalho, seria necessário adicionar e/ou retirar pontos de controle da malha em determinadas regiões, de acordo com critérios pré-estabelecidos. Assuntos como esse já foram abordados por Bazhlekov et al. (2004). Além disso, o estudo numérico de difusão e migração de gotas em emulsões polidispersas é de grande interesse prático e teórico. Tais fenômenos provocam a estratificação de emulsões escoando em tubos e em outros escoamentos cisalhantes em geral. Nesses casos, o Método Integral de Contorno também pode ser utilizado para determinação de coeficientes hidrodinâmicos do problema.

Outro tema de grande interesse no contexto do estudo de emulsões é a predição dos efeitos de tensoativos em sua reologia. Nesse sentido, é necessário implementar modelos constitutivos para o salto de tensões tangenciais, decorrentes de gradientes de surfactantes na superfície da gota, por exemplo. Modelos semelhantes ainda podem ser utilizados para simular o escoamento de cápsulas e vesículas, abrindo caminho para o entendimento dos mecanismos físicos do escoamento de sangue em vasos capilares. Dessa forma, verifica-se a possibilidade do melhor entendimento acerca dos efeitos de determinadas doenças, como a anemia falciforme.

Por fim, a caracterização de emulsões magnéticas também representa um tema de bastante interesse por parte dos pesquisadores (Cunha et al., 2007). Esses materiais têm aplicações promissoras em áreas da medicina, como no transporte de fármacos pela corrente sanguínea, e também em ramos da engenharia, como em processos de separação de misturas de água e óleo e de resfriamento de componentes eletrônicos. Nesse contexto, modificações do Método Integral de Contorno podem ser utilizadas para realizar estudos numéricos e teóricos sobre o comportamento de gotas magnéticas. Todavia, é preciso dispor de uma versão do Teorema da Reciprocidade para gotas magnéticas e resolver a equação do campo magnético sobre a superfície das partículas.

Referências

- Abramovitz, M. & Stegun, I. (1964). *Handbook of mathematical functions*. Hardcover.
- Adam, N. K. (1968). *The physics and chemistry of surfaces*. Dover Publications, INC.
- Aris, R. (1962). *Vectors, tensors and the basic equations of fluid mechanics*. Dover Publications, INC.
- Barthès-Biesel, D. & Acrivos, A. (1973). Deformation and burst of a liquid droplet freely suspended in a linear field. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Batchelor, G. K. (1967). *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press.
- Batchelor, G. K. (1970). Stress in system in a suspension of force-free particles. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Bazhlekov, I. B., Anderson, P. D., & Meijer, H. E. H. (2004). Non-singular boundary-integral method for deformable drops in viscous flows. *Physics of Fluids*.
- Bird, R. B., Armstrong, R. C., & Hasser, O. (1987). *Dynamic of polymeric liquids*. Wiley.
- Childress, S. (1981). *Mechanics of swimming and flying*. Cambridge Universty Press.
- Cunha, F. R. (2003). *Notas de aula do curso de Microhidrodinâmica*. Programa de Pós-Graduação em Ciências Mecânicas, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília.
- Cunha, F. R., Couto, H. L. G., & Oliveira, T. F. (2007). On the application of a three-dimensional boundary integral method to compute distortions of magnetic drops. *11th Conference of Magnetic Fluids, Kosice, Sloveniaa*.
- Cunha, F. R. & Hinch, E. J. (1996). Shear-induced dispersion in a dilute suspension of rough spheres. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Einstein, A. (1956). *Brownian movement*. Dover Publications, INC.
- Evans, L. C. (1998). *Partial differential equations*. Graduate Studies in Mathematics.
- Happel, J. & Brenner, H. (1991). *Low Reynolds number hydrodynamics*. Kluwer Academic Publishes.
- Jeffreys, H. & Jeffreys, B. (1946). *Methods of mathematial physics*. Cambridge Universty Press.
- Kim, S. & Karilla, S. J. (1991). *Microhydrodynamics: principles and selected applications*. Butterworth - Heinemann.

- Kreyszig (1999). *Advanced Engineering Mathematics*. John Wiley & Sons.
- Ladyzheskaya, O. A. (1969). *The mathematical theory of viscous incompressible flow*. Gordon & Breach.
- Lamb, H. (1932). *Hydrodynamics*. Cambridge University Press.
- Lima, E. L. (1996). *Álgebra Linear*. Associação Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada - IMPA.
- Loewenberg, M. & Hinch, E. J. (1996). Numerical simulations of a concentrated emulsion in shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Loewenberg, M. & Hinch, E. J. (1997). Collision of two deformable drops in shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Mukherjee, S. (2002). Regularization of hypersingular boundary integral equations: a new approach for axisymmetric elasticity. *Engineering Analysis with Boundary Elements*.
- Oliveira, T. F. (2007). *Microhidrodinâmica e reologia de emulsões*. PhD thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.
- Oliveira, T. F., Carvalho, J. A. A., & Cunha, F. R. (2005). A theoretical study of an emulsion of high viscosity drops under shear. *XVIII International Congress of Mechanical Engineering – COBEM 2005, Ouro Preto, Brazil*.
- Oliveira, T. F. & Cunha, F. R. (2011). A theoretical description of a dilute emulsion of very viscous drops undergoing unsteady simple shear. *Journal of Fluids Engineering*.
- Pozrikidis, C. (1992). *Boundary integral and singularity methods for linearized viscous flow*. Cambridge University Press.
- Pozrikidis, C. (1993). On the transient motion of ordered suspensions of liquid drops. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Pozrikidis, C. (2001). On the transient motion of ordered suspensions of liquid drops. *Computers & Fluids*.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., & Vetterling, W. T. (1992). *Numerical recipes in C, the art of scientific computing*. Cambridge University Press.
- Rallison, J. M. (1980). Note on the time dependent deformation of a viscous drop which is almost spherical. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Rallison, J. M. (1981). A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in general shear flows. *Journal of Fluid Mechanics*.

- Rallison, J. M. & Acrivos, A. (1978). A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Salvadori, A. (2001). Analytical integration of hypersingular kernel in 3d b.e.m. problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.
- Schowalter, W. R., Chaffey, C. E., & Brenner, H. (1968). Rheological behaviors of a dilute emulsion. *Journal of Colloid and Interface Science*.
- Siqueira, I. R., Oliveira, T. F., & Cunha, F. R. (2011). Complete relaxation strategies applied to emulsions flow simulations using the boundary integral method. *XXI International Congress of Mechanical Engineering – COBEM 2011, Natal, Brazil*.
- Stone, H. & Leal, L. (1989). Relaxation and breakup of initially extended drop in an otherwise quiescent fluid. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Stone, H. A. (1994). Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluid. *Annual Review of Fluid Mechanics*.
- Taylor, G. I. (1934). The formation of emulsions in definable fields of flow. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*.
- Torza, S., Cox, R. G., & Mason, S. G. (1972). Particle motion in sheared suspensions. *Journal of Colloid and Interface Science*.
- Truesdell, C. & Noll, W. (1965). *Handbuch der Physik*. Springer-Verlag.
- Wilkinson, J. H. (1965). *The algebraic eigenvalue problem*. Oxford Science Publications.
- Yon, S. & Pozrikidis, C. (1999). Deformation of a liquid drop adhering to a plane wall: significance of the drop viscosity and the effect of an insoluble surfactant. *Physics of Fluids*.
- Youngren, G. K. & Acrivos, A. (1975). Stokes flow past a particle of arbitrary shape: a numerical method of solution. *Journal of Fluid Mechanics*.
- Zinchenko, A. Z., Rother, M. A., & Davis, R. H. (1997). A novel boundary-integral algorithm for viscous interaction of deformable drops. *Physics of Fluids*.

Apêndices

APÊNDICE A – Propriedades das equações de Stokes

A.1 Força hidrodinâmica

Como consequência direta da linearidade das equações de Stokes, verifica-se que a força hidrodinâmica que atua sobre uma partícula transladando em um fluido Newtoniano em regimes de baixos números de Reynolds depende linearmente da velocidade relativa entre a partícula e o fluido. Sendo L uma escala característica de comprimento, segue que $|\mu\nabla^2\mathbf{u}| \sim \mu\mathbf{U}/L^2$ é uma escala das tensões viscosas e $|\nabla P| \sim \mathbf{F}_H/L^3$ é uma escala da pressão. Assim, e considerando o balanço de quantidade de movimento linear dado pela equação (2.10), mostra-se que $\mathbf{F}_H/L^3 \sim \mu\mathbf{U}/L^2$, ou ainda,

$$\mathbf{F}_H \sim \mu\mathbf{U}L. \quad (\text{A.1})$$

Esse resultado recupera a Lei de Stokes para a força de arrasto que atua sobre uma partícula esférica isolada sedimentando em um fluido viscoso. Para essa situação, tem-se que $\mathbf{F}_H = 6\pi\mu r\mathbf{U}$, em que r é o raio da partícula. Dessa maneira, conclui-se que a relação entre a força hidrodinâmica sobre um corpo em escoamentos livres de inércia é proporcional à velocidade relativa entre o corpo e a partícula. A forma mais geral de relacionar essas duas grandezas – força e velocidade – é tal que

$$\mathbf{F}_H = \mu\mathbf{R} \cdot \mathbf{U}, \quad (\text{A.2})$$

em que \mathbf{R} é um tensor de segunda ordem denominado tensor resistência. Vale destacar que \mathbf{R} é função apenas da geometria (forma, tamanho e orientação) das partículas, sendo independente do escoamento. No caso de uma esfera isolada, o tensor resistência é dado por $\mathbf{R} = 6\pi r\mathbf{I}$. De forma alternativa, pode-se escrever $\mathbf{U} = \mu^{-1}\mathbf{M} \cdot \mathbf{F}_H$, em que $\mathbf{M} = \mathbf{R}^{-1}$ é o tensor de mobilidade da partícula. Mais detalhes sobre os tensores resistência e mobilidade são descritos por Kim & Karilla (1991).

A.2 Reversibilidade temporal

Outra propriedade importante do escoamento de Stokes é a sua reversibilidade em relação ao tempo. Notando que em escoamentos livres de inércia o movimento $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ depende diretamente da força hidrodinâmica aplicada, então, se o sentido da força é invertido, o movimento também sofre inversão. De fato, se \mathbf{u} e P formam um conjunto solução das equações dadas em (2.10), é evidente que $-\mathbf{u}$ e $-P$ também o são. Por outro lado, quando o número de Reynolds é arbitrário, o termo não linear $|\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}| \sim U^2/L$ mantém seu sinal quando o sentido da velocidade é revertido, mostrando que o escoamento reverso não é mais uma solução do problema. Dessa maneira, o movimento relativo entre duas esferas lisas em cisalhamento simples produz trajetórias relativas fechadas reversíveis. Se o cisalhamento é invertido, as partículas retornam ao longo das mesmas trajetórias relativas, sem migração lateral. Todavia, essa condição de simetria pode ser quebrada por características intrínsecas do sistema, como rugosidade superficial ou forças coloidais (Cunha & Hinch, 1996).

Vale destacar que a reversibilidade temporal em escoamentos de Stokes impossibilita alguns movimentos. Organismos biológicos livres da ação líquida da gravidade e realizando movimentos com reversibilidade no temporal (como oscilações harmônicas simples, por exemplo) não são capazes de se mover. Para produzir movimento, em geral, os microorganismos precisam quebrar a simetria no tempo do escoamento, realizando movimentos helicoidais ou de altas frequências (Childress, 1981).

A.3 Funções harmônicas

Partindo das equações de Stokes, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ e $\mu \nabla^2 \mathbf{u} = -\nabla P$, é possível demonstrar que os campos de pressão e vorticidade são harmônicos e que o campo de velocidade é biharmônico nesse tipo de regime. Para o campo de pressão, basta notar que $\nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times \boldsymbol{\xi}$, em que $\boldsymbol{\xi} = \nabla \times \mathbf{u}$ é o vetor vorticidade; assim sendo, tem-se que

$$-\nabla \times \boldsymbol{\xi} = \frac{1}{\mu} \nabla P. \quad (\text{A.3})$$

Tomando o divergente de (A.3), sabendo que o divergente do rotacional de um vetor é sempre nulo e que o divergente do gradiente de um vetor é o seu Laplaciano, obtém-se $\nabla^2 P = 0$. Portanto, o campo de pressão é harmônico, indicando que ele pode ser expandido em uma série de funções harmônicas sólidas (Lamb, 1932). Por outro lado, tomando o rotacional de (A.3) e sabendo que o rotacional do gradiente de uma função escalar é o vetor nulo, tem-se que $-\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\xi}) = \mathbf{0}$. Usando que $\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\xi}) = \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{\xi}) - \nabla^2 \boldsymbol{\xi}$ e notando que o campo de vorticidade é solenoidal por definição, isto é, $\nabla \cdot \boldsymbol{\xi} = 0$, segue que $\nabla^2 \boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$, mostrando que o campo de vorticidade também é harmônico. Dessa maneira, conclui-se que não há regiões de

concentração intensa de vorticidade que indiquem que esta grandeza seja um campo compacto próximo à contornos sólidos. Além disso, verifica-se que a vorticidade assume valores extremos na fronteira de um domínio regular (Evans, 1998).

Por fim, tomando o Laplaciano em ambos os lados da equação da quantidade de movimento linear, segue que $\mu \nabla^2 \nabla^2 \mathbf{u} = \nabla^2 \nabla P$. Todavia, vale lembrar da identidade vetorial $\nabla^2 \nabla P = \nabla(\nabla \cdot \nabla P) - \nabla \times \nabla \times (\nabla P)$; assim, sabendo que, por definição, $\nabla \times (\nabla P) = \mathbf{0}$ e desde que a pressão é um campo harmônico, isto é, $\nabla \cdot \nabla P = \nabla^2 P = 0$, tem-se que $\nabla^2 \nabla P = 0$. Portanto, $\nabla^2 \nabla^2 \mathbf{u} = \nabla^4 \mathbf{u} = \mathbf{0}$, mostrando que a velocidade é um campo biharmônico em regimes de baixos números de Reynolds (Lamb, 1932; Jeffreys & Jeffreys, 1946).

A.4 Unicidade da solução

Consideremos a taxa de dissipação de quantidade de movimento em energia interna por unidade de volume para um fluido Newtoniano incompressível, $\Phi = 2\mu \mathbf{E} : \mathbf{E}$. Além disso, seja V uma região do espaço delimitada pela superfície S na qual as condições de contorno de velocidade são conhecidas. Sejam \mathbf{u} e \mathbf{u}' duas soluções das equações de Stokes nesse domínio, tais que ambas satisfaçam as condições de contorno em S . Assim sendo, a taxa de dissipação de energia mecânica em energia interna em todo o domínio V devido à diferença entre os campos de velocidade, $\mathbf{u}^d = \mathbf{u} - \mathbf{u}'$, é dada por

$$\Phi_V^d = 2\mu \int_V \mathbf{E}^d : \mathbf{E}^d dV, \quad (\text{A.4})$$

em que $\mathbf{E}^d = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u}^d + (\nabla \mathbf{u}^d)^T]$ e $\nabla \mathbf{u}^d = \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}'$ são os tensores taxa de deformação e gradiente de velocidade associados ao campo \mathbf{u}^d , respectivamente. Sendo $\nabla \mathbf{u}^d = \mathbf{E}^d + \mathbf{W}^d$, em que \mathbf{E}^d é simétrico e \mathbf{W}^d é antissimétrico, segue que $\mathbf{E}^d : \nabla \mathbf{u}^d = \mathbf{E}^d : \mathbf{E}^d$, desde que $\mathbf{E}^d : \mathbf{W}^d = 0$. Além disso, notando que $\mathbf{E}^d : \nabla \mathbf{u}^d = \nabla \cdot (\mathbf{E}^d \cdot \mathbf{u}^d) - (\nabla \cdot \mathbf{E}^d) \cdot \mathbf{u}^d$ e $\nabla \cdot \mathbf{E}^d = \frac{1}{2} \nabla^2 \mathbf{u}^d$, a equação (A.4) pode ser reescrita como

$$\Phi_V^d = 2\mu \int_V \nabla \cdot (\mathbf{E}^d \cdot \mathbf{u}^d) dV - \int_V \mu \nabla^2 \mathbf{u}^d \cdot \mathbf{u}^d dV. \quad (\text{A.5})$$

Das equações de Stokes, segue que $\mu \nabla^2 \mathbf{u}^d = \nabla p^d$, em que $p^d = p - p'$. Além disso, aplicando o Teorema da Divergência de Gauss na primeira integral de (A.5), segue que

$$\Phi_V^d = 2\mu \int_S \mathbf{E}^d \cdot \mathbf{u}^d \cdot \mathbf{n} dS - \int_V \nabla p^d \cdot \mathbf{u}^d dV. \quad (\text{A.6})$$

Note que $\nabla p^d \cdot \mathbf{u}^d = \nabla \cdot (p^d \mathbf{u}^d)$, pois $\nabla \cdot \mathbf{u}^d = 0$. Assim sendo, substituindo esse resultado em (A.6) e aplicando novamente o Teorema da Divergência de Gauss, dessa vez na segunda integral, segue que

$$\Phi_V^d = 2\mu \int_S \mathbf{E}^d \cdot \mathbf{u}^d \cdot \mathbf{n} dS - \int_S p^d \mathbf{u}^d \cdot \mathbf{n} dS. \quad (\text{A.7})$$

Finalmente, vale lembrar que \mathbf{u} e \mathbf{u}' satisfazem as condições de contorno em S , de forma que $\mathbf{u} = \mathbf{u}'$ sobre a superfície; assim, $\mathbf{u}^d(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \forall \mathbf{x} \in S$. Portanto, as duas integrais de (A.7) são identicamente nulas. Dessa forma, se o escoamento é governado pelas equações de Stokes, segue que $\Phi_V^d = 0$. Voltando à definição de Φ_V^d dada pela equação (A.4), é possível observar que o integrando dessa equação é uma quantidade não nula. Assim, desde que o volume de integração é arbitrário e \mathbf{E}^d é um campo contínuo, conclui-se que $\mathbf{E}^d = \mathbf{0}$; isto é, $\mathbf{E} = \mathbf{E}'$ em todo volume. Sendo assim, \mathbf{u} e \mathbf{u}' podem diferir apenas por um movimento de corpo rígido. Todavia, desde que esses campos sejam idênticos sobre a superfície – já que devem atender às condições de contorno –, conclui-se que $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}'(\mathbf{x}) \forall \mathbf{x} \in V$, requerendo a unicidade da solução das equações de Stokes como consequência direta de sua linearidade (Kim & Karilla, 1991).

A.5 Teorema da mínima dissipação de energia

Sejam dois escoamentos (\mathbf{u}, p) e (\mathbf{u}', p') incompressíveis e que satisfazem as condições de contorno em um certo domínio V , delimitado pela superfície S . Considere ainda que o escoamento (\mathbf{u}, p) satisfaz as equações de Stokes, enquanto (\mathbf{u}', p') não o faz necessariamente. O teorema da mínima dissipação de energia diz que (\mathbf{u}, p) tem a menor taxa de dissipação de energia interna dentre todos os demais escoamentos incompressíveis que satisfazem as condições de contorno em S . Esse fato pode ser demonstrado¹ a partir da expressão para a taxa de dissipação de energia de (\mathbf{u}', p') no volume V ,

$$\Phi'_V = 2\mu \int_V \mathbf{E}' : \mathbf{E}' dV. \quad (\text{A.8})$$

Além disso, por meio de desenvolvimentos semelhantes aos utilizados para demonstrar a unicidade da solução das equações de Stokes, é possível mostrar que

$$\Phi'_V = \int_V (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) : \mathbf{E} dV = 0. \quad (\text{A.9})$$

Então, subtraindo (A.8) de (A.9) segue que

$$\begin{aligned} \Phi'_V &= 2\mu \int_V [\mathbf{E}' : \mathbf{E}' - (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) : \mathbf{E}] dV \\ &= 2\mu \int_V [\mathbf{E} : \mathbf{E} + (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) : \mathbf{E}'] dV. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

¹ Uma outra demonstração baseada em princípios geométricos em um espaço de tensores de segunda ordem é descrita por Kim & Karilla (1991).

Novamente, subtraindo (A.10) de (A.8) obtemos

$$\begin{aligned}\Phi'_V &= 2\mu \int_V [\mathbf{E} : \mathbf{E} + (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) : \mathbf{E}' - (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) : \mathbf{E}] dV \\ &= 2\mu \int_V [\mathbf{E} : \mathbf{E} + (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) : (\mathbf{E}' - \mathbf{E})] dV.\end{aligned}\quad (\text{A.11})$$

Por fim, combinando as equações (A.8) e (A.11) temos que

$$\Phi'_V = 2\mu \int_V \mathbf{E}' : \mathbf{E}' dV = 2\mu \int_V \mathbf{E} : \mathbf{E} dV + 2\mu \int_V (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) : (\mathbf{E}' - \mathbf{E}) dV. \quad (\text{A.12})$$

Note que a segunda integral do lado direito da equação (A.12) é sempre uma quantidade não negativa. Assim sendo,

$$2\mu \int_V \mathbf{E} : \mathbf{E} dV \leq 2\mu \int_V \mathbf{E}' : \mathbf{E}' dV, \quad (\text{A.13})$$

que mostra que a taxa de dissipação de energia mecânica em energia interna de \mathbf{u} é sempre menor que a mesma taxa de \mathbf{u}' ; isto é, $\Phi_V \leq \Phi'_V$. Do ponto de vista analítico, esse resultado pode ser interpretado como um princípio variacional segundo o qual a solução das equações de Stokes em um determinado domínio e sujeito à condições de contorno específicas é aquela que promove a mínima taxa de dissipação do escoamento por ação viscosa (Evans, 1998).

APÊNDICE B – Salto de tensões através de uma interface entre dois fluidos

É importante notar que a diferença fundamental entre um líquido e um gás é que nos líquidos as moléculas atraem-se mutuamente com intensidade suficiente para impedir a vaporização. Todavia, as moléculas de um líquido ainda são relativamente livres para transladar e rotacionar umas em relação às outras. Dessa maneira, no interior de um líquido, as moléculas estão sujeitas à forças atrativas em todas as direções. No caso de uma interface entre dois líquidos imiscíveis (ou entre um líquido e um gás), as partículas de líquido são atraídas por suas vizinhas para dentro do volume de fluido. Assim sendo, as moléculas do líquido sofrem uma força resultante perpendicular à interface de separação e orientada para o interior do próprio líquido. Portanto, as moléculas em uma interface líquida estão sempre movimentando-se para dentro do líquido, provocando um efeito de redução da área superficial que delimita o material. A contração espontânea da superfície pode ser entendida como uma quantidade de energia livre associada a um trabalho exercido pela interface. Em muitos problemas que tratam de interfaces fluidas, essa energia livre por unidade de área superficial é substituída por uma tensão superficial que atua em todas as direções paralelas à superfície. Assim sendo, é possível concluir que a origem física da tensão superficial está associada à tendência de uma superfície líquida contrair-se espontaneamente, tendendo a admitir a configuração de mínima área (Adam, 1968).

Inserido nesse contexto, é possível obter um modelo constitutivo para a tensão exercida pela interface sobre a superfície do fluido. Dessa maneira, estamos interessados em determinar o salto de tensões $\Delta \mathbf{f}$ através da superfície de separação. Considerando então o equilíbrio mecânico da interface, o balanço de forças sobre a superfície é tal que

$$\int_S \Delta \mathbf{f} dS - \int_C \sigma (\mathbf{n} \times \mathbf{t}) dl = \mathbf{0}, \quad (\text{B.1})$$

em que σ é denominado coeficiente de tensão superficial, cuja dimensão é de tensão por unidade de comprimento. Além disso, $\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$ é o vetor binormal da superfície S , a qual delimita o contorno C . Considere ainda a seguinte variação do Teorema de Stokes,

$$\int_C \mathbf{F} \times \mathbf{t} dl = \int_S [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{F} - \nabla \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}] dS, \quad (\text{B.2})$$

em que \mathbf{F} é um vetor arbitrário e \mathbf{n} é diferenciável em toda a extensão de S . Fazendo $\mathbf{F} = \sigma \mathbf{n}$, a equação (B.1) pode ser reescrita como

$$\int_S \Delta \mathbf{f} dS = \int_S [\mathbf{n} \nabla \cdot (\sigma \mathbf{n}) - \nabla(\sigma \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}] dS. \quad (\text{B.3})$$

Note que $\mathbf{n} \nabla \cdot (\sigma \mathbf{n}) = (\sigma \nabla \cdot \mathbf{n}) + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \nabla \sigma$. Por outro lado, tem-se que $\nabla(\sigma \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = (\nabla \sigma \mathbf{n} + \sigma \nabla \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$ e $\nabla \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = (1/2) \nabla(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) = \mathbf{0}$. Assim, desde que $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$, segue que $\nabla(\sigma \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = \nabla \sigma$. Portanto, a equação (B.3) reduz-se a

$$\int_S \Delta \mathbf{f} dS = \int_S [(\sigma \nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \nabla \sigma - \nabla \sigma] dS. \quad (\text{B.4})$$

Desde que S é uma superfície arbitrária, mostra-se que

$$\Delta \mathbf{f} = (\sigma \nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} - (\mathbf{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}) \cdot \nabla \sigma. \quad (\text{B.5})$$

Na equação (B.5) é possível observar que o salto de tensões possui componentes tanto na direção normal, $(\sigma \nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}$, quanto na direção tangencial, $(\mathbf{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}) \cdot \nabla \sigma$. O vetor gradiente pode ser entendido como um gradiente superficial, visto que as integrais na equação (B.4) são realizadas sobre a superfície S . Vale notar que o salto de tensões tangenciais é importante apenas caso exista gradiente do coeficiente de tensão superficial, isto é, apenas quando $\nabla \sigma \neq \mathbf{0}$. Usualmente esses gradientes estão relacionados à distribuições de tensoativos ou surfactantes na superfície ou variações de temperatura na interface.