



UM MÉTODO SEMI-LAGRANGEANO PARA A SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Rafael Araujo Vidal

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-graduação em Engenharia
Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do
Rio de Janeiro.

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos

Rio de Janeiro
Julho de 2023

UM MÉTODO SEMI-LAGRANGEANO PARA A SIMULAÇÃO DE
ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Rafael Araujo Vidal

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE
ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU
DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos

Aprovada por: Prof. Gustavo Rabello dos Anjos

Prof. Roney Leon Thompson

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

JULHO DE 2023

Araujo Vidal, Rafael

Um Método Semi-Lagrangeano para a Simulação de Escoamentos Bifásicos/Rafael Araujo Vidal. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2023.

XIII, 125 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Mecânica, 2023.

Referências Bibliográficas: p. 122 – 125.

1. Escoamentos Bifásicos.
 2. Método dos Elementos Finitos.
 3. Semi-Lagrangeano.
 4. Acompanhamento da Interface.
- I. Rabello dos Anjos, Gustavo. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

Agradecimentos

Aos meus pais, José e Valéria, pela excepcional educação, pelo inspirador exemplo e pelas diversas oportunidades que me concederam durante toda a minha vida.

À minha família – em especial, minha avó Cely; minha irmã, Camila; e meus padrinhos, Bianca e Júnior – pelo apoio incondicional ao longo de todos os meus anos de estudo.

Ao Professor Gustavo Rabello, por seu incansável apoio, sua constante disponibilidade e sua excelente orientação – os quais foram fundamentais para o sucesso deste projeto.

Aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica e aos demais professores dos quais fui aluno, pela valiosa contribuição que deram à minha formação como engenheiro.

A todos os meus amigos, pela inestimável companhia e pela incessante parceria, que, direta ou indiretamente, ajudaram a enfrentar os desafios ao longo deste percurso.

Aos colegas e amigos da RSA Engenharia e da TechnipFMC, por todos os aprendizados que obtive ao longo da minha vida profissional.

A todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho e para a minha formação.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

UM MÉTODO SEMI-LAGRANGEANO PARA A SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Rafael Araujo Vidal

Julho/2023

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos

Programa: Engenharia Mecânica

Este trabalho tem como objetivo apresentar uma abordagem computacional para estudar escoamentos bifásicos utilizando simulação numérica direta. Os escoamentos são modelados pelas equações de Navier-Stokes bidimensionais incompressíveis, que são aproximadas pelo Método dos Elementos Finitos. Utilizam-se o método de Galerkin para discretizar as equações no domínio espacial e o método semi-Lagrangeano para discretizar a derivada material no domínio espaço-temporal. Uma malha triangular estática não estruturada é definida em toda a extensão do domínio espacial. Para satisfazer a condição de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi, foram empregados os elementos mini e quadrático, com os campos de pressão e velocidade sendo calculados em diferentes conjuntos de nós da malha triangular. A interface é modelada por uma malha unidimensional móvel e adaptativa, segundo um método de acompanhamento da interface, no qual os pontos conectados que a compõem são movidos com a velocidade imposta pela malha triangular estática. A tensão interfacial é calculada a partir da curvatura da interface e do gradiente de uma função de Heaviside, sendo posteriormente incluída nas equações de Navier-Stokes como uma força de corpo. Para garantir a estabilidade da simulação, uma transição suave entre as propriedades dos fluidos é definida na região da interface. Além disso, é proposto um modelo de coalescência no qual duas bolhas se fundem em uma única quando a distância entre elas atinge um valor mínimo baseado no nível de refinamento da malha. Vários escoamentos de referência – como a gota oscilante, a bolha em ascensão e a instabilidade de Rayleigh-Taylor – foram simulados para validar a metodologia proposta, e seus resultados mostraram uma substancial compatibilidade com soluções analíticas e resultados relatados na literatura. Portanto, a abordagem apresentada é validada como um método acurado para a descrição de escoamentos bifásicos.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

A SEMI-LAGRANGIAN METHOD FOR TWO-PHASE FLOW SIMULATION

Rafael Araujo Vidal

July/2023

Advisor: Gustavo Rabello dos Anjos

Department: Mechanical Engineering

This work aims to present a computational approach to study two-phase flows using direct numerical simulation. The flows are modeled by the two-dimensional incompressible Navier-Stokes equations, which are approximated using the Finite Element Method. The Galerkin formulation is employed to discretize the Navier-Stokes equations in the spatial domain, while the semi-Lagrangian method is used to discretize the material derivative in the spatio-temporal domain. A static unstructured triangular mesh is defined in the entire spatial domain. In order to satisfy the Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi condition, the mini and the quadratic elements are used, with pressure and velocity fields being calculated on different sets of the triangular mesh nodes. The interface is modeled using an adaptive moving one-dimensional mesh, according to an interface-tracking method, in which connected marker points are moved with the imposed velocity of the static triangular mesh. The interfacial tension is calculated using the interface curvature and a Heaviside function gradient, and then included in the Navier-Stokes equations as a body force. To ensure simulation stability, a smooth transition between fluid properties is defined in the interface region. A coalescence modeling approach is proposed, whereby two bubbles merge into a single one when the distance between them decreases to a minimum threshold based on the mesh refinement level. Several benchmark tests – such as the oscillating droplet, the rising bubble and the Rayleigh-Taylor instability – have been conducted to validate the proposed approach, and the obtained results have demonstrated substantial agreement with analytical solutions and results reported in literature. Based on this strong agreement with theory, experimental data and reference results, the presented approach is validated as an accurate method for describing diverse two-phase flow phenomena.

Sumário

Lista de Figuras	h
Lista de Tabelas	m
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	5
2.1 Simulação de Escoamentos Bifásicos	5
2.2 Representação da Interface	7
2.3 Método Semi-Lagrangeano	9
3 Metodologia	14
3.1 Equações Governantes	14
3.1.1 Conservação da Massa	14
3.1.2 Conservação da Quantidade de Movimento	15
3.1.3 Equações Adimensionais de Navier-Stokes	16
3.1.4 Condições Iniciais e de Contorno	20
3.2 Método dos Elementos Finitos	21
3.2.1 Formulação Variacional	21
3.2.2 Método de Galerkin	24
3.2.3 Elementos de Malha	30
3.2.4 Método Semi-Lagrangeano	33
3.2.5 Passo Temporal	38
3.3 Representação da Interface	39
3.3.1 Atribuição das Propriedades	39
3.3.2 Cálculo de Curvatura	41
3.3.3 Modelagem da Tensão Interfacial	42
3.3.4 Refinamento da Interface	43
3.4 Formulação e Resolução do Problema	43
3.4.1 Definição do Sistema Linear	44
3.4.2 Imposição das Condições de Contorno	44
3.4.3 Resolução do Sistema Linear	45

3.4.4	Movimentação da Interface	45
3.5	Pós-Processamento da Interface	46
3.5.1	Remalhamento da Interface	47
3.5.2	Mudanças Topológicas	48
3.6	Implementação Computacional	50
4	Validação e Resultados	52
4.1	Escoamentos Monofásicos	52
4.1.1	Escoamento entre Placas Planas	53
4.1.2	Escoamento em uma Cavidade	56
4.2	Escoamentos Bifásicos	63
4.2.1	Bolha Estática	64
4.2.2	Gota Oscilante	68
4.2.3	Bolha em Ascensão	76
4.2.4	Instabilidade de Rayleigh-Taylor	89
4.2.5	Coalescência de Duas Bolhas	93
4.2.6	Coalescência de Duas Bolhas de Taylor	113
5	Conclusão	119
5.1	Trabalhos Futuros	120
Referências Bibliográficas		122

Listas de Figuras

1.1	Evolução da coalescência de duas bolhas. Adaptado de FENG <i>et al.</i> [1].	1
1.2	Padrões de escoamentos bifásicos em dutos verticais, capturados por QIAO <i>et al.</i> [2] em experimentos com sistemas ar-água.	2
3.1	Discretização de um domínio em elementos triangulares.	24
3.2	Coordenadas baricêtricas de um elemento triangular.	31
3.3	Elemento mini.	32
3.4	Elemento quadrático.	33
3.5	Método semi-Lagrangeano.	35
3.6	Definição dos ângulos θ_1 , θ_2 e θ_3	35
3.7	Ilustração do algoritmo de procura do elemento que contém \mathbf{x}_d	37
3.8	Subdivisão do domínio em duas fases.	40
3.9	Ilustração do cálculo de curvatura da interface.	42
3.10	Exemplo de configurações inicial e final da interface na simulação de uma bolha em ascensão.	46
3.11	Configuração da interface após o remalhamento.	48
3.12	Exemplo de configurações inicial e final da interface no processo de coalescência de duas bolhas.	49
4.1	Geometria e condições de contorno do escoamento entre placas planas.	53
4.2	Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento entre placas planas com a malha de elementos quadráticos.	54
4.3	Comparação entre os perfis de velocidade horizontal obtidos nas simulações do escoamento entre placas planas e o perfil analítico.	55
4.4	Geometria e condições de contorno do escoamento em uma cavidade.	56
4.5	Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento em uma cavidade com a malha de elementos quadráticos e $Re = 10$	57

4.6	Comparação entre os perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 10$	58
4.7	Comparação entre os perfis de velocidade vertical em $x = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 10$	58
4.8	Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento em uma cavidade com a malha de elementos quadráticos e $Re = 100$	59
4.9	Comparação entre os perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 100$	60
4.10	Comparação entre os perfis de velocidade vertical em $x = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 100$	60
4.11	Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento em uma cavidade com a malha de elementos quadráticos e $Re = 1000$	61
4.12	Comparação entre os perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 1000$	62
4.13	Comparação entre os perfis de velocidade vertical em $x = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 1000$	62
4.14	Geometria inicial do problema da bolha estática.	65
4.15	Campo de pressão obtido ao final da simulação do problema da bolha estática com a malha de elementos quadráticos.	66
4.16	Comparação entre o perfil horizontal de pressão obtido ao final da simulação e o perfil analítico, para o problema da bolha estática com a malha de elementos mini.	67
4.17	Comparação entre o perfil horizontal de pressão obtido ao final da simulação e o perfil analítico, para o problema da bolha estática com a malha de elementos quadráticos.	68
4.18	Geometria inicial do escoamento da gota oscilante (com a excentricidade da elipse acentuada, para fins de ilustração).	69
4.19	Campo de velocidade horizontal ao longo da simulação do escoamento da gota oscilante com a malha de elementos quadráticos e $h = 1$	71
4.20	Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 0$	72

4.21 Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 1$	72
4.22 Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 3$	73
4.23 Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 5$	73
4.24 Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 10$	74
4.25 Frequências de oscilação obtidas na simulação do escoamento da gota oscilante, com diferentes tipos de elemento e razões de espessura da região da interface.	75
4.26 Geometria inicial do escoamento da bolha em ascensão.	77
4.27 Geometria da interface em diferentes instantes da simulação da bolha em ascensão com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$	80
4.28 Geometria da interface no instante $t = 3$ da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$	81
4.29 Evolução da posição vertical do centroide da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$	82
4.30 Evolução da circularidade da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$	83
4.31 Geometria da interface em diferentes instantes da simulação da bolha em ascensão com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$	85
4.32 Geometria da interface no instante $t = 3$ da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$	86
4.33 Evolução da posição vertical do centroide da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$	87
4.34 Evolução da circularidade da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$	88
4.35 Geometria inicial da simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor. .	89
4.36 Evolução da simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor com a malha de elementos quadráticos.	91
4.37 Comparação entre a geometria da interface em determinados instantes da simulação e o resultado de referência, para a instabilidade de Rayleigh-Taylor.	92
4.38 Geometria inicial do escoamento com a coalescência de duas bolhas. .	93

4.39 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.	95
4.40 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.	96
4.41 Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas com elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.	97
4.42 Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas com elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.	98
4.43 Geometria da interface em determinados instantes da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.	98
4.44 Geometria da interface em determinados instantes da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.	99
4.45 Geometria da interface em determinados instantes do experimento da coalescência de duas bolhas conduzido por MANASSEH <i>et al.</i> [3].	99
4.46 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 1$.	101
4.47 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 10$.	102
4.48 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 50$.	103
4.49 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 100$.	104
4.50 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 5$ e $Eo = 5$.	105
4.51 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 50$ e $Eo = 5$.	106

4.52 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 100$ e $Eo = 5$	107
4.53 Geometria das bolhas no instante imediatamente anterior à coalescência, para as simulações com $Ga^{1/2} = 10$ e diferentes números de Eötvös.	108
4.54 Evolução da posição vertical do centroide das bolhas ao longo das simulações da coalescência de duas bolhas com $Ga^{1/2} = 10$ e diferentes números de Eötvös.	110
4.55 Geometria das bolhas no instante imediatamente anterior à coalescência, para as simulações com $Eo = 5$ e diferentes números de Galileu.	111
4.56 Evolução da posição vertical do centroide das bolhas ao longo das simulações da coalescência de duas bolhas com $Eo = 5$ e diferentes números de Galileu.	112
4.57 Geometria inicial do escoamento com a coalescência de duas bolhas de Taylor.	114
4.58 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos mini. . . .	116
4.59 Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos mini.	116
4.60 Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos quadráticos.	117
4.61 Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos quadráticos.	117
4.62 Evolução da posição vertical do centroide das bolhas ao longo das simulações da coalescência de duas bolhas de Taylor.	118

Listas de Tabelas

4.1	Duração das simulações do escoamento entre placas planas.	54
4.2	Erros das simulações do escoamento entre placas planas.	56
4.3	Duração das simulações do escoamento em uma cavidade com $Re = 10$. .	57
4.4	Duração das simulações do escoamento em uma cavidade com $Re = 100$. .	59
4.5	Duração das simulações do escoamento em uma cavidade com $Re = 1000$	61
4.6	Erros das simulações do escoamento em uma cavidade.	63
4.7	Duração das simulações do problema da bolha estática.	66
4.8	Pressões internas e erros obtidos nas simulações do problema da bolha estática.	68
4.9	Duração das simulações do escoamento da gota oscilante.	70
4.10	Frequências de oscilação e erros obtidos nas simulações do escoamento da gota oscilante, com diferentes tipos de elemento e razões de espes- sura da região da interface.	75
4.11	Duração das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$	78
4.12	Erros das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$, quanto à circularidade e à posição vertical do centroide da bolha. . .	83
4.13	Duração das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$	84
4.14	Erros das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$, quanto à circularidade e à posição vertical do centroide da bolha.	88
4.15	Duração das simulações da instabilidade de Rayleigh-Taylor.	90
4.16	Duração das simulações da coalescência de duas bolhas com $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$	94
4.17	Números adimensionais e duração das novas simulações da coalescên- cia de duas bolhas.	100
4.18	Duração das simulações da coalescência de duas bolhas de Taylor. . .	115

Capítulo 1

Introdução

Os escoamentos bifásicos são fenômenos extremamente complexos que estão presentes em uma ampla gama de ocorrências no nosso cotidiano, que englobam desde processos industriais até fenômenos naturais e biológicos. A atmosfera, o petróleo, a corrente sanguínea – todos esses sistemas envolvem mais de uma fase, o que torna os escoamentos bifásicos amplamente estudados em diversas áreas da engenharia – como a engenharia mecânica, a engenharia nuclear e a engenharia de petróleo – e da ciência – como a química, a medicina e a meteorologia.

Sua complexidade decorre das dinâmicas interações entre as fases, principalmente em sistemas envolvendo mais de um fluido – que são o foco deste trabalho –, nos quais as fronteiras entre as fases são móveis e as possíveis formas de interação entre elas ocasionam uma grande variedade de fenômenos. Muitos desses fenômenos, como a coalescência e a quebra de bolhas, ainda são problemas em aberto, que podem envolver efeitos a nível molecular que até a atualidade não são completamente conhecidos. A Figura 1.1 exibe fotografias da evolução da coalescência de duas bolhas em um experimento com um sistema ar-glicerina.

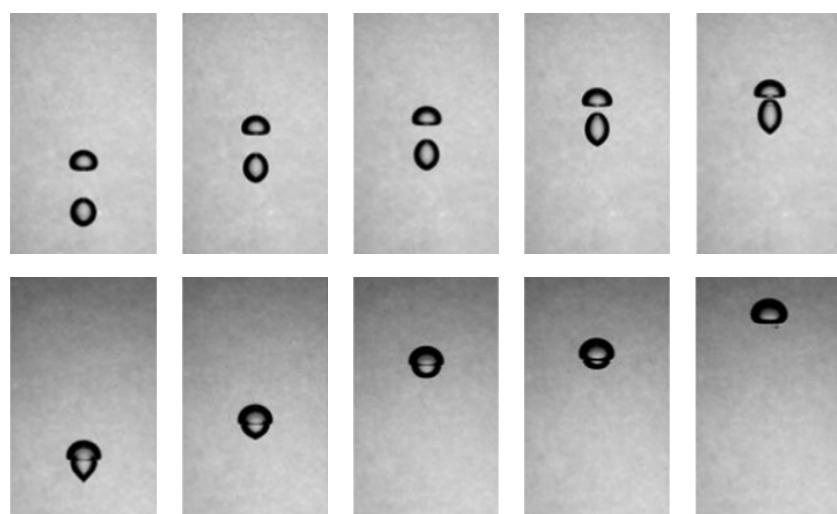


Figura 1.1: Evolução da coalescência de duas bolhas. Adaptado de FENG *et al.* [1].

A depender das condições do escoamento – como a vazão mássica, a proporção entre as fases e a densidade e a viscosidade dos fluidos envolvidos –, diversas distribuições características das geometrias das fases podem ser formadas, como mostra a Figura 1.2. Essas distribuições, denominadas padrões de escoamento, não apenas representam distinções visuais, como também exercem influência direta sobre muitas de suas propriedades, como os gradientes de pressão relacionados à perda de carga e os coeficientes de troca de calor.

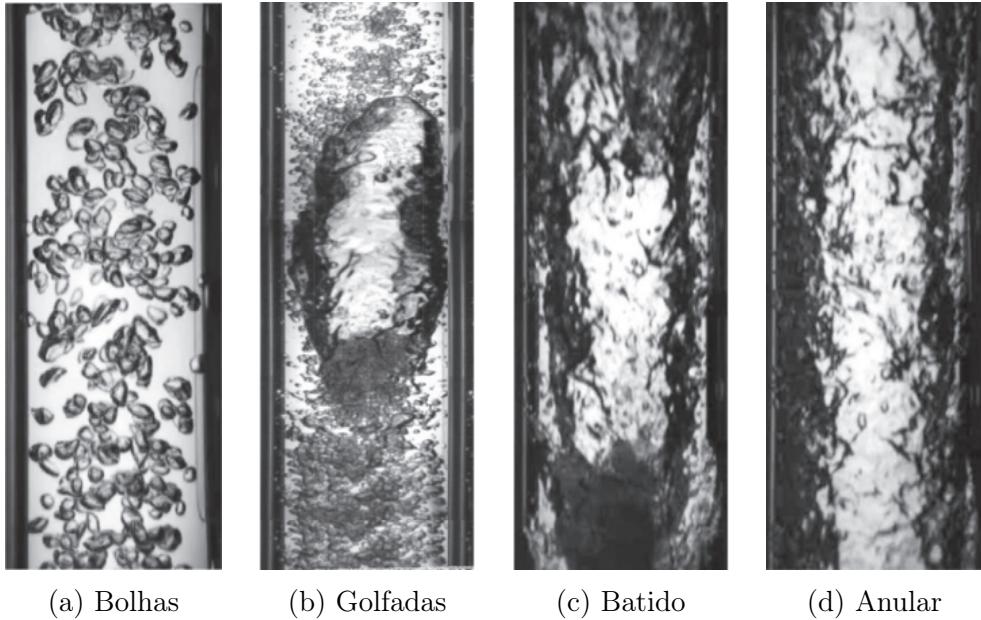


Figura 1.2: Padrões de escoamentos bifásicos em dutos verticais, capturados por QIAO *et al.* [2] em experimentos com sistemas ar-água.

Em escoamentos com bolhas, a fase gasosa se encontra distribuída de maneira dispersa ao longo da fase líquida contínua, na forma de pequenas bolhas; em escoamentos com golfadas, a fase gasosa se concentra em bolhas de tamanho expressivo, denominadas bolhas de Taylor, com diâmetro levemente inferior ao do duto, e os efeitos das paredes sobre sua dinâmica tornam-se mais relevantes; em escoamentos batidos, a elevada velocidade leva à quebra das golfadas, levando a uma distribuição caótica do fluido, cuja interface não é claramente definida; e em escoamentos anulares, a fase gasosa torna-se contínua e ocupa o centro do escoamento, enquanto um filme líquido se forma nas paredes do duto. Assim, nota-se que fenômenos completamente distintos estão presentes em cada tipo de escoamento bifásico, e, portanto, sua correta modelagem mostra-se essencial para sua aplicação na engenharia.

Fundamentado na importância desse tema para a compreensão dos fenômenos da natureza e para o aprimoramento dos processos industriais e da própria atividade humana, o presente trabalho tem como objetivo apresentar um método computacional baseado em simulação numérica direta para o estudo dos escoamentos bifásicos.

Para fins de organização, o conteúdo deste trabalho se divide da seguinte forma:

- Capítulo 1: Introdução;
- Capítulo 2: Revisão Bibliográfica;
- Capítulo 3: Metodologia;
- Capítulo 4: Validação e Resultados;
- Capítulo 5: Conclusão.

O Capítulo 1 é constituído pela presente introdução ao tema e ao trabalho, contendo os principais aspectos de sua organização.

No Capítulo 2, é apresentada uma revisão bibliográfica, dividida em três temas de interesse. Inicialmente, trata-se dos escoamentos bifásicos e de alguns aspectos relacionados a sua simulação computacional, expondo não apenas uma introdução específica ao tema mas, principalmente, uma motivação para a própria elaboração deste trabalho. Um segundo tema abordado são as diferentes formas de representação da interface entre os fluidos, devido ao fato de a descrição da interface ser um dos pontos mais críticos para se obter uma acurada modelagem de um escoamento bifásico. Por fim, expõe-se uma revisão bibliográfica com um viés histórico sobre o método semi-Lagrangeano, pelo fato de este ser a principal particularidade da metodologia proposta com relação à maior parte dos demais estudos presentes na literatura sobre o tema. A revisão dos assuntos supracitados permite apurar as diversas possíveis abordagens para a modelagem de um escoamento bifásico, e a análise de suas vantagens e desvantagens possibilita uma seleção criteriosa das técnicas a serem contempladas na metodologia proposta neste trabalho.

Então, no Capítulo 3, expõe-se a metodologia proposta para a simulação de escoamentos bifásicos. Em resumo, os escoamentos são modelados pelas equações de Navier-Stokes bidimensionais incompressíveis, que são aproximadas pelo Método dos Elementos Finitos. O método de Galerkin é utilizado para discretizar as equações no domínio espacial, e o método semi-Lagrangeano é utilizado para discretizar a derivada material no domínio espaço-temporal. Utiliza-se uma abordagem do tipo *one-fluid*, por meio da qual o domínio ocupado pelas duas fases do escoamento é descrito por um único conjunto de equações. Uma malha triangular estática não estruturada é definida em toda a extensão do domínio espacial, e uma malha unidimensional móvel e adaptativa é definida na interface entre os fluidos. Os pontos que compõem a malha da interface são movidos com a velocidade imposta pela malha triangular, segundo uma abordagem denominada acompanhamento da interface ou, em sua nomenclatura mais usual, *interface-tracking*. Além disso, para avaliar

a aplicabilidade da metodologia para descrever a ocorrência de escoamentos com mudanças topológicas, é proposto um modelo de coalescência no qual duas bolhas se fundem em uma única quando a distância entre elas atinge um valor mínimo baseado no nível de refinamento da malha. A metodologia proposta foi implementada em um código na linguagem *Python*, descrito por meio de um pseudocódigo ao final desse capítulo.

O Capítulo 4 expõe os resultados das simulações que foram efetuadas a partir do código implementado, com o intuito de validar a metodologia. Além dos resultados, expõem-se para cada caso todos os dados de entrada do escoamento, os principais parâmetros das malhas utilizadas e a duração de cada simulação, a fim de permitir uma fácil reprodução e verificação por pares de todos os resultados disponíveis neste trabalho. Inicialmente, foram simulados o escoamento entre placas planas e o escoamento em uma cavidade, com o intuito de validar a aplicação da metodologia a escoamentos monofásicos e, portanto, mais simples. Em seguida, validou-se a metodologia para escoamentos bifásicos de interesse, a destacar: a bolha estática, a gota oscilante, a bolha em ascensão e a instabilidade de Rayleigh-Taylor. Por fim, para validar também a abordagem proposta para a descrição do fenômeno da coalescência bem como para verificar a aplicabilidade da metodologia a escoamentos que envolvem mudanças topológicas, simulou-se a coalescência de duas bolhas inicialmente circulares e de duas bolhas de Taylor. Os resultados obtidos para as referidas simulações mostraram uma substancial compatibilidade com soluções analíticas e com resultados de simulações e experimentos relatados na literatura, corroborando a validade da metodologia para a descrição dos escoamentos bifásicos. Além dos casos simulados para validação, algumas simulações de interesse foram executadas a fim de investigar a influência de determinados parâmetros sobre os resultados dos escoamentos, e as conclusões obtidas a partir dessas análises também constam nesse capítulo.

Por fim, o Capítulo 5 contém as conclusões globais obtidas com o desenvolvimento desta dissertação e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo, expõe-se uma revisão bibliográfica sobre os escoamentos bifásicos e alguns dos principais aspectos relacionados a sua simulação computacional. Sua função é apresentar o tema de forma específica, mostrando e analisando as diversas possíveis abordagens a serem seguidas, de modo a elucidar as escolhas realizadas na elaboração da metodologia proposta neste trabalho.

Para fins de organização, este capítulo está subdividido em três seções, que tratam de cada um dos principais temas que foram revisados:

- a simulação de escoamentos bifásicos;
- a representação da interface;
- e o método semi-Lagrangeano.

2.1 Simulação de Escoamentos Bifásicos

Os escoamentos multifásicos estão presentes em uma variedade de fenômenos da natureza e de aplicações industriais. A atmosfera, as ondas do mar, a circulação sanguínea e diversos outros escoamentos presentes no nosso cotidiano são caracterizados pela presença de mais de uma fase. Na indústria, a atual conjuntura não é diferente. Sistemas de arrefecimento com fluidos em mudança de fase são utilizados em uma vasta gama de aplicações, que vão desde componentes eletrônicos até usinas nucleares. A queima de combustíveis líquidos, também essencial para parte relevante das atividades humanas, geralmente é precedida por sua atomização em gotículas, para a formação de uma mistura ar-combustível com maior superfície de contato. A extração de petróleo envolve o escoamento simultâneo de óleo, gás e água, além de eventuais partículas sólidas.

Enfim, como constatado por TRYGGVASON *et al.* [4], não seria exagero afirmar que praticamente todas as aplicações industriais de fluidos na atualidade envolvem escoamentos com mais de uma fase. Dessa afirmação, pode-se derivar que o desenvolvimento de métodos para o estudo e a simulação de escoamentos multifásicos e, em particular, de escoamentos bifásicos – que consiste no escopo deste trabalho –, tem grande relevância não apenas para a compreensão e a previsão dos fenômenos da natureza, como também para o aprimoramento da atividade industrial.

Uma possível abordagem para a simulação de escoamentos bifásicos é a descrição das fases do escoamento de forma independente, por meio de um conjunto de equações para cada uma delas, além de um conjunto de equações para acoplamento das fases que garanta a consistência física da simulação. Essa abordagem é usualmente denominada *two-fluid*. Uma alternativa a essa descrição é a modelagem denominada *one-fluid*, pela qual se escreve um único conjunto de equações para descrever todo o domínio ocupado pelas diferentes fases. O fluido tratado como único, entretanto, é descrito com uma abrupta variação de propriedades na região da interface, de modo a se assimilar ao caso real com diferentes fases. Nesta abordagem, diferentemente da descrição *two-fluid*, não há a necessidade de um conjunto de equações de acoplamento entre as fases. Todavia, torna-se necessária a inclusão da tensão interfacial como uma força localizada na região da interface.

YE *et al.* [5] executaram uma análise comparativa entre as referidas formulações, aplicadas à simulação de uma gota em equilíbrio estático. Foi verificado que a formulação *one-fluid* requer um menor custo computacional, mas, em contrapartida, pode levar à geração de velocidades espúrias na região da interface que comprometem a acurácia dos resultados da simulação. RAJKOTWALA *et al.* [6] também realizaram um estudo comparativo entre as formulações *one-fluid* e *two-fluid*, aplicadas a problemas relacionados à mudança de fase, como o crescimento de uma bolha imersa em líquido supersaturado. Também foi constatado que a abordagem *one-fluid* possuía algumas desvantagens, como uma menor acurácia, uma menor taxa de convergência e o surgimento de flutuações no campo de velocidade. Ainda assim, verificou-se que ambas as formulações levaram a uma elevada concordância dos resultados dos problemas investigados com soluções analíticas e experimentais.

Por prescindir de um conjunto de equações para acoplamento entre as fases e requerer um menor custo computacional, a formulação *one-fluid* cumpriu um importante papel na simulação de escoamentos bifásicos em diferentes áreas do conhecimento. TRUJILLO [7] observa que, a partir da década de 1990 e especialmente da última década, a formulação *one-fluid* passou a ser utilizada para a modelagem de escoamentos envolvendo fenômenos mais complexos, em particular a mudança de fase. Ele verifica que as formulações *one-fluid* usualmente aplicadas são inconsistentes fisicamente para a descrição desse fenômeno e propõe uma formulação *one-fluid*

generalizada capaz de descrevê-lo de forma mais precisa, respeitando tanto as propriedades da interface como as do fluido em mudança de fase. Ainda que com ressalvas, TRUJILLO [7] verifica que um modelo de fluido único é capaz de fornecer bons resultados mesmo para fenômenos complexos como a mudança de fase.

Por aliar uma adequada representação dos fenômenos bifásicos a um reduzido custo computacional, a formulação *one-fluid* foi escolhida para compor a metodologia proposta neste trabalho.

2.2 Representação da Interface

Um dos pontos mais críticos para uma acurada modelagem de um escoamento bifásico com uma formulação *one-fluid* é a descrição da interface entre os fluidos.

Essa descrição pode ser feita com base em diferentes métodos, que, de acordo com a classificação utilizada por UNVERDI e TRYGGVASON [8] podem ser divididos em dois grupos majoritários: os métodos de captura da interface (*interface-capturing*), nos quais a interface é definida implicitamente, por meio de uma função que é advectada com o escoamento; e os métodos de acompanhamento da interface (*interface-tracking*), nos quais a interface é definida explicitamente por um conjunto de pontos.

Os principais métodos de captura da interface são o *volume-of-fluid* e o *level-set*. No *volume-of-fluid* (VOF), proposto por HIRT e NICHOLS [9], a interface é definida por uma função marcadora, que assume valores entre 0 e 1 em cada elemento da malha, de acordo com a fração do elemento que está ocupada por um fluido de referência. Portanto, os elementos que apresentam o valor da função igual a 1 se encontram integralmente na região do fluido de referência, os elementos com valor da função igual a 0 se encontram integralmente no outro fluido e, por fim, os elementos com valor da função entre 0 e 1 se encontram na região da interface. Assim, pode-se observar que, nesse método, não há uma definição explícita e precisa da interface, mas apenas uma indicação de sua localização, o que prejudica os cálculos de sua curvatura e da tensão interfacial, limitando a precisão do método para determinados escoamentos. Em compensação, a ausência de definição explícita da interface também pode ser percebida de forma positiva, visto que, para escoamentos com grande quantidade de variações topológicas – como a coalescência e a separação de bolhas e de gotas –, não há a necessidade de lidar diretamente com esses fenômenos ao longo da simulação, mas unicamente de interpretá-los a partir da função marcadora, que se altera automaticamente a cada iteração. Além disso, verifica-se que o VOF proporciona uma adequada conservação da massa de cada fluido.

Para aplicações mais específicas, diversas modificações foram propostas ao VOF

para melhorar seu desempenho. Para escoamentos em microcanais, por exemplo, SOH *et al.* [10] observaram que o método VOF tradicional levava ao surgimento de velocidades espúrias e à formação prematura de gotas, reduzindo a acurácia das simulações. Apresentaram, então, um método VOF modificado, baseado em diversas operações de suavização aplicadas no cálculo da curvatura da interface, com o qual os resultados das simulações se aproximaram das observações experimentais. KIM *et al.* [11], por sua vez, propuseram um método VOF modificado para reduzir sua difusão numérica, sendo capaz de preservar cantos vivos na interface em malhas não estruturadas arbitrárias.

No *level-set* (LS), proposto por SUSSMAN *et al.* [12], a interface também é definida por uma função marcadora. Neste caso, entretanto, utiliza-se uma função distância, que possui valores positivos na região ocupada por um fluido e negativos na região ocupada pelo outro fluido. A interface, portanto, é definida como a região cujo valor da função marcadora é nulo. Assim como no VOF, a interface se move por meio da advectão da função marcadora com o escoamento. O LS, entretanto, é caracterizado por atributos opostos ao VOF: uma acurada computação da curvatura da interface e da tensão interfacial; e problemas na conservação da massa de cada um dos fluidos.

Para garantir uma melhor conservação da massa, também foram propostas modificações ao método LS tradicional. Em vez de utilizar uma função distância que assume valores positivos e negativos, OLSSON e KREISS [13] utilizaram como função marcadora uma Heaviside suavizada, que assume valores entre 0 e 1, com a região da interface sendo definida pelo valor da função de 0,5. A aplicação desse método à simulação de escoamentos monofásicos e bifásicos envolvendo fluidos não-Newtonianos, por AMANI *et al.* [14], levou a resultados compatíveis com os encontrados na literatura.

Os métodos de captura da interface, todavia, não se limitam aos dois supracitados, sendo comuns a implantação de variações em seus algoritmos e, inclusive, a combinação entre eles. NICHITA *et al.* [15] desenvolveram um método híbrido, no qual o LS é utilizado para o cálculo da curvatura da interface e o VOF é utilizado para a captura da interface em si, com o acoplamento entre os métodos sendo garantido pela resolução de uma equação ao final de cada iteração. A performance da simulação do escoamento de bolhas em ascensão com o método híbrido foi superior à dos métodos de forma isolada.

Por sua vez, os métodos de acompanhamento da interface são caracterizados pela definição da interface por um conjunto explícito de pontos, que são advectados sobre a malha que discretiza o domínio, na qual são resolvidas as equações que governam o escoamento. Esse tipo de método foi primeiramente implementado em 1969 por DALY [16] para a simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor e, desde então, é

aplicado para a simulação de uma grande variedade de escoamentos bifásicos. As particularidades de cada simulação levam a métodos bastante distintos entre si. Todavia, para todos os casos, TRYGGVASON *et al.* [4] elencam alguns pontos de atenção a serem considerados, a destacar:

- A estrutura de dados para representar a interface, que inclui não apenas as posições de seus pontos mas também a conectividade entre eles e pode determinar o sucesso ou fracasso da simulação, principalmente em escoamentos tridimensionais;
- A necessidade de atualização da malha da interface, de modo a manter uma boa representação dessa região mesmo com sua deformação ao longo do escoamento;
- A forma de interação entre a interface e a malha na qual as equações governantes do escoamento são resolvidas;
- As mudanças de topologia, como a coalescência e a quebra de bolhas e de gotas, que precisam ser incluídas explicitamente.

Em resumo, os métodos de acompanhamento e de captura da interface são abordagens com características distintas, e a melhor escolha entre eles depende dos objetivos a que uma simulação se propõe. Os métodos de acompanhamento da interface proporcionam uma acurada representação da interface; entretanto, requerem a inclusão artificial de eventuais mudanças topológicas no escoamento. Os métodos de captura da interface, por sua vez, garantem a ocorrência automática das mudanças topológicas; no entanto, ocasionam uma menor acurácia na geometria da interface, além de adicionarem uma equação à formulação do problema. Para os fins deste trabalho, o enfoque em uma acurada representação da interface é prioritário e, portanto, a metodologia proposta envolve um método de acompanhamento da interface.

2.3 Método Semi-Lagrangeano

Classicamente, duas distintas abordagens são utilizadas para descrever um sistema de partículas: a Euleriana e a Lagrangeana.

Considerando $\phi(\mathbf{x}, t)$ como um escalar passivo a ser advectado por um campo de velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, temos que esse fenômeno pode ser descrito de forma Euleriana por (2.1). Nessa interpretação, os pontos espaciais permanecem estáticos, e o valor do campo escalar ϕ , a cada instante de tempo e para cada posição no espaço, é definido pela partícula que lá se encontra.

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (2.1)$$

A interpretação Lagrangeana, por sua vez, considera o movimento dos pontos espaciais em conjunto com as partículas. Seja uma partícula P, localizada na posição \mathbf{x}_p e associada ao campo escalar de valor ϕ_p . Nesse caso puramente advectivo, temos que o valor do campo ϕ_p na própria partícula é invariável, conforme (2.2), com a variação do campo ϕ no espaço ocorrendo apenas devido à movimentação das partículas, conforme (2.3).

$$\frac{\partial\phi_p}{\partial t} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial\mathbf{x}_p}{\partial t} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_p, t) \quad (2.3)$$

Apesar de retratarem um mesmo fato físico, as duas intepretações levam a diferentes implementações numéricas e, consequentemente, a diferentes resultados para uma simulação.

O método semi-Lagrangeano combina as características de uma interpretação Euleriana com as de uma interpretação Lagrangeana. Embora o campo escalar seja definido com relação a pontos espaciais fixos, considera-se um movimento de partícula para definir uma virtual posição desses pontos no instante anterior, a cada instante de tempo, conforme o algoritmo descrito a seguir.

Seja \mathbf{x}_i a posição dos nós de uma malha no instante $t + \Delta t$ e \mathbf{x}_d a posição virtual desses nós no instante imediatamente anterior t . Estima-se \mathbf{x}_d por meio de (2.4).

$$\mathbf{x}_d = \mathbf{x}_i - \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{u}_p(\tau) d\tau \quad (2.4)$$

O campo escalar $\phi(\mathbf{x}_d, t)$, então desconhecido, é definido por meio de uma interpolação no conhecido campo $\phi(\mathbf{x}_i, t)$. Por fim, considera-se o campo escalar $\phi(\mathbf{x}_i, t + \Delta t)$ como igual ao $\phi(\mathbf{x}_d, t)$, permitindo o avanço temporal da simulação.

PAOLI *et al.* [17] observam que as questões em aberto do método semi-Lagrangeano são a integração para obtenção de \mathbf{x}_d e a interpolação para obtenção de $\phi(\mathbf{x}_d, t)$, que, a depender do método numérico escolhido, levam a diferentes resultados para uma simulação.

Embora amplamente utilizado na atualidade, a concepção matemática do método semi-Lagrangeano é datada de meados do século XX. Em 1945, STARR [18] verificou que, para escoamentos atmosféricos e oceânicos, a heterogeneidade do fluido – comumente estratificado horizontalmente – dificulta a utilização de abordagens puramente Eulerianas ou Lagrangeanas. No referido artigo, é proposta a substituição de uma das coordenadas espaciais de um sistema Euleriano por uma variável independente na forma Lagrangeana, nas equações de movimento do fluido. Apesar de distinta da formulação apresentada neste trabalho, o artigo já aponta as limitações das abordagens clássicas, que levaram ao futuro predomínio da formulação semi-Lagrangeana no campo da meteorologia.

Em 1959, o método semi-Lagrangeano foi descrito por WIIN-NIELSEN [19] e, em 1963, SAWYER [20] o sintetizou de forma bastante similar à utilizada neste trabalho, ainda que para uma formulação corrente-vorticidade. Em ambos os casos, a aplicação do método semi-Lagrangeano estava focada no âmbito da meteorologia, para a previsão do tempo por meio da simulação de escoamentos atmosféricos.

A notória relevância do método semi-Lagrangeano no campo da meteorologia se deve a duas de suas principais características: a incondicional estabilidade e a possibilidade de uso de passos temporais elevados. Em 1981, ROBERT [21] verificou que as simulações com um método semi-Lagrangeano, se comparadas com o método Euleriano, admitiam passos temporais de quatro a seis vezes maiores para a obtenção de resultados igualmente acurados. Um ano depois, ROBERT [22] conseguiu incrementar ainda mais o passo temporal utilizado, atingindo um valor 25 vezes superior ao do método Euleriano, por meio da combinação do método semi-Lagrangeano para o tratamento da advecção com um esquema de integração semi-implícito para tratar as oscilações nos resultados causadas pela gravidade. Para esse modelo, sua conclusão foi que, apesar de ser necessária uma maior quantidade de cálculos por iteração, o passo temporal consideravelmente superior era suficiente para tornar seu uso vantajoso.

Uma posterior análise de PUDYKIEWICZ e STANIFORTH [23] ainda provou que o método supracitado era superior a outras formulações semi-Lagrangeanas até então desenvolvidas, caracterizando-o como promissor para aplicação não apenas em problemas de previsão do tempo mas também de poluição atmosférica e em outros problemas meteorológicos. Nessa análise, ao contrário da abordagem original de ROBERT [22] – que havia utilizado o Método das Diferenças Finitas para a solução do sistema linear –, foi utilizado o Método dos Elementos Finitos, aproximando-se ainda mais da metodologia proposta neste trabalho.

Desde então, com o método semi-Lagrangeano já consolidado, principalmente no âmbito da meteorologia, diversas variações foram propostas, a fim de tornar os modelos ainda mais acurados em casos específicos. Por exemplo, RITCHIE [24] propôs

uma formulação semi-Lagrangeana que eliminava a necessidade de interpolação, por meio da decomposição do vetor da virtual trajetória pregressa de um nó da malha em dois vetores: um que atinja o nó da malha mais próximo e um residual. A advecção pelo primeiro vetor é feita por uma abordagem puramente Lagrangeana, sem necessidade de interpolação, visto que se chegou a um nó exato da malha; e a advecção pelo vetor residual é feita por um método Euleriano, modificado para garantir sua estabilidade quando necessário. O modelo proposto foi aplicado às equações de águas rasas e uma comparação com as formulações tradicionais indicou uma redução do tempo de execução da simulação, sem perda de acurácia.

Apesar de consolidado no âmbito da meteorologia, a utilização do método semi-Lagrangeano para a simulação numérica direta das equações de Navier-Stokes não era tão frequente e cresceu gradativamente. Em 1990, MADAY *et al.* [25] aplicaram métodos semi-Lagrangeanos de primeira, segunda e terceira ordem a escoamentos modelados pelas equações de Navier-Stokes incompressíveis. Em 1994, BOUKIR *et al.* [26] compararam um método semi-Lagrangeano de primeira ordem e um de segunda ordem para avaliar um escoamento em regime permanente de um vórtice em uma cavidade e um problema transiente de convecção natural, concluindo que a acurácia dos resultados obtidos pelo método de segunda ordem era superior, sem um acréscimo significativo de custo computacional. Em 2000, PHILLIPS e PHILLIPS [27] validaram a aplicação do método semi-Lagrangeano à simulação de um escoamento ao redor de um cilindro, com número de Reynolds variando entre 1 e 50, comparando os resultados obtidos com uma simulação de referência.

Com o passar dos anos, a complexidade dos escoamentos simulados aumentou. Em 2015, CELLEDONI *et al.* [28] propuseram uma classe de métodos semi-Lagrangeanos baseados em discretizações de ordem mais elevada, com o uso do Método dos Elementos Espectrais para a discretização espacial e de integradores exponenciais para a evolução temporal da simulação. Os métodos propostos foram utilizados para a simulação de escoamentos com elevado número de Reynolds, e a comparação dos resultados obtidos com a abordagem Euleriana tradicional também mostrou um melhor desempenho, permitindo o uso de passos temporais mais elevados.

Em 2021, WILDE *et al.* [29] apresentaram um modelo baseado no método semi-Lagrangeano de alta ordem e na equação de Lattice Boltzmann, aplicado para a análise de turbulência em escoamentos compressíveis tridimensionais. Assim como nos casos supracitados, permitiu-se que as simulações fossem executadas com passos temporais mais elevados do que os dos métodos tradicionais, em até duas ordens de grandeza, de modo que a escolha do passo temporal para a análise da turbulência pudesse ser feita com base no fenômeno físico, e não mais com base nas limitações impostas pela discretização espacial do domínio do problema.

Em 2022, ANJOS *et al.* [30] propuseram uma abordagem baseada no método semi-Lagrangeano de segunda ordem, em conjunto com o Método dos Elementos Finitos e com a formulação Lagrangeana-Euleriana Arbitrária, para a simulação de escoamentos bidimensionais axissimétricos. A abordagem proposta foi comparada com o método semi-Lagrangeano de primeira ordem em diferentes atributos, como a conservação da massa, a trajetória das bolhas e seu formato terminal, por meio da simulação de diversos escoamentos de referência. O desempenho obtido para ambas as metodologias, em alguns aspectos, foi similar. Todavia, constatou-se que o método semi-Lagrangeano de segunda ordem é menos afetado por efeitos negativos de amortecimento do que o método de primeira ordem, sendo capaz, portanto, de representar flutuações nos formatos das bolhas com maior precisão.

Baseado na aplicação do método semi-Lagrangeano para uma grande diversidade de simulações de variados graus de complexidade nos tempos atuais, este trabalho se propõe a apresentar a utilização dessa abordagem em uma metodologia de acompanhamento da interface para a simulação de escoamentos bifásicos.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo, será exposta a metodologia que este trabalho propõe para a simulação de escoamentos bifásicos.

Para fins de organização, este capítulo está subdividido em seis seções, que tratam de cada um dos pontos centrais da metodologia proposta:

- as equações governantes;
- o Método dos Elementos Finitos;
- a representação da interface;
- a formulação e a resolução do problema;
- o pós-processamento da interface;
- e sua implementação computacional.

3.1 Equações Governantes

Nesta seção, serão apresentadas as duas equações governantes dos escoamentos que foram simulados – a equação de conservação da massa e a equação de conservação da quantidade de movimento –, bem como seu processo de adimensionalização e as condições iniciais e de contorno que foram consideradas para sua simulação.

3.1.1 Conservação da Massa

Seja V um volume de controle atravessado pelo escoamento de um fluido de massa específica ρ e velocidade \mathbf{v} . Nesse caso, a equação integral de conservação da massa é dada por (3.1).

$$\int_V \left[\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right] dV = 0 \quad (3.1)$$

Particularmente, (3.1) é válida para um volume de controle diferencial, de tamanho dV . Dessa forma, obtém-se a equação diferencial de conservação da massa, dada por (3.2).

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.2)$$

Dada a hipótese de incompressibilidade do fluido, pode-se afirmar que a densidade é constante em cada uma das fases, tornando nulo o termo $\frac{d\rho}{dt}$. Com essa simplificação, o princípio da conservação da massa atinge a forma de (3.3).

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.3)$$

Como a densidade é não nula em cada uma das fases, a equação de conservação da massa, sob a hipótese de incompressibilidade dos fluidos, se reduz a (3.4).

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.4)$$

3.1.2 Conservação da Quantidade de Movimento

Para o mesmo volume de controle V , o princípio de conservação da quantidade de movimento em sua forma integral é dado por (3.5), onde as três últimas parcelas da equação representam as forças de superfície, as forças gravitacionais e as forças de tensão superficial, respectivamente.

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} dV &= - \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dV + \int_V \nabla \cdot [\sigma_{ij}] dV \\ &\quad + \int_V \rho \mathbf{g} dV + \int_V \mathbf{f} dV \end{aligned} \quad (3.5)$$

Considerando um volume de controle diferencial e as hipóteses de que o fluido

é incompressível e newtoniano – isto é, sua deformação angular é diretamente proporcional a sua tensão de cisalhamento –, obtém-se a forma diferencial da equação de conservação de quantidade de movimento, dada por (3.6).

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f} \quad (3.6)$$

Em escoamentos bifásicos, a força de tensão superficial, \mathbf{f} , é uma força que age sobre a interface entre os fluidos e, portanto, é usualmente denominada tensão interfacial. Conforme o modelo proposto por UNVERDI e TRYGGVASON [8], ela pode ser definida como (3.7), onde σ é o coeficiente de tensão interfacial entre os fluidos, κ é a curvatura local da interface, δ é a função delta de Dirac centrada na interface e \mathbf{n} é o vetor normal à interface. Devido à presença da função delta de Dirac, obtém-se um valor não nulo para \mathbf{f} apenas na região da interface, conforme desejado.

$$\mathbf{f} = \sigma \kappa \delta \mathbf{n} \quad (3.7)$$

De modo similar, a força de tensão interfacial pode ser modelada conforme (3.8). Nesse caso, define-se uma função de Heaviside, cujo valor é unitário na região ocupada por um fluido e nulo na região ocupada pelo outro. Assim, a força de tensão interfacial permanece localizada apenas na interface, sendo esta caracterizada não mais pelo valor não nulo da função delta de Dirac, mas pelo gradiente não nulo da função de Heaviside.

$$\mathbf{f} = -\sigma \kappa \nabla H \quad (3.8)$$

O modelo caracterizado por (3.8) será aplicado no decorrer deste trabalho. Por simplicidade de notação, a equação (3.6), com o termo \mathbf{f} explícito, será utilizada ao longo da exposição da metodologia.

3.1.3 Equações Adimensionais de Navier-Stokes

As equações (3.4) e (3.6) representam, respectivamente, a conservação da massa e a conservação da quantidade de movimento em um escoamento incompressível de um fluido newtoniano, sendo denominadas equações de Navier-Stokes.

Antes de prosseguir para o Método dos Elementos Finitos, entretanto, realizou-se a adimensionalização dessas equações. As equações dimensionais podem ser resolvidas similarmente, também sendo adequadas para a simulação dos escoamentos apresentados no Capítulo 4 deste trabalho. No entanto, a presença dos números adimensionais propicia uma compreensão mais clara a respeito da física do escoamento e da influência dos diversos parâmetros nos resultados obtidos.

Por esse motivo, cada grandeza presente nas equações foi escrita como o produto entre um valor dimensional de referência e uma nova grandeza adimensional, com um asterisco sobreescrito. Para escoamentos com uma velocidade característica conhecida, as grandezas são adimensionalizadas conforme as equações a seguir:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= L \mathbf{x}^* & t &= \frac{L}{U} t^* & p &= \rho_0 U^2 p^* \\ \mathbf{v} &= U \mathbf{v}^* & \rho &= \rho_0 \rho^* & \mu &= \mu_0 \mu^* \\ \mathbf{g} &= g_0 \mathbf{g}^* & \mathbf{f} &= \frac{\sigma_0}{L^2} \mathbf{f}^* \end{aligned}$$

Por consequência, os operadores diferenciais também presentes nas equações foram escritos como:

$$\nabla = \frac{1}{L} \nabla^* \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{U}{L} \frac{\partial}{\partial t^*}$$

Substituindo as grandezas e parâmetros adimensionais em (3.4), obtém-se (3.9).

$$\frac{U}{L} \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0 \tag{3.9}$$

Simplificando (3.9), obtém-se a forma adimensional da equação de conservação da massa, dada por (3.10).

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0 \tag{3.10}$$

Analogamente, substituindo as grandezas e parâmetros adimensionais em (3.6), obtém-se (3.11).

$$\begin{aligned} \rho_0 \rho^* \left[\frac{U^2}{L} \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \frac{U^2}{L} \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* \right] &= -\frac{\rho_0 U^2}{L} \nabla^* p^* \\ &+ \frac{\mu_0 U}{L^2} \nabla^* \cdot [\mu^* (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^* \mathbf{v}^{*T})] + \rho_0 \rho^* g_0 \mathbf{g}^* + \frac{\sigma_0}{L^2} \mathbf{f}^* \end{aligned} \tag{3.11}$$

Multiplicando (3.11) por $\frac{L}{\rho_0 U^2}$, obtém-se (3.12).

$$\begin{aligned} \rho^* \left[\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* \right] &= -\nabla^* p^* + \frac{\mu_0}{\rho_0 L U} \nabla^* \cdot [\mu^* (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^* \mathbf{v}^{*T})] \\ &\quad + \frac{g_0 L}{U^2} \rho^* \mathbf{g}^* + \frac{\sigma_0}{\rho_0 L U^2} \mathbf{f}^* \end{aligned} \quad (3.12)$$

Nessa formulação, estão presentes três parâmetros adimensionais, cujas definições estão expostas a seguir:

Número de Reynolds

O número de Reynolds (Re) representa a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas em um escoamento, sendo definido por (3.13).

$$Re = \frac{\rho_0 L U}{\mu_0} \quad (3.13)$$

Número de Froude

O número de Froude (Fr) representa a razão entre as forças inerciais e a força gravitacional em um escoamento, sendo definido por (3.14).

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{g_0 L}} \quad (3.14)$$

Número de Weber

O número de Weber (We) representa a razão entre as forças inerciais e as forças de tensão interfacial em um escoamento, sendo definido por (3.15).

$$We = \frac{\rho_0 L U^2}{\sigma_0} \quad (3.15)$$

Substituindo os números de Reynolds, Froude e Weber em (3.12) e removendo os asteriscos por simplicidade de notação, obtém-se a formulação final da equação

de conservação da quantidade de movimento para escoamentos com uma velocidade característica conhecida, dada por (3.16).

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \rho \mathbf{g} + \frac{1}{We} \mathbf{f} \quad (3.16)$$

Para alguns escoamentos, entretanto, inexiste uma velocidade de referência, e se utiliza um outro modo de adimensionalização. Para o escoamento de uma bolha em ascensão descrito no Capítulo 4 deste trabalho, por exemplo, não há a imposição de uma velocidade sobre o sistema, sendo esta uma decorrência da ação da gravidade. Portanto, nesse caso, os comprimentos são adimensionalizados pelo fator D e as velocidades pelo fator $\sqrt{g D}$, onde D é o diâmetro de referência da bolha. Assim, a equação adimensional de conservação da quantidade de movimento assume a forma de (3.17).

$$\begin{aligned} \rho^* \left[\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* \right] &= -\nabla^* p^* + \frac{\mu_0}{\rho_0 \sqrt{D^3 g_0}} \nabla^* \cdot [\mu^* (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^* \mathbf{v}^{*T})] \\ &\quad + \rho^* \mathbf{g}^* + \frac{\sigma_0}{\rho_0 D^2 g_0} \mathbf{f}^* \end{aligned} \quad (3.17)$$

Nessa formulação, estão presentes dois novos parâmetros adimensionais, cujas definições estão expostas a seguir.

Número de Galileu

O número de Galileu (Ga) representa a razão entre as forças de empuxo e as forças viscosas em um escoamento, sendo definido por (3.18).

$$Ga = \frac{\rho_0^2 D^3 g_0}{\mu_0^2} \quad (3.18)$$

Número de Eötvös

O número de Eötvös (Eo) representa a razão entre as forças de empuxo e as forças de tensão interfacial em um escoamento, sendo definido por (3.19).

$$Eo = \frac{\rho_0 D^2 g_0}{\sigma_0} \quad (3.19)$$

Substituindo os números de Galileu e Eötvös em (3.17) e removendo os asteriscos por simplicidade de notação, obtém-se a formulação final da equação adimensional de conservação da quantidade de movimento para escoamentos sem uma velocidade de referência, dada por (3.20).

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \frac{1}{Ga^{1/2}} \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \rho \mathbf{g} + \frac{1}{Eo} \mathbf{f} \quad (3.20)$$

3.1.4 Condições Iniciais e de Contorno

Tão importantes quanto as equações diferenciais, que definem de forma genérica um escoamento, são as condições iniciais e de contorno, que o particularizam e permitem a sua simulação.

De forma geral, neste trabalho, foram consideradas como condições iniciais os campos de pressão e de velocidade inicialmente nulos. Por sua vez, diversas condições de contorno foram utilizadas, de modo a representar as particularidades de cada escoamento, a destacar:

- *Condição de não deslizamento:* impõe-se o valor nulo para as componentes horizontal e vertical da velocidade, nos pontos adjacentes a um contorno que represente uma parede estática;
- *Condição de simetria:* impõe-se o valor nulo para a componente normal da velocidade e permite-se que o fluido se move tangencialmente, nos pontos adjacentes a um contorno do domínio cujo caráter simétrico seja previamente conhecido;
- *Condição de velocidade prescrita:* impõem-se valores para as componentes horizontal e vertical da velocidade, nos pontos adjacentes a um contorno do domínio cuja velocidade seja conhecida – em geral, utiliza-se um perfil de velocidade prescrito no contorno de entrada (*inflow*) de um escoamento;
- *Condição de pressão prescrita:* impõe-se um valor para a pressão, nos pontos adjacentes a um contorno do domínio que tenha sua pressão conhecida ou que servirá de referência para o cálculo da pressão nos demais pontos – em geral, utiliza-se $p = 0$ no contorno de saída (*outflow*) de um escoamento;
- *Condição de parede em movimento:* impõe-se o valor nulo para a componente normal da velocidade e um valor não nulo para a componente tangencial da velocidade, nos pontos adjacentes a um contorno que represente uma parede que se move, de modo que não haja movimento relativo entre esta e o fluido.

3.2 Método dos Elementos Finitos

Nesta seção, serão descritos os procedimentos relacionados à utilização do Método dos Elementos Finitos, a destacar: a obtenção da formulação variacional das equações governantes; a discretização espacial do domínio pelo método de Galerkin; e a discretização espaço-temporal das equações com o método semi-Lagrangeano.

3.2.1 Formulação Variacional

Na seção anterior, obteve-se a formulação diferencial das equações de Navier-Stokes. Para a aplicação do Método dos Elementos Finitos, todavia, é necessária a obtenção da formulação variacional dessas equações, tal qual descrito por DONEA e HUERTA [31].

O processo de obtenção da formulação variacional será desenvolvido a partir das equações de Navier-Stokes dadas por (3.21) e (3.22). Entretanto, o procedimento é análogo para a formulação com os números de Galileu e Eötvös exposta anteriormente.

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \rho \mathbf{g} + \frac{1}{We} \mathbf{f} \quad (3.21)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.22)$$

Para essa formulação, serão considerados um domínio de validade dado por $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ e as condições de contorno dadas por (3.23) e (3.24). A primeira caracteriza uma condição de velocidade prescrita na fronteira Γ_1 , enquanto a segunda trata de uma condição de velocidade tangencial e tensão normal nulas na fronteira Γ_2 . Essas duas formulações generalizadas abarcam os tipos de condição de contorno utilizados ao longo deste trabalho, elencados na seção anterior.

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma, \text{ em } \Gamma_1 \quad (3.23)$$

$$\mathbf{v}_t = \mathbf{0} \text{ e } \sigma_{nn} = 0, \text{ em } \Gamma_2 \quad (3.24)$$

Seja $\mathcal{L}_2(\Omega)$ o espaço das funções quadraticamente integráveis sobre o domínio Ω , dado por (3.25).

$$\mathcal{L}_2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty \right\} \quad (3.25)$$

Sejam também o espaço de Sobolev $\mathcal{H}^1(\Omega)$, dado por (3.26), e seu análogo $\mathcal{H}^1(\Omega)^n$ para vetores n-dimensionais, dado pelo produto cartesiano entre n espaços $\mathcal{H}^1(\Omega)$, conforme (3.27).

$$\mathcal{H}^1(\Omega) = \left\{ v \in \mathcal{L}_2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in \mathcal{L}_2(\Omega), i = 1, 2, \dots, n \right\} \quad (3.26)$$

$$\mathcal{H}^1(\Omega)^n = \left\{ \mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_n) : v_i \in \mathcal{H}^1(\Omega), i = 1, 2, \dots, n \right\} \quad (3.27)$$

Sejam, ainda, os subespaços $\mathcal{V}_{\mathbf{v}\Gamma}(\Omega)$ e $\mathcal{P}_{p\Gamma}(\Omega)$ definidos por (3.28) e (3.29), onde Γ_1 e Γ_2 são os contornos de velocidade e pressão, respectivamente.

$$\mathcal{V}_{\mathbf{v}\Gamma}(\Omega) = \left\{ \mathbf{v} \in \mathcal{H}^1(\Omega)^n : \mathbf{v} = \mathbf{v}_{\Gamma} \text{ em } \Gamma_1 \right\} \quad (3.28)$$

$$\mathcal{P}_{p\Gamma}(\Omega) = \left\{ p \in \mathcal{H}^1(\Omega) : p = p_{\Gamma} \text{ em } \Gamma_2 \right\} \quad (3.29)$$

A formulação variacional das equações de Navier-Stokes é obtida por meio da multiplicação de (3.21) e (3.22) pelas funções peso \mathbf{w} e q , como exposto em (3.30) e (3.31).

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left\{ \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \right. \\ \left. - \frac{1}{Fr^2} \rho \mathbf{g} - \frac{1}{We} \mathbf{f} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (3.30) \end{aligned}$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \nabla \cdot \mathbf{v} \right\} q d\Omega = 0 \quad (3.31)$$

Pela distributividade do produto interno, (3.30) torna-se (3.32).

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left\{ \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \left\{ \nabla p \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega \\
& - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Fr^2} \rho \mathbf{g} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega \\
& - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{We} \mathbf{f} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (3.32)
\end{aligned}$$

Utilizando a definição de derivada material, o termo advectivo de (3.32) pode ser reescrito conforme (3.33).

$$\int_{\Omega} \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] \cdot \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Omega} \rho \frac{D \mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (3.33)$$

Aplicando o Teorema de Green, a integral do termo difusivo de (3.32) pode ser reescrita como (3.34).

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \cdot \mathbf{w} d\Omega = \\
& - \int_{\Omega} \mu [(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) : \nabla \mathbf{w}^T] d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \cdot \mathbf{w}] d\Gamma \quad (3.34)
\end{aligned}$$

Ademais, pode-se afirmar que a integral no contorno Γ presente em (3.34) é nula, pois pode ser desmembrada em uma soma de duas integrais nulas: uma na fronteira Γ_1 , na qual $\mathbf{w} = \mathbf{0}$, e outra na fronteira Γ_2 , na qual a nulidade deriva da própria condição de contorno.

De forma similar, aplicando o Teorema de Green, o termo de pressão pode ser reescrito como (3.35).

$$\int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{w} d\Omega = - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Gamma} p \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (3.35)$$

Pode-se afirmar que a integral no contorno Γ presente em (3.35) também é nula, pois igualmente pode ser desmembrada em uma soma de duas integrais nulas: uma na fronteira Γ_1 , na qual $\mathbf{w} = \mathbf{0}$, e outra na fronteira Γ_2 , na qual $p = 0$.

Assim, temos que a formulação variacional das equações de Navier-Stokes é dada por (3.36) e (3.37).

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \mu [(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) : \nabla \mathbf{w}^T] d\Omega - \frac{1}{Fr^2} \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{w} d\Omega \\
& - \frac{1}{We} \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (3.36)
\end{aligned}$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{v}) q d\Omega = 0 \quad (3.37)$$

O problema consiste em encontrar as soluções $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{V}_{\mathbf{v}_\Gamma}(\Omega)$ e $p(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{P}_{p_\Gamma}(\Omega)$ que satisfaçam (3.36) e (3.37) para todo $\mathbf{w} \in \mathcal{V}_0(\Omega)$ e para todo $q \in \mathcal{P}_0(\Omega)$.

3.2.2 Método de Galerkin

Seja uma discretização do domínio Ω em uma malha não estruturada com NE elementos triangulares, NV nós de velocidade e NP nós de pressão, tal qual exposta na Figura 3.1.

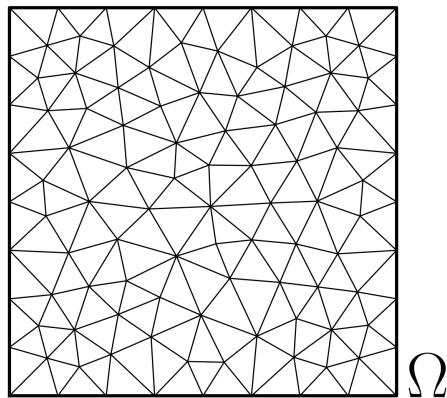


Figura 3.1: Discretização de um domínio em elementos triangulares.

O método de Galerkin consiste em aproximar as variáveis contínuas do problema em variáveis discretas no espaço, por meio das aproximações (3.38), (3.39) e (3.40). Os termos N_i e P_j são denominados funções de interpolação e são utilizados para construir os campos de velocidade e de pressão, respectivamente, a partir dos valores desses campos nos nós da malha. As funções de forma são dependentes do tipo de elemento que compõe a malha, e alguns de seus exemplos estão expostos na próxima subseção.

$$v_x(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) v_{x,n}(t) \quad (3.38)$$

$$v_y(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) v_{y,n}(t) \quad (3.39)$$

$$p(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{r=1}^{NP} P_r(\mathbf{x}) p_r(t) \quad (3.40)$$

As demais variáveis contínuas do problema também são discretizadas espacialmente. Os termos de tensão interfacial e de gravidade são aproximados a partir de seus valores nos nós de velocidade, conforme (3.41), (3.42), (3.43) e (3.44).

$$g_x(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) g_{x,n}(t) \quad (3.41)$$

$$g_y(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) g_{y,n}(t) \quad (3.42)$$

$$f_x(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) f_{x,n}(t) \quad (3.43)$$

$$f_y(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) f_{y,n}(t) \quad (3.44)$$

Por fim, para a discretização da densidade e da viscosidade do fluido, são calculados os valores médios dessas propriedades em cada elemento da malha, ρ^e e μ^e . Para isso, são considerados os valores dessas propriedades nos três vértices do triângulo, como exposto em (3.45) e (3.46).

$$\rho^e = \frac{1}{3} (\rho_1^e + \rho_2^e + \rho_3^e) \quad (3.45)$$

$$\mu^e = \frac{1}{3} (\mu_1^e + \mu_2^e + \mu_3^e) \quad (3.46)$$

Assim, os campos de densidade e viscosidade podem ser discretizados espacialmente, a partir de seus valores médios em cada elemento, conforme (3.47) e (3.48).

$$\rho(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{e=1}^{NE} \rho^e(\mathbf{x}, t) \quad (3.47)$$

$$\mu(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{e=1}^{NE} \mu^e(\mathbf{x}, t) \quad (3.48)$$

Considerando as equações de Navier-Stokes (3.36) e (3.37) em um domínio bidimensional, onde $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$, $\mathbf{g} = (g_x, g_y)$, $\mathbf{f} = (f_x, f_y)$ e $\mathbf{w} = (w_x, w_y)$, e substituindo as variáveis contínuas pelas variáveis discretizadas obtidas acima, obtém-se (3.49), (3.50) e (3.51). As funções peso w_x e w_y foram substituídas pelas funções de interpolação $N_m(\mathbf{x})$, $m = 1, 2, \dots, NV$, visto que as equações de conservação de quantidade de movimento são avaliadas nos nós de velocidade. A função peso q foi substituída pelas funções de interpolação $P_r(\mathbf{x})$, $r = 1, 2, \dots, NP$, visto que a equação de conservação da massa é avaliada nos nós de pressão.

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} \rho^e \frac{Dv_{x,n}}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{r=1}^{NP} \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\ & + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} \mu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_{x,n} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_{x,n} + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_{x,n} \right. \\ & \left. + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_{y,n} \right) d\Omega - \frac{1}{Fr^2} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} \rho^e N_m N_n g_{x,n} d\Omega \\ & - \frac{1}{We} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} N_m N_n f_{x,n} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} \rho^e \frac{Dv_{y,n}}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{r=1}^{NP} \frac{\partial N_m}{\partial y} P_r p_r d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} \mu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_{y,n} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_{y,n} + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_{x,n} \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_{y,n} \right) d\Omega - \frac{1}{Fr^2} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} \rho^e N_m N_n g_{y,n} d\Omega \\
& - \frac{1}{We} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NV} N_m N_n f_{y,n} d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.50}$$

$$\sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{n=1}^{NP} \left(\frac{\partial N_n}{\partial x} v_{x,n} + \frac{\partial N_n}{\partial y} v_{y,n} \right) P_r d\Omega = 0 \tag{3.51}$$

Restringindo as funções de interpolação a cada elemento, as equações (3.49), (3.50) e (3.51) convertem-se em (3.52), (3.53) e (3.54).

$$\begin{aligned}
& \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \rho^e \frac{Dv_{x,j}}{Dt} N_i^e N_j^e d\Omega - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,k \in e} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} P_k p_k d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \mu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} v_{x,j} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_{x,j} + \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} v_{x,j} \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} v_{y,j} \right) d\Omega - \frac{1}{Fr^2} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \rho^e N_i^e N_j^e g_{x,j} d\Omega \\
& - \frac{1}{We} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} N_i^e N_j^e f_{x,j} d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.52}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \rho^e \frac{Dv_{y,j}}{Dt} N_i^e N_j^e d\Omega - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,k \in e} \frac{\partial N_i^e}{\partial y} P_k p_k d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \mu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} v_{y,j} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_{y,j} + \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_{x,j} \right. \\
& \left. + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_{y,j} \right) d\Omega - \frac{1}{Fr^2} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \rho^e N_i^e N_j^e g_{y,j} d\Omega \\
& - \frac{1}{We} \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} N_i^e N_j^e f_{y,j} d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.53}$$

$$\sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega^e} \sum_{j,k \in e} \left(\frac{\partial N_j^e}{\partial x} v_{x,j} + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_{y,j} \right) P_k d\Omega = 0 \tag{3.54}$$

As equações (3.52), (3.53) e (3.54) podem ser escritas na forma do sistema de equações (3.55), onde $\dot{\mathbf{v}}_x = [\frac{\partial v_{x,1}}{\partial t}, \dots, \frac{\partial v_{x,NV}}{\partial t}]^T$, $\dot{\mathbf{v}}_y = [\frac{\partial v_{y,1}}{\partial t}, \dots, \frac{\partial v_{y,NV}}{\partial t}]^T$, $\mathbf{v}_x = [v_{x,1}, \dots, v_{x,NV}]^T$, $\mathbf{v}_y = [v_{y,1}, \dots, v_{y,NV}]^T$, $\mathbf{p} = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, $\mathbf{g}_x = [g_{x,1}, \dots, g_{x,NV}]^T$, $\mathbf{g}_y = [g_{y,1}, \dots, g_{y,NV}]^T$, $\mathbf{f}_x = [f_{x,1}, \dots, f_{x,NV}]^T$ e $\mathbf{f}_y = [f_{y,1}, \dots, f_{y,NV}]^T$.

$$\begin{cases} M_{\rho,x} \dot{\mathbf{v}}_x + \frac{1}{Re} [(2 K_{xx} + K_{yy}) \mathbf{v}_x + K_{xy} \mathbf{v}_y] - G_x \mathbf{p} - \frac{1}{Fr^2} M_{\rho,x} \mathbf{g}_x - \frac{1}{We} M_x \mathbf{f}_x = \mathbf{0} \\ M_{\rho,y} \dot{\mathbf{v}}_y + \frac{1}{Re} [K_{yx} \mathbf{v}_x + (K_{xx} + 2 K_{yy}) \mathbf{v}_y] - G_y \mathbf{p} - \frac{1}{Fr^2} M_{\rho,y} \mathbf{g}_y - \frac{1}{We} M_y \mathbf{f}_y = \mathbf{0} \\ D_x \mathbf{v}_x + D_y \mathbf{v}_y = \mathbf{0} \end{cases} \tag{3.55}$$

As matrizes globais $M_{\rho,x}$, $M_{\rho,y}$, M_x , M_y , K_{xx} , K_{yy} , K_{xy} , K_{yx} , G_x , G_y , D_x e D_y são definidas pelas seguintes equações:

$$\begin{aligned}
M_{\rho,x} &= \mathcal{A}_x(m_\rho^e) & M_{\rho,y} &= \mathcal{A}_y(m_\rho^e) & M_x &= \mathcal{A}_x(m^e) & M_y &= \mathcal{A}_y(m^e) \\
K_{xx} &= \mathcal{A}_x(k_{xx}^e) & K_{yy} &= \mathcal{A}_y(k_{yy}^e) & K_{xy} &= \mathcal{A}_x(k_{xy}^e) & K_{yx} &= \mathcal{A}_y(k_{yx}^e) \\
G_x &= \mathcal{A}_x(g_x^e) & G_y &= \mathcal{A}_y(g_y^e) & D_x &= \mathcal{A}_x(d_x^e) & D_y &= \mathcal{A}_y(d_y^e)
\end{aligned}$$

As matrizes m_ρ^e , m^e , k_{xx}^e , k_{yy}^e , k_{xy}^e , k_{yx}^e , g_x^e , g_y^e , d_x^e e d_y^e são submatrizes dos elementos, dadas pelas equações a seguir, e os operadores \mathcal{A}_x e \mathcal{A}_y são operadores de montagem das matrizes globais a partir dessas submatrizes, com base na relação entre os índices presente em (3.52), (3.53) e (3.54).

$$\begin{aligned}
m_{\rho, ij}^e &= \int_{\Omega^e} \rho^e N_i^e N_j^e d\Omega & m_{ij}^e &= \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \\
k_{xx, ij}^e &= \int_{\Omega^e} \mu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega & k_{yy, ij}^e &= \int_{\Omega^e} \mu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \\
k_{xy, ij}^e &= \int_{\Omega^e} \mu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega & k_{yx}^e &= \int_{\Omega^e} \mu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \\
g_{x, ik}^e &= \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} P_k^e d\Omega & g_{y, ik}^e &= \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial y} P_k^e d\Omega \\
d_{x, kj}^e &= \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} P_k^e d\Omega & d_{y, kj}^e &= \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} P_k^e d\Omega
\end{aligned}$$

Portanto, de forma mais compacta, o sistema de equações (3.55) pode ser escrito como (3.56), onde $\dot{\mathbf{v}} = [\frac{Dv_{x,1}}{Dt}, \dots, \frac{Dv_{x,NV}}{Dt}, \frac{Dv_{y,1}}{Dt}, \dots, \frac{Dv_{y,NV}}{Dt}]^T$, $\mathbf{v} = [v_{x,1}, \dots, v_{x,NV}, v_{y,1}, \dots, v_{y,NV}]^T$, $\mathbf{p} = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, $\mathbf{g} = [g_{x,1}, \dots, g_{x,NV}, g_{y,1}, \dots, g_{y,NV}]^T$ e $\mathbf{f} = [f_{x,1}, \dots, f_{x,NV}, f_{y,1}, \dots, f_{y,NV}]^T$.

$$\begin{cases} M_\rho \dot{\mathbf{v}} + \frac{1}{Re} K \mathbf{v} - G \mathbf{p} - \frac{1}{Fr^2} M_\rho \mathbf{g} - \frac{1}{We} M \mathbf{f} = 0 \\ D \mathbf{v} = 0 \end{cases} \quad (3.56)$$

No sistema, M_ρ , M , K , G e D são dadas pelas matrizes a seguir:

$$M_\rho = \begin{bmatrix} M_{\rho,x} & 0 \\ 0 & M_{\rho,y} \end{bmatrix}_{2NV \times 2NV} \quad (3.57)$$

$$M = \begin{bmatrix} M_x & 0 \\ 0 & M_y \end{bmatrix}_{2NV \times 2NV} \quad (3.58)$$

$$K = \begin{bmatrix} 2K_{xx} + K_{yy} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{xx} + 2K_{yy} \end{bmatrix}_{2NV \times 2NV} \quad (3.59)$$

$$G = \begin{bmatrix} G_x \\ G_y \end{bmatrix}_{2NV \times NP} \quad (3.60)$$

$$D = \begin{bmatrix} D_x & D_y \end{bmatrix}_{NP \times 2NV} \quad (3.61)$$

3.2.3 Elementos de Malha

A discretização do domínio descrita na subseção anterior admite uma grande diversidade de elementos de malha. Esses podem diferir em sua geometria – triangular, retangular etc. – e na ordem de suas funções de forma – linear, quadrática, cúbica, entre outras –, que são utilizadas para a interpolação das variáveis do problema.

Neste trabalho, optou-se pela utilização de elementos triangulares. A escolha dos espaços de aproximação, entretanto, não pode ser totalmente arbitrária. Como a escolha do elemento define simultaneamente as funções de forma para velocidade e pressão, que são variáveis acopladas nas equações de Navier-Stokes, o problema discreto pode se tornar instável a depender do elemento escolhido.

A condição de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi é a condição mais utilizada para garantir a estabilidade das formulações discretizadas de Navier-Stokes. Apesar de não ser uma condição necessária, ela é suficiente para garantir a solução única para o problema de ponto de sela presente na formulação desenvolvida.

Existem métodos que permitem a utilização de elementos que não cumprem a condição de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi e que, ainda assim, levam a formulações estáveis do problema, como o método das penalidades apresentado por HEINRICH e VIONNET [32], que substitui a equação de conservação da massa por $\nabla \cdot \mathbf{v} = -\frac{p}{\lambda}$, e o método de compressibilidade artificial proposto por DECARIA *et al.* [33]. Todavia, neste trabalho, para permitir a utilização da formulação de Galerkin tal qual exposta na subseção anterior, serão utilizados dois tipos de elementos triangulares que seguem a condição de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi: o elemento mini e o elemento quadrático. Esses elementos serão apresentados a seguir; entretanto, anteriormente, é necessária a exposição do sistema de coordenadas baricêntricas, no qual será baseada a definição das funções de forma dos elementos.

Coordenadas Baricêntricas

Seja P um ponto conhecido, localizado no interior de um triângulo cujos vértices são os pontos 1, 2 e 3, também conhecidos, como mostrado na Figura 3.2. Sejam também as áreas A_1 , A_2 e A_3 , definidas conforme a figura.

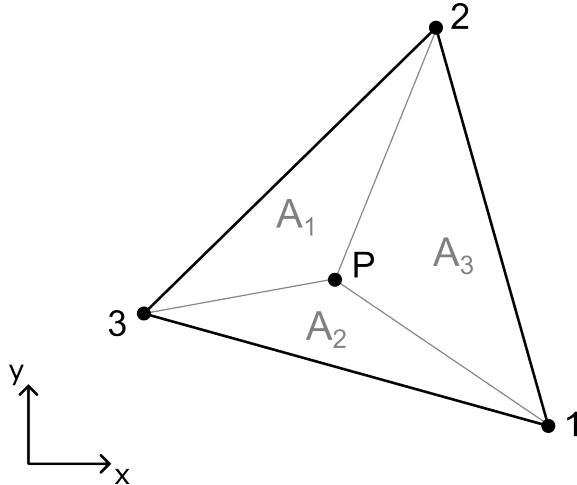


Figura 3.2: Coordenadas baricêntricas de um elemento triangular.

A posição do ponto P pode ser trivialmente expressa a partir das coordenadas globais x e y . Todavia, para a metodologia que será descrita ao longo deste trabalho, faz-se interessante o uso das coordenadas locais L_1 , L_2 e L_3 , denominadas coordenadas baricêntricas e definidas a partir das equações a seguir.

$$L_1 = \frac{A_1}{A} \quad L_2 = \frac{A_2}{A} \quad L_3 = \frac{A_3}{A}$$

A relação entre o sistema de coordenadas baricêntricas (L_1, L_2, L_3) e o sistema de coordenadas global (x, y) é dada por (3.62) e (3.63).

$$x = L_1 x_1 + L_2 x_2 + L_3 x_3 \tag{3.62}$$

$$y = L_1 y_1 + L_2 y_2 + L_3 y_3 \tag{3.63}$$

Além disso, é trivial a obtenção de uma terceira equação, dada por (3.64).

$$A_1 + A_2 + A_3 = A \implies L_1 + L_2 + L_3 = 1 \tag{3.64}$$

Assim, os valores das coordenadas baricêntricas L_1 , L_2 e L_3 em função das coordenadas globais x e y pode ser obtido por meio da solução do sistema linear dado por (3.65).

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ y \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

A área do elemento triangular pode ser obtida a partir do cálculo do determinante da matriz do sistema linear, como exposto em (3.66).

$$A = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{vmatrix} \quad (3.66)$$

A partir da definição do sistema de coordenadas baricêtricas, podem ser definidos os elementos mini e quadrático, que serão utilizados ao longo deste trabalho.

Elemento Mini

O elemento mini, exposto na Figura 3.3, é o elemento triangular mais simples que satisfaz a condição de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi. Ele consiste em um elemento triangular de quatro pontos: os três vértices do triângulo e seu centroide. Nesse elemento, a pressão é linear e calculada sobre os vértices, enquanto a velocidade é uma função cúbica incompleta calculada sobre todos os quatro pontos.

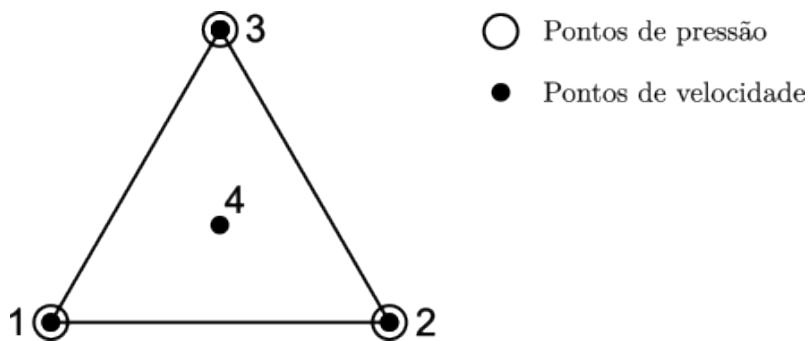


Figura 3.3: Elemento mini.

Suas funções de forma são dadas pelas equações a seguir:

$$N_1 = L_1 - 9 L_1 L_2 L_3$$

$$N_3 = L_3 - 9 L_1 L_2 L_3$$

$$N_2 = L_2 - 9 L_1 L_2 L_3$$

$$N_4 = 27 L_1 L_2 L_3$$

Elemento Quadrático

O elemento quadrático, exposto na Figura 3.4, é outro elemento que satisfaz a condição de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi. Ele consiste em um elemento triangular de seis pontos: os três vértices do triângulo e os três pontos médios de suas arestas. Nesse elemento, a pressão é linear e calculada sobre os vértices, enquanto a velocidade é uma função quadrática calculada sobre todos os seis pontos.

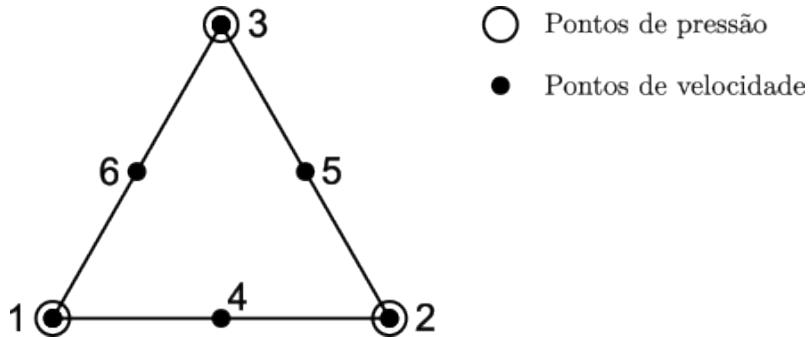


Figura 3.4: Elemento quadrático.

Suas funções de forma são dadas pelas equações a seguir:

$$N_1 = L_1 (2 L_1 - 1)$$

$$N_4 = L_1 L_2$$

$$N_2 = L_2 (2 L_2 - 1)$$

$$N_5 = L_2 L_3$$

$$N_3 = L_3 (2 L_3 - 1)$$

$$N_6 = L_1 L_3$$

Embora a utilização de elementos de mais alta ordem também seja possível de acordo com a condição de Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi, o acréscimo de custo computacional proveniente do maior número de pontos por elemento não costuma compensar o aumento de precisão da simulação. Por isso, este trabalho abordará exclusivamente os elementos triangulares mini e quadrático.

3.2.4 Método Semi-Lagrangeano

Após a aplicação do método de Galerkin, foram obtidas equações discretas espacialmente, porém contínuas no tempo. Para a simulação numérica do problema, portanto, resta discretizar a derivada material presente em sua formulação, de modo a obter equações discretas tanto no espaço como no tempo. Neste trabalho, tal discretização será realizada por meio do método semi-Lagrangeano.

Sejam \mathbf{x}_i a posição de um nó da malha e \mathbf{x}_d a virtual posição de partida no instante n de uma partícula de fluido que atingiu a posição \mathbf{x}_i no instante $n + 1$. Sejam \mathbf{v}_i^{n+1} a velocidade do fluido no ponto \mathbf{x}_i no instante $n + 1$ e \mathbf{v}_d^n a velocidade do fluido no ponto \mathbf{x}_d no instante n . O método semi-Lagrangeano consiste em aproximar a derivada material da velocidade conforme (3.67).

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \approx \frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t} \quad (3.67)$$

Utilizando essa aproximação, temos que a formulação diferencial das equações de Navier-Stokes passa a ser dada por (3.68) e (3.69), onde \mathbf{v}_d^n passa a representar a velocidade na virtual posição de partida no instante anterior de todos os nós da malha.

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t} \right) = & -\nabla p^{n+1} + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \{ \mu [\nabla \mathbf{v}^{n+1} + (\nabla \mathbf{v}^{n+1})^T] \} \\ & + \frac{1}{Fr^2} \rho \mathbf{g}^n + \frac{1}{We} \mathbf{f}^n \end{aligned} \quad (3.68)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (3.69)$$

Consequentemente, a forma matricial da formulação variacional das equações de Navier-Stokes passa a ser dada por (3.70).

$$\begin{cases} M_\rho \left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{Re} K \mathbf{v}^{n+1} - G \mathbf{p}^{n+1} - \frac{1}{Fr^2} M_\rho \mathbf{g}^n - \frac{1}{We} M \mathbf{f}^n = 0 \\ D \mathbf{v}^{n+1} = 0 \end{cases} \quad (3.70)$$

Para o cálculo de \mathbf{v}_d^n , é necessário anteriormente calcular a posição \mathbf{x}_d^n , por meio de uma estimativa da posição pregressa dos nós da malha, dada por (3.71).

$$\mathbf{x}_d^n = \mathbf{x}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^{n+1} \Delta t \quad (3.71)$$

A Figura 3.5 mostra as duas possíveis situações que podem ocorrer ao fim desse

cálculo, para cada um dos nós \mathbf{x}_i da malha: (1) o ponto \mathbf{x}_d permanecer no interior do domínio Ω ; ou (2) o ponto \mathbf{x}_d sair do domínio Ω .

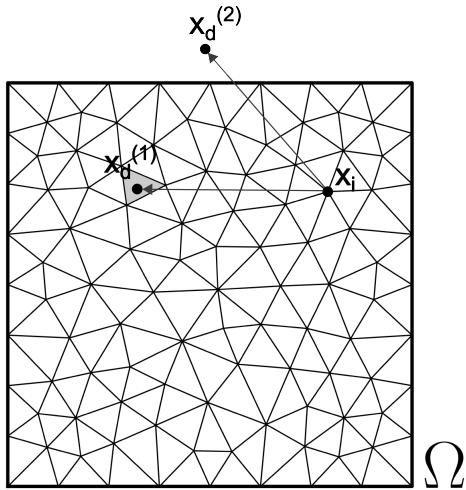


Figura 3.5: Método semi-Lagrangeano.

No segundo caso, que ocorre principalmente nas regiões de *inflow*, a obtenção de \mathbf{v}_d é trivial. Verifica-se em qual contorno do domínio Ω se encontra o ponto \mathbf{x}_d , e define-se \mathbf{v}_d como a velocidade referente a essa condição de contorno.

Para o caso no qual o ponto \mathbf{x}_d permanece no interior do malha, é necessário definir três algoritmos para possibilitar o cálculo de \mathbf{v}_d : o algoritmo para verificar se um ponto se encontra no interior de um elemento; o algoritmo de procura do elemento que contém o ponto \mathbf{x}_d ; e o algoritmo de interpolação de \mathbf{v}_d a partir das velocidades conhecidas nos nós desse elemento. Esses procedimentos estão descritos a seguir.

Algoritmo para verificar se \mathbf{x}_d está no interior de um elemento

Sejam um ponto \mathbf{x}_d e um elemento cujos vértices são os nós \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 e \mathbf{x}_3 . Os ângulos θ_1 , θ_2 e θ_3 são definidos conforme a Figura 3.6, resultando nas equações (3.72), (3.73) e (3.74).

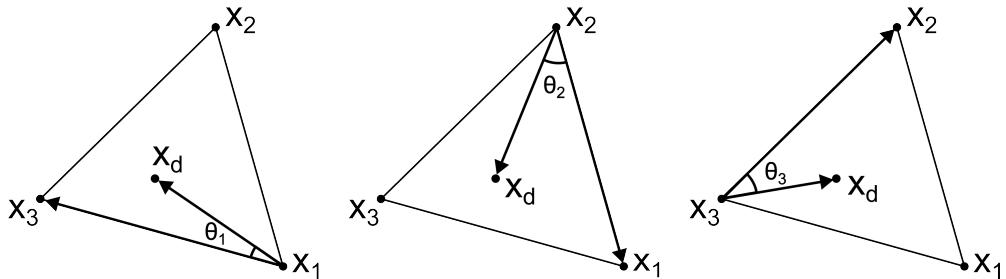


Figura 3.6: Definição dos ângulos θ_1 , θ_2 e θ_3 .

$$\sin(\theta_1) = \frac{|(\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_1) \times (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1)|}{|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_1| |\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1|} \quad (3.72)$$

$$\sin(\theta_2) = \frac{|(\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_2) \times (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)|}{|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_2| |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \quad (3.73)$$

$$\sin(\theta_3) = \frac{|(\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_3) \times (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)|}{|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_3| |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3|} \quad (3.74)$$

Sejam s_1 , s_2 e s_3 respectivamente definidos conforme (3.75), (3.76) e (3.77), de modo que $\text{sgn}(\theta_1) = \text{sgn}(s_1)$, $\text{sgn}(\theta_2) = \text{sgn}(s_2)$ e $\text{sgn}(\theta_3) = \text{sgn}(s_3)$, onde sgn é a função sinal. Assim, para verificar se o ponto \mathbf{x}_d se encontra no interior de um elemento, calculam-se apenas os valores de s_1 , s_2 e s_3 .

$$s_1 = |(\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_1) \times (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1)| \implies \text{sgn}(\theta_1) = \text{sgn}(s_1) \quad (3.75)$$

$$s_2 = |(\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_2) \times (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)| \implies \text{sgn}(\theta_2) = \text{sgn}(s_2) \quad (3.76)$$

$$s_3 = |(\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_3) \times (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)| \implies \text{sgn}(\theta_3) = \text{sgn}(s_3) \quad (3.77)$$

O ponto se encontra no interior do elemento se e somente se s_1 , s_2 e s_3 tiverem o mesmo sinal, isto é, se todos os três valores forem positivos ou se todos os três valores forem negativos. Para evitar erros numéricos, entretanto, o critério de verificação pode ser abrandado, com a decisão sobre se um ponto se encontra no interior do elemento dada pela variável booleana I , exposta em (3.78), para um valor de δ ordens de grandeza inferior ao comprimento característico do problema. Para as simulações contidas neste trabalho, entretanto, não houve a necessidade de abrandamento do critério, sendo considerado um valor nulo para o parâmetro δ .

$$I = \left((s_1 > -\delta) \wedge (s_2 > -\delta) \wedge (s_3 > -\delta) \right) \vee \left((s_1 < \delta) \wedge (s_2 < \delta) \wedge (s_3 < \delta) \right) \quad (3.78)$$

Algoritmo de procura do elemento que contém x_d

Ao início de uma simulação, realiza-se o mapeamento da malha, que consiste em registrar, para cada elemento, o elemento que se encontra no lado oposto de cada um de seus vértices. Essa informação será relevante para o desenvolvimento do algoritmo de procura dos elementos onde se encontram os pontos x_d do método semi-Lagrangeano.

Para uma dada iteração, considera-se como elemento de partida, para cada um dos pontos x_d , o elemento onde este foi encontrado na iteração anterior, com exceção da primeira iteração, na qual a lista de elementos de partida é um dado de entrada da simulação.

Primeiramente, com o algoritmo descrito no item anterior, verifica-se se o ponto está dentro desse elemento. Em caso positivo, encerra-se a busca. Em caso negativo, calcula-se o vértice desse elemento mais distante de x_d e move-se para o elemento oposto a esse vértice – informação que foi obtida no mapeamento da malha –, que estará mais próximo de x_d . Esse procedimento é repetido até que o elemento que contém x_d seja encontrado.

A Figura 3.7 mostra o caminho percorrido (do elemento cinza mais claro para o mais escuro) para encontrar o elemento que contém um ponto x_d arbitrário a partir de um elemento também arbitrário, com o uso do algoritmo descrito.

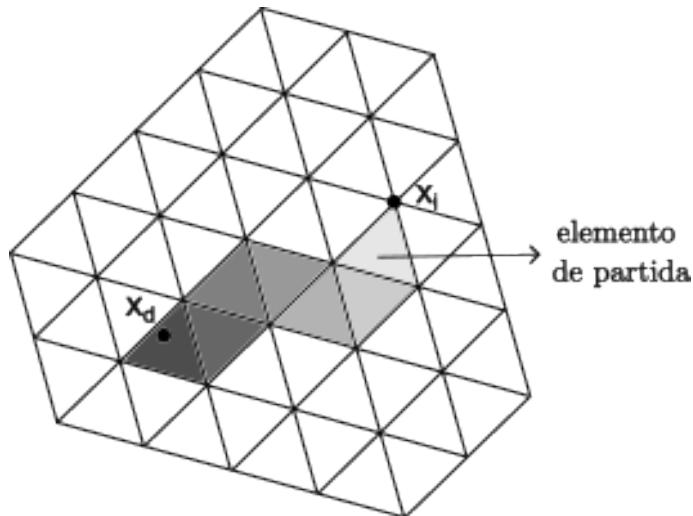


Figura 3.7: Ilustração do algoritmo de procura do elemento que contém x_d .

Algoritmo de cálculo da velocidade v_d

Seja x_d um ponto interno a um elemento, descoberto a partir do algoritmo descrito acima. Sejam N_i as funções de forma do elemento, definidas anteriormente neste capítulo em função de suas coordenadas baricêtricas.

A velocidade \mathbf{v}_d é dada pela combinação linear das velocidades nos nós do elemento, como exposto em (3.79), onde n é o número de nós no elemento – $n = 4$ para o elemento mini e $n = 6$ para o elemento quadrático.

$$\mathbf{v}_d = \sum_{i=1}^n N_i \mathbf{v}_i \quad (3.79)$$

A fim de reduzir o custo computacional das simulações, o cálculo de \mathbf{v}_d conforme o algoritmo descrito não precisa ser efetuado em todos os nós da malha. Neste trabalho, calculou-se \mathbf{v}_d a partir do algoritmo apenas nos nós de pressão da malha, com os valores de \mathbf{v}_d nos demais pontos sendo calculados a partir desse resultado.

No elemento mini, o único ponto que fica pendente é o centroide, cuja velocidade \mathbf{v}_d é definida como a média aritmética das velocidades dos três vértices do elemento, que foram calculadas segundo o algoritmo descrito. No elemento quadrático, os três pontos pendentes são os centros das arestas e, para cada uma delas, a velocidade \mathbf{v}_d é definida como a média aritmética das velocidades dos vértices que a compõem.

3.2.5 Passo Temporal

Apesar de o método semi-Lagrangeano ser incondicionalmente estável, ainda devem ser consideradas restrições para o passo temporal, Δt , a ser utilizado nas simulações. Isso porque o método semi-Lagrangeano foi utilizado unicamente para a modelagem do termo advectivo, permanecendo válidas as demais restrições referentes ao tratamento dos demais termos da equação.

BRACKBILL *et al.* [34] calcularam que, para uma malha estruturada, o passo temporal deve seguir a restrição dada por (3.80), onde Δx é a distância entre dois nós de pressão da malha, ρ é a média aritmética entre as densidades dos dois fluidos presentes no escoamento e σ é o coeficiente de tensão interfacial entre os fluidos. Caso essa restrição não seja seguida, a propagação de ondas capilares na região da interface entre os fluidos torna a simulação instável.

$$\Delta t < \sqrt{\frac{\rho \Delta x^3}{2\pi\sigma}} \quad (3.80)$$

No presente trabalho, as malhas utilizadas são não estruturadas, o que impede o cálculo teórico de um passo temporal máximo para a simulação. Portanto, a equação (3.80) foi adaptada para (3.81), onde d_{ref} é o comprimento médio de aresta

dos elementos da malha, de modo a permitir o cálculo de um passo temporal máximo de referência, ainda que inexato.

$$\Delta t < \sqrt{\frac{\rho d_{ref}^3}{2\pi\sigma}} \quad (3.81)$$

As simulações expostas no capítulo a seguir foram executadas com um passo temporal inferior ao máximo calculado por meio de (3.81).

3.3 Representação da Interface

Neste trabalho, o modelo utilizado para a representação da interface é denominado acompanhamento da interface ou, em sua nomenclatura mais usual, *interface-tracking*. Nessa abordagem, a interface é definida explicitamente, por meio de um conjunto sequencial de pontos. Esses pontos são independentes da malha fixa que discretiza o domínio e são movimentados sobre ela com o passar das iterações.

O posicionamento da interface é de extrema relevância para o equacionamento do problema bifásico, por interferir diretamente em dois de seus elementos: as propriedades de densidade e viscosidade de cada um dos nós da malha fixa, que são atribuídas de acordo com sua posição com relação à interface; e o termo \mathbf{f} de tensão interfacial, que é calculado com base na curvatura da interface e também distribuído para a malha fixa. Esses dois procedimentos serão descritos nas subseções a seguir, na qual também se discutirá o refinamento da interface a ser utilizado.

3.3.1 Atribuição das Propriedades

Para a atribuição das propriedades de densidade e viscosidade aos nós da malha fixa, define-se uma região do domínio Ω_{in} , interior ao polígono definido pelos pontos da interface, e uma região Ω_{out} , exterior a esse polígono, como exposto na Figura 3.8.

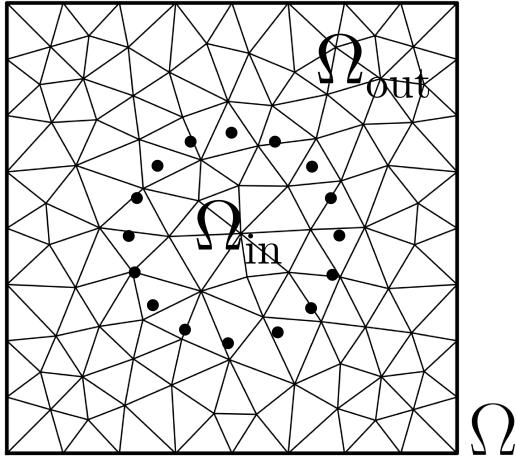


Figura 3.8: Subdivisão do domínio em duas fases.

Para escoamentos com maiores quantidades de bolhas ou gotas, o procedimento é análogo, sendo definida uma interface – e, consequentemente, um polígono – para representar cada uma dessas estruturas. Nesse caso, as regiões interiores a esses polígonos serão denominadas Ω_{in} , enquanto a região exterior a todos os polígonos será denominada Ω_{out} .

Aos nós pertencentes a cada uma das regiões serão associadas as propriedades de um fluido. Para isso, inicialmente, costumava-se definir uma função de Heaviside H , que possui valor unitário na região Ω_{in} e valor nulo na região Ω_{out} , de modo que as propriedades de densidade e viscosidade fossem definidas conforme (3.82) e (3.83).

$$\rho = \rho_{in} H + \rho_{out} (1 - H) \quad (3.82)$$

$$\mu = \mu_{in} H + \mu_{out} (1 - H) \quad (3.83)$$

Todavia, com esse modelo de representação, a variação brusca de propriedades na região da interface ocasionava dificuldades e erros numéricos nas simulações. Para contornar esse problema, SUSSMAN e SMEREKA [35] propuseram um modelo suavizado, dado pela função $H_\epsilon(\phi)$, onde ϵ é metade da espessura da região da interface e ϕ é a distância de um ponto à interface. A função $H_\epsilon(\phi)$ está exposta em (3.84).

$$H_\epsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi \phi}{\epsilon}\right) \right] & \text{se } -\epsilon \leq \phi \leq \epsilon \\ 1 & \text{se } \phi > \epsilon \end{cases} \quad (3.84)$$

Assim, a densidade e a viscosidade de cada nó da malha fixa foram calculadas a partir de (3.85) e (3.86), respectivamente.

$$\rho(\phi) = \rho_{in} H_\epsilon(\phi) + \rho_{out} (1 - H_\epsilon(\phi)) \quad (3.85)$$

$$\mu(\phi) = \mu_{in} H_\epsilon(\phi) + \mu_{out} (1 - H_\epsilon(\phi)) \quad (3.86)$$

Com essa formulação, a suavização da variação das propriedades na região da interface pode ser tão grande quanto se queira, a depender da escolha do parâmetro ϵ . Para as simulações contidas neste trabalho, buscou-se relacionar o parâmetro ϵ com a malha fixa que discretiza o domínio, por meio da definição do parâmetro h , denominado razão de espessura da região da interface. Este é definido como a razão entre o parâmetro ϵ e o comprimento médio de aresta dos elementos da malha fixa, d_{ref} , como exposto em (3.87). Uma análise paramétrica a respeito dessa variável é apresentada no próximo capítulo, onde se verifica que a escolha de h está associada a um *trade-off* entre acurácia (para baixos valores de h) e estabilidade (para altos valores de h) das simulações.

$$h = \frac{\epsilon}{d_{ref}} \quad (3.87)$$

3.3.2 Cálculo de Curvatura

O cálculo de curvatura da interface é outro procedimento de grande importância para o resultado da simulação, visto que é base para o cálculo da tensão interfacial, que será exposto na subseção a seguir.

Sejam os pontos 1, 2 e 3 presentes na interface de forma sequencial, conforme a Figura 3.9. O cálculo da curvatura no ponto 2 é feito a partir dos vetores tangentes $-\mathbf{t}_1$ e \mathbf{t}_2 , que o ligam, respectivamente, aos pontos 1 e 3.

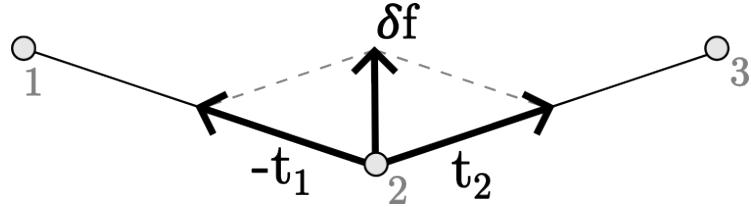


Figura 3.9: Ilustração do cálculo de curvatura da interface.

A curvatura é calculada por meio de (3.88), onde Δs é a distância euclidiana entre os pontos 1 e 3.

$$\kappa \mathbf{n} = \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \approx \frac{\mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_1}{\Delta s} \quad (3.88)$$

3.3.3 Modelagem da Tensão Interfacial

Para a modelagem da tensão interfacial, distribui-se a curvatura calculada em cada ponto da interface para a malha fixa, de modo que ela possa interferir nas equações governantes do escoamento. Essa distribuição é feita por meio da associação de um valor de curvatura a cada um dos nós da malha fixa, sendo esse valor o do ponto da interface mais próximo daquele nó.

Em seguida, na posse da curvatura κ e da função de Heaviside suavizada H_ϵ para cada um dos nós da malha fixa, pode-se estender a formulação da tensão interfacial de UNVERDI e TRYGGVASON [8] conforme (3.89).

$$\mathbf{f} = \sigma \kappa \delta \mathbf{n} = -\sigma \kappa \nabla H_\epsilon \quad (3.89)$$

Por meio do mesmo procedimento utilizado para encontrar a formulação variacional das equações de Navier-Stokes na forma adimensional, encontram-se (3.90) e (3.91), onde G_x e G_y são as matrizes do operador gradiente definidas na Seção 3.2.

$$f_x = \kappa G_x H_\epsilon \quad (3.90)$$

$$f_y = \kappa G_y H_\epsilon \quad (3.91)$$

3.3.4 Refinamento da Interface

Apesar de a interface e a malha fixa estarem desacopladas na metodologia proposta, a compatibilidade entre elas é de extrema relevância para o sucesso da simulação. Isso porque, a cada iteração, verifica-se uma influência da interface sobre a malha fixa – nas etapas de distribuição das propriedades dos fluidos e de modelagem da tensão interfacial – e, posteriormente, uma influência da malha fixa sobre a interface, durante sua movimentação.

Nota-se que uma interface com um número excessivamente baixo de pontos leva a problemas na definição de sua geometria, que culmina em falhas na distribuição das propriedades nas regiões de fronteira entre os fluidos, bem como em erros no cálculo da tensão interfacial, que, na metodologia proposta, é modelada de forma puramente geométrica.

Por sua vez, uma interface com uma quantidade excessiva de pontos também pode ser problemática. Neste caso, durante a etapa de distribuição da curvatura da interface para a malha fixa, alguns de seus pontos podem não ser associados a nenhum nó e, portanto, não exercer influência sobre o escoamento. Esse fenômeno, quando repetido por diversas iterações, pode levar a um acúmulo de erro na posição do ponto da interface. Quando, em uma futura iteração, esse ponto for novamente associado a algum elemento da malha fixa, o erro acumulado de sua curvatura pode ser tamanho que a simulação se torne instável, comprometendo o seu resultado.

Por isso, nesta metodologia, considera-se o comprimento médio de aresta dos elementos da malha fixa como a distância ideal entre pontos da interface. Essa informação foi utilizada tanto para a definição da geometria inicial da interface em cada escoamento simulado, bem como para o desenvolvimento do algoritmo de remalhamento da interface, descrito na Seção 3.5.

3.4 Formulação e Resolução do Problema

A formulação matemática do problema consiste em um sistema linear, desenvolvido com base em todas as considerações anteriormente apresentadas neste capítulo. A solução do sistema linear fornecerá os campos de velocidade e pressão em todo o domínio do problema. Na abordagem de acompanhamento da interface (*interface-tracking*) utilizada, a resolução do problema inclui também a movimentação da interface, que é desacoplada da malha que discretiza o domínio.

Nesta seção, serão descritos os procedimentos para a definição do sistema linear e sua resolução, bem como para a movimentação da interface.

3.4.1 Definição do Sistema Linear

Na posse de todas as variáveis presentes no equacionamento do problema, define-se o sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, no qual o vetor \mathbf{b} se baseia nas variáveis do escoamento no instante n e o vetor \mathbf{x} é composto pelos campos de velocidade e pressão no instante $n + 1$, como mostra (3.92).

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} M_\rho + \frac{1}{Re} K_{11} & \frac{1}{Re} K_{12} & -G_x \\ \frac{1}{Re} K_{21} & \frac{1}{\Delta t} M_\rho + \frac{1}{Re} K_{22} & -G_y \\ D_x & D_y & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_x^{n+1} \\ \mathbf{v}_y^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} M_\rho \mathbf{v}_{d,x} + \frac{1}{Eo} \mathbf{f}_x + \frac{1}{Fr^2} M_\rho \mathbf{g}_x \\ \frac{1}{\Delta t} M_\rho \mathbf{v}_{d,y} + \frac{1}{Eo} \mathbf{f}_y + \frac{1}{Fr^2} M_\rho \mathbf{g}_y \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (3.92)$$

Assim, a evolução temporal do escoamento é obtida mediante a resolução do sistema linear por consecutivas vezes.

3.4.2 Imposição das Condições de Contorno

Antes de resolver o sistema linear definido em (3.92), entretanto, devem ser impostas as condições de contorno de velocidade e de pressão. Para um escoamento modelado pelo sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ discretizado por uma malha com NN nós de velocidade, a imposição da condição de contorno da componente horizontal da velocidade no i -ésimo nó da malha é feita por meio da transformação da linha i da matriz A no vetor unitário $\hat{\mathbf{e}}_i$ e da linha i do vetor \mathbf{b} no valor da condição de contorno da velocidade horizontal nesse nó, v_{x,Γ_i} . Dessa forma, conforme (3.93), obtém-se trivialmente a componente horizontal da velocidade no i -ésimo nó da malha no instante $n + 1$, $v_{x,i}^{n+1}$, com valor igual à condição de contorno nesse nó.

Analogamente, para a imposição da condição de contorno da componente vertical da velocidade no i -ésimo nó da malha, efetua-se a mesma operação na linha $i + NN$ da matriz A , conforme (3.94). Por sua vez, para a imposição da condição de contorno de pressão no i -ésimo nó da malha, realiza-se essa operação na linha $i + 2NN$ da matriz A , conforme (3.95).

$$\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{x} = v_{x\Gamma i} \implies v_{x\Gamma i}^{n+1} = v_{x\Gamma i} \quad (3.93)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{i+NN} \cdot \mathbf{x} = v_{y\Gamma i} \implies v_{y\Gamma i}^{n+1} = v_{y\Gamma i} \quad (3.94)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{i+2NN} \cdot \mathbf{x} = p_{\Gamma i} \implies p_i^{n+1} = p_{\Gamma i} \quad (3.95)$$

Por fim, para a imposição de uma condição de simetria para determinada variável no i -ésimo nó da malha, basta manter inalterada a linha do sistema linear que a representa – isto é, a linha i para a velocidade horizontal, a linha $i + NN$ para a velocidade vertical e a linha $i + 2NN$ para a pressão.

3.4.3 Resolução do Sistema Linear

Na posse do sistema linear com as condições de contorno impostas, esse é resolvido por meio do *solver* *spsolve*, que está contido na biblioteca de computação científica *Scipy*. Seu algoritmo consiste em um método direto para a resolução de sistemas lineares, baseado em decomposição LU, e é especialmente eficiente para sistemas com matrizes esparsas, como o do problema em questão.

Aplicado o *solver*, são obtidos os campos de velocidade e pressão no instante $n+1$ como solução do sistema linear.

3.4.4 Movimentação da Interface

A movimentação da interface é feita por meio da associação dos campos de velocidade \mathbf{v}_x^{n+1} e \mathbf{v}_y^{n+1} obtidos com a resolução do sistema linear aos seus pontos, com o uso de algoritmos previamente descritos nesta metodologia. Primeiramente, para cada um dos pontos da interface, verifica-se em qual elemento da malha fixa ele está contido, por meio do algoritmo ilustrado na Figura 3.7. Em seguida, define-se a velocidade \mathbf{v}_i de um ponto da interface como uma combinação linear das velocidades dos nós do elemento da malha fixa no qual ele está contido, tal qual exposto em (3.79).

A velocidade \mathbf{v}_i poderia ser diretamente utilizada para movimentar a interface. Entretanto, efetuando esse procedimento, verifica-se que os pontos da interface tendem a se aglomerar em determinadas regiões. Isso pode ser problemático não apenas quando o espaçamento entre dois pontos adjacentes fica elevado – o que piora a resolução da representação nessa região da interface – mas também quando essa

distância se torna muito reduzida – o que pode levar a erros numéricos no cálculo de curvatura e a problemas em sua distribuição para a malha fixa.

A Figura 3.10 ilustra essa tendência de perda de qualidade na representação da interface com o passar de um escoamento, por meio das configurações inicial e final da interface em uma simulação de uma bolha em ascensão sob ação da gravidade, na qual não se efetuou nenhuma medida de mitigação desse fenômeno. Verifica-se que os pontos se comportam como se apresentassem uma espécie de inércia, tendendo a se aglomerar na região da interface oposta à direção de seu movimento.

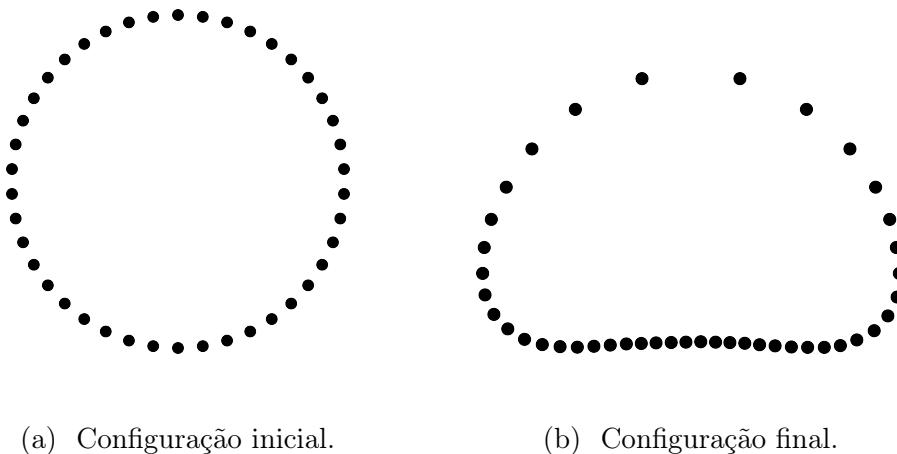


Figura 3.10: Exemplo de configurações inicial e final da interface na simulação de uma bolha em ascensão.

Para evitar esse fenômeno, a velocidade \mathbf{v}_i é decomposta em duas componentes: $\mathbf{v}_{i,n}$, normal à interface, e $\mathbf{v}_{i,t}$, tangente à interface. Essa decomposição é feita por meio da projeção de \mathbf{v}_i no vetor $\delta\mathbf{f}$, presente na Figura 3.9, para cada um dos pontos da interface.

Então, considera-se apenas a componente normal $\mathbf{v}_{i,n}$ da velocidade de cada ponto da interface para a sua movimentação, conforme (3.96).

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \mathbf{v}_{i,n}^{n+1} \Delta t \quad (3.96)$$

3.5 Pós-Processamento da Interface

Após a movimentação da interface, sua nova configuração é submetida ao procedimento de remalhamento e, eventualmente, a mudanças topológicas. Dessa forma,

define-se completamente o sistema bifásico, isto é, os campos de velocidade e pressão em toda a extensão do domínio e a posição dos pontos da interface, no instante $n + 1$. Possibilita-se, assim, o reinício da execução de toda a metodologia descrita, caso haja interesse de simular o escoamento em instantes posteriores.

Os algoritmos de remalhamento e de mudanças topológicas da interface serão descritos nesta seção.

3.5.1 Remalhamento da Interface

Ainda que se tenha desconsiderado a componente tangencial da velocidade para a movimentação da interface, a tendência de aglomeração de seus pontos permanece, ainda que com uma velocidade reduzida. Por isso, mecanismos de remalhamento da interface com o passar das iterações foram avaliados, com o intuito de contornar esse fenômeno.

O algoritmo implementado nesta metodologia consiste em definir uma distância mínima aceitável d_{min} e uma distância máxima aceitável d_{max} entre cada par de pontos adjacentes da interface. Neste trabalho, essas distâncias foram definidas em função do comprimento médio de aresta dos elementos da malha fixa, d_{ref} , conforme (3.97) e (3.98).

$$d_{min} = \frac{d_{ref}}{2} \quad (3.97)$$

$$d_{max} = 2 d_{ref} \quad (3.98)$$

Após a movimentação da interface em cada iteração da simulação, calcula-se a distância entre cada par de pontos adjacentes. Sejam $A(x_A, y_A)$ e $B(x_B, y_B)$ dois pontos consecutivos da interface, separados por uma distância d . Executa-se o seguinte procedimento:

- Se $d < d_{min}$, remove-se o ponto B da interface;
- Se $d > d_{max}$, adiciona-se o ponto $(\frac{x_A+x_B}{2}, \frac{y_A+y_B}{2})$, no centro geométrico entre os pontos A e B.

A Figura 3.11 ilustra a configuração da problemática interface da Figura 3.10 após a execução do algoritmo de remalhamento descrito acima. Os pontos de coloração vermelha representam os pontos que foram adicionados, enquanto os de coloração cinza representam aqueles que foram removidos.

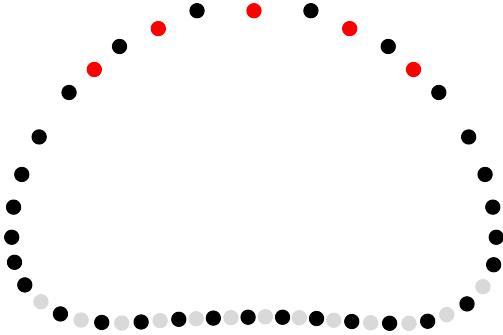


Figura 3.11: Configuração da interface após o remalhamento.

Tem-se como resultado do remalhamento uma interface na qual todo par de pontos adjacentes está separado por uma distância d tal que $d_{min} \leq d \leq d_{max}$. Com isso, garante-se um espaçamento entre pontos da interface suficientemente homogêneo e compatível com a malha fixa que discretiza o domínio, evitando os problemas descritos na seção anterior.

3.5.2 Mudanças Topológicas

No contexto dos escoamentos bifásicos, dois principais tipos de mudanças topológicas são observados: a separação de uma bolha, resultando em duas ou mais bolhas menores; e a coalescência de duas ou mais bolhas, resultando em uma bolha maior. Analogamente, esses mesmos fenômenos também ocorrem para gotas, e a modelagem proposta também é aplicável para esse caso.

Escoamentos que envolvem coalescência e separação de bolhas ou gotas, usualmente, são modelados por métodos de captura da interface, nos quais não há a necessidade de lidar diretamente com esses fenômenos ao longo da simulação. Por isso, a literatura relacionada a mudanças topológicas em simulações de escoamentos bifásicos é consideravelmente mais numerosa para esses métodos do que para métodos de acompanhamento da interface, que compõem esta metodologia. Neste trabalho, portanto, propõe-se um modelo puramente geométrico para descrever o fenômeno da coalescência.

Quando duas bolhas se aproximam, forma-se uma camada limite entre suas interfaces, que, para ser descrita adequadamente na atual metodologia, requereria a presença de alguns elementos da malha fixa nessa região. No caso de a distância entre as bolhas ser inferior a um elemento, por exemplo, pode-se dizer que as bolhas estariam tão próximas que a metodologia descrita até o momento não seria mais suficiente para descrever os fenômenos que ocorrem nessa região do escoamento.

Por isso, esta metodologia propõe que, quando a distância mínima entre as interfaces de duas bolhas torna-se inferior à distância d_{min} – isto é, metade do com-

primento médio de aresta dos elementos da malha fixa –, essas interfaces se fundem, resultando em uma bolha maior. Os pontos de uma bolha que estejam a uma distância inferior a $2 d_{min}$ da outra bolha são excluídos, e os demais passam a integrar uma única interface. A Figura 3.12 ilustra o algoritmo de coalescência descrito, com os pontos de coloração cinza representando os pontos da interface que foram removidos.

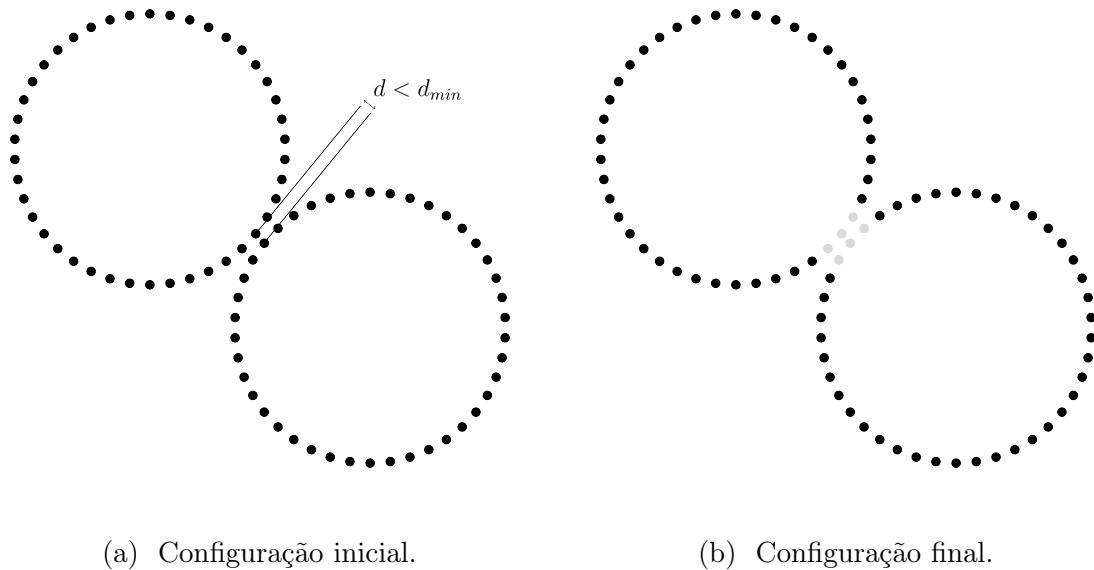


Figura 3.12: Exemplo de configurações inicial e final da interface no processo de coalescência de duas bolhas.

Vale ressaltar que a metodologia puramente geométrica proposta para a descrição do fenômeno da coalescência é uma simplificação da realidade. A coalescência é um problema em aberto e os mecanismos relacionados a esse fenômeno são extremamente mais complexos, podendo envolver efeitos a nível molecular que até a atualidade não são completamente conhecidos. O objetivo deste trabalho é propor uma descrição simplificada desse fenômeno, que não necessariamente esteja correta na totalidade de seus aspectos físicos, mas que seja suficientemente acurada para a descrição de escoamentos a nível de engenharia, como será demonstrado no próximo capítulo.

Vale destacar ainda que, por mais que a ocorrência da coalescência seja uma escolha arbitrária na metodologia proposta, tudo que ocorre anteriormente à coalescência e tudo que ocorre posteriormente à coalescência em um escoamento está fundamentado fisicamente nesta metodologia, que será amplamente validada no seguinte capítulo. Portanto, ainda que o modelo proposto para a coalescência não seja robusto em seus fundamentos físicos, a metodologia em questão ainda pode ser considerada válida para descrever os escoamentos que a envolvem, ressalvando-se o instante exato da ocorrência do fenômeno.

3.6 Implementação Computacional

Por fim, a metodologia definida nas seções anteriores foi implementada em um código na linguagem *Python*, com o auxílio das seguintes bibliotecas de código aberto, dentre outras:

- *Meshio*, para a leitura da malha;
- *Numpy*, para a manipulação das matrizes e vetores;
- *Scipy*, para a resolução do sistema linear;
- *Matplotlib*, para a visualização dos resultados.

As malhas utilizadas para a discretização espacial dos domínios de cada escoamento foram geradas a partir do *software Gmsh* [36].

O algoritmo executado para as simulações pode ser visualizado no pseudocódigo a seguir, que referencia os procedimentos descritos ao longo da exposição da metodologia neste capítulo. Nesse pseudocódigo, t é uma variável que marca o instante de cada iteração, t_0 e t_{end} representam respectivamente os instantes inicial e final da simulação, e as demais variáveis foram nomeadas conforme anteriormente neste capítulo.

begin

definição das propriedades dos fluidos ($\rho_{in}, \rho_{out}, \mu_{in}, \mu_{out}$)

definição dos números adimensionais (Re, We, Fr)

definição do passo temporal

definição da razão de espessura da região da interface

importação da malha fixa

mapeamento da malha fixa

subseção 3.2.4

criação dos vetores v_x, v_y e p

identificação dos nós de contorno

definição das condições de contorno

imposição das condições de contorno

criação da malha da interface entre os fluidos

cálculo das matrizes $g_x^e, g_y^e, d_x^e, d_y^e$

subseção 3.2.2

montagem das matrizes globais permanentes (G, D)

subseção 3.2.2

adimensionalização das variáveis

subseção 3.1.3

$t \leftarrow t_0$

salvamento dos resultados

while $t < t_{end}$ **do**

 cálculo da curvatura da interface # subseção 3.3.2

 atribuição das propriedades aos nós das malha fixa # subseção 3.3.1

 cálculo das matrizes $m^e, m_\rho^e, k_{xx}^e, k_{yy}^e, k_{xy}^e, k_{yx}^e$ # subseção 3.2.2

 montagem das matrizes globais mutáveis (M_ρ, K) # subseção 3.2.2

 cálculo da tensão interfacial # subseção 3.3.3

 método semi-Lagrangeano (cálculo de x_d e v_d) # subseção 3.2.4

 definição do sistema linear # subseção 3.4.1

 imposição das condições de contorno # subseção 3.4.2

 resolução do sistema linear # subseção 3.4.3

 movimentação da interface # subseção 3.4.4

 remalhamento da interface # subseção 3.5.1

 mudanças topológicas # subseção 3.5.2

$t \leftarrow t + \Delta t$

 salvamento dos resultados

end

Capítulo 4

Validação e Resultados

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos com a aplicação da metodologia proposta em um conjunto de simulações de interesse.

Todas as simulações foram efetuadas em um servidor Dell R650, com 128 GB de memória RAM e um processador Intel Xeon Gold 6348 com 28 núcleos e frequência de 2,60 GHz. Cada simulação foi executada em um núcleo do processador, que executou o código em linguagem *Python* descrito na Seção 3.6.

As simulações foram divididas em dois grupos: os escoamentos monofásicos e os escoamentos bifásicos. Os resultados obtidos para as simulações desses dois grupos estão expostos, respectivamente, nas seções a seguir.

Os escoamentos foram simulados com malhas de elementos mini e com malhas de elementos quadráticos, mantendo constante a quantidade de elementos – e, como consequência, conferindo uma maior quantidade de graus de liberdade às malhas de elementos quadráticos. Os resultados para as diferentes malhas foram comparados em termos de acurácia, nos casos em que havia um resultado de referência, e de duração da simulação.

4.1 Escoamentos Monofásicos

Primeiramente, a metodologia proposta neste trabalho foi aplicada para a simulação de dois escoamentos monofásicos de interesse: o escoamento entre placas planas e o escoamento em uma cavidade.

No caso monofásico, a equação de conservação da quantidade de movimento, dada por (3.21), não possui o termo $\nabla \mathbf{v}^T$. Portanto, a matriz K da formulação do problema, dada por (3.56), se reduz a (4.1). Os demais itens da metodologia descrita no capítulo anterior foram mantidos inalterados, a exceção dos métodos que envolvem a interface entre os fluidos – neste caso, inexistente –, que não foram executados.

$$K = \begin{bmatrix} K_{xx} & 0 \\ 0 & K_{yy} \end{bmatrix}_{2NV \times 2NV} \quad (4.1)$$

Para fins de validação da metodologia, o resultado da simulação do escoamento entre placas planas foi comparado com a solução analítica desse fenômeno. Por sua vez, os resultados das simulações do escoamento em uma cavidade foram comparados com resultados numéricos relatados na literatura. A compatibilidade dos resultados encontrados com os resultados de referência corroborou a validade da metodologia proposta quando aplicada a escoamentos monofásicos, possibilitando o prosseguimento da validação para os escoamentos bifásicos.

4.1.1 Escoamento entre Placas Planas

O escoamento entre placas planas consiste em um escoamento através de um canal bidimensional, formado na região entre duas placas planas infinitas. Para este escoamento, foi considerado um canal de largura unitária e razão de aspecto igual a 5. Nas fronteiras esquerda e direita do domínio, foram impostas, respectivamente, as condições de contorno de entrada de fluido – com um perfil uniforme de velocidade horizontal igual a 1 – e de pressão prescrita nula. Nas fronteiras inferior e superior, foram impostas condições de contorno de não deslizamento. A geometria do escoamento, bem como as condições de contorno, estão representadas na Figura 4.1.

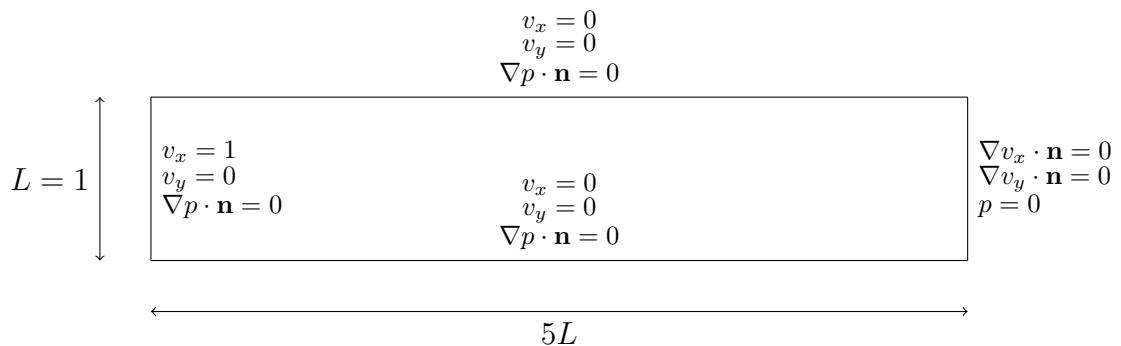


Figura 4.1: Geometria e condições de contorno do escoamento entre placas planas.

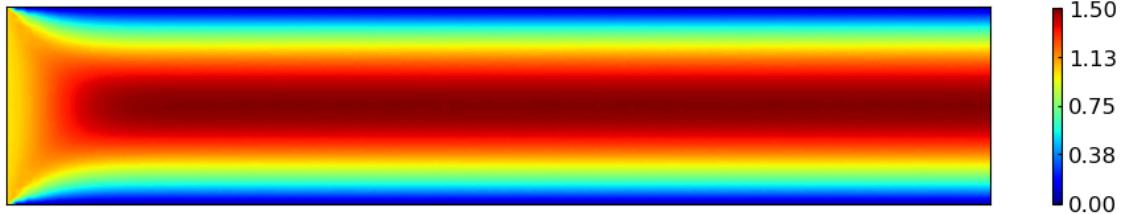
Para a simulação deste escoamento, aplicou-se o parâmetro $Re = 1$. Ademais, foram utilizadas duas malhas triangulares: uma malha com 5196 elementos mini e 7915 nós; e uma malha com 5196 elementos quadráticos e 10633 nós.

O escoamento foi simulado por 100 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,01$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.1. Verifica-se que o elemento utilizado tem uma forte influência sobre a duração da simulação, com o elemento quadrático exigindo um tempo significativamente superior. Isso se deve à maior quantidade de nós em sua malha e, principalmente, à necessidade de calcular numericamente as matrizes dos elementos – o que, para algumas delas, se faz a cada iteração. Para os elementos mini, por sua vez, essas matrizes podem ser calculadas analiticamente, o que requer um custo computacional substancialmente inferior.

Tabela 4.1: Duração das simulações do escoamento entre placas planas.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	5 min 36 s	3,36 s
Quadrático	22 min 59 s	13,79 s

Os campos de velocidade horizontal e velocidade vertical em regime permanente obtidos na simulação com a malha de elementos quadráticos – praticamente iguais aos da simulação com a malha de elementos mini – estão expostos na Figura 4.2.



(a) Velocidade horizontal.



(b) Velocidade vertical.

Figura 4.2: Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento entre placas planas com a malha de elementos quadráticos.

O escoamento entre placas planas, devido a sua simplicidade, admite solução analítica para as equações de Navier-Stokes, dada por (4.2).

$$v_x(y) = \frac{6}{L^2} y (L - y) \quad (4.2)$$

A fim de validar os resultados obtidos por meio das simulações, foram comparados seus perfis de velocidade horizontal completamente desenvolvidos com a solução analítica do escoamento, dada por (4.2). Essa comparação está exposta na Figura 4.3.

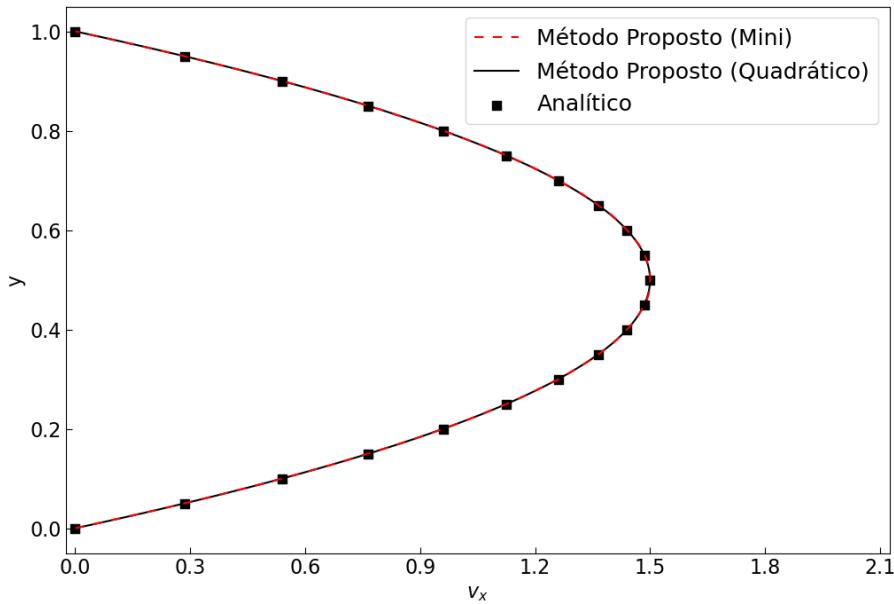


Figura 4.3: Comparação entre os perfis de velocidade horizontal obtidos nas simulações do escoamento entre placas planas e o perfil analítico.

A fim de quantificar a correspondência dos perfis de velocidade obtidos nas simulações com o perfil analítico, utilizou-se como métrica de erro a norma L_2 da diferença entre os perfis, dada por (4.3). Nessa equação, v_i é a velocidade no ponto i do perfil obtido por meio da simulação, enquanto \bar{v}_i é a velocidade de referência nesse mesmo ponto, calculada analiticamente.

$$\| \mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}} \|_2 = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (v_i - \bar{v}_i)^2} \quad (4.3)$$

Os erros calculados para cada uma das simulações do escoamento entre placas planas estão expostos na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Erros das simulações do escoamento entre placas planas.

$\ \mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}} \ _2$	
Mini	Quadrático
$8,31 \times 10^{-4}$	$4,61 \times 10^{-13}$

Ambos os valores de erro encontrados são bastante reduzidos, se comparados às magnitudes das velocidades do escoamento em questão, o que corrobora a validade da metodologia proposta. Além disso, conforme esperado, obteve-se um erro ordens de grandeza inferior para a malha de elementos quadráticos, o que indica a maior acurácia da simulação para esse tipo de elemento em comparação com o elemento mini, dadas malhas com o mesmo número de elementos.

4.1.2 Escoamento em uma Cavidade

Este típico problema consiste no escoamento em uma cavidade quadrada, que é induzido pelo movimento horizontal de sua parede superior. Para sua simulação, considerou-se uma cavidade quadrada com largura unitária. Foram impostas uma condição de parede em movimento com velocidade unitária para a fronteira superior do domínio e condições de não deslizamento para as fronteiras esquerda, inferior e direita. Além disso, impôs-se uma condição de pressão prescrita nula para o vértice inferior direito da malha. A Figura 4.4 mostra a geometria do escoamento, bem como as condições de contorno impostas.

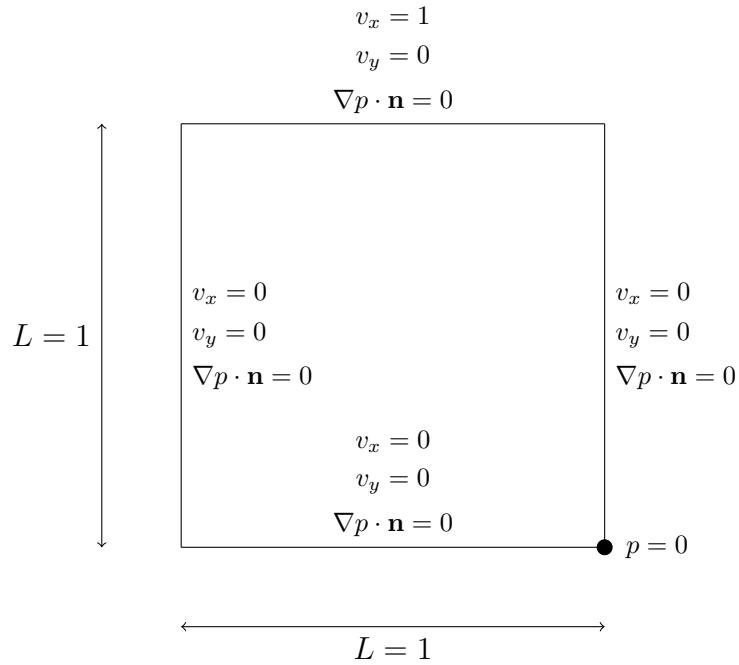


Figura 4.4: Geometria e condições de contorno do escoamento em uma cavidade.

Este escoamento foi simulado para três distintos números de Reynolds ($Re = 10$, $Re = 100$ e $Re = 1000$) e os resultados foram comparados com os publicados por MARCHI *et al.* [37], gerados por meio de simulações com o Método dos Volumes Finitos. Para a simulação deste escoamento, foram utilizadas duas malhas triangulares: uma malha com 21464 elementos mini e 32398 nós; e uma malha com 21464 elementos quadráticos e 43331 nós. Os resultados obtidos estão expostos a seguir.

Caso 1: $Re = 10$

O escoamento em uma cavidade com $Re = 10$ foi simulado por 300 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,01$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Duração das simulações do escoamento em uma cavidade com $Re = 10$.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	54 min	10,80 s
Quadrático	3 h 51 min	46,20 s

Os campos de velocidade horizontal e vertical em regime permanente obtidos na simulação com a malha de elementos quadráticos, bem como a comparação dos perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ e vertical em $x = 0,5$ com os resultados de referência para ambos os tipos de elemento, estão expostos nas Figuras 4.5, 4.6 e 4.7.

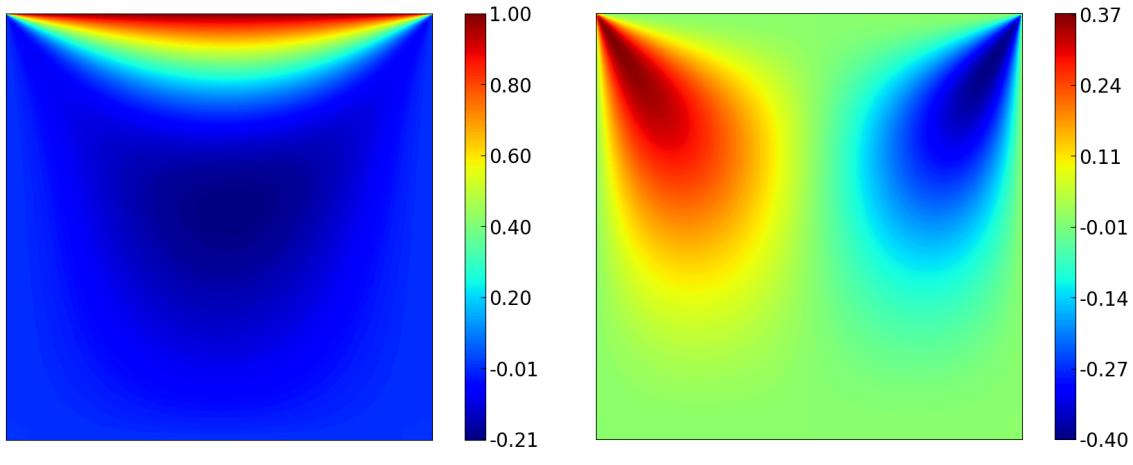


Figura 4.5: Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento em uma cavidade com a malha de elementos quadráticos e $Re = 10$.

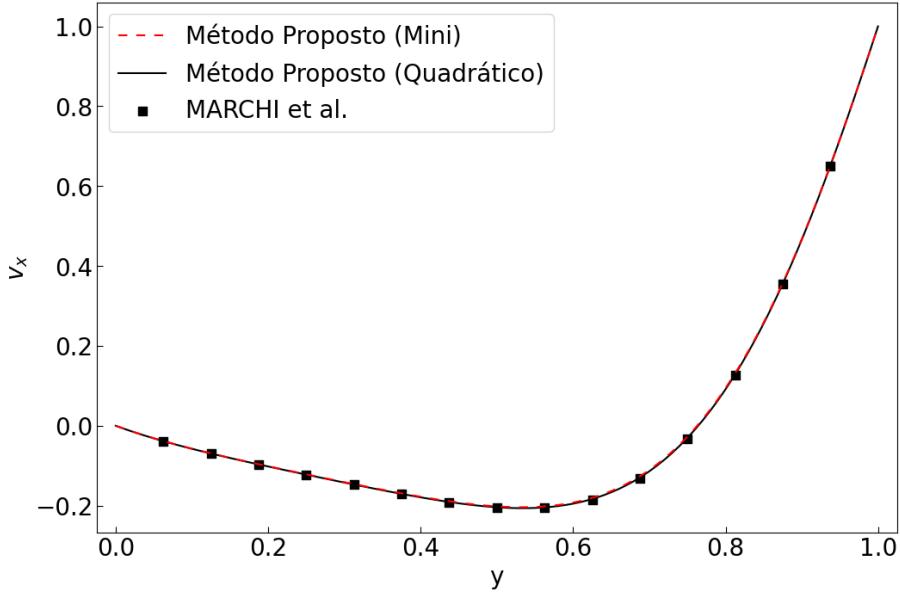


Figura 4.6: Comparação entre os perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 10$.

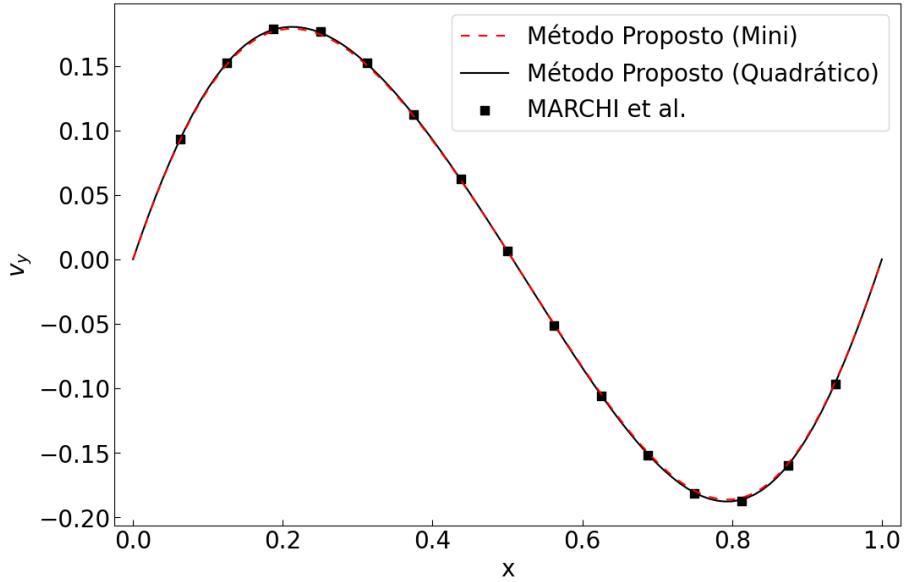


Figura 4.7: Comparação entre os perfis de velocidade vertical em $x = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 10$.

Caso 2: $Re = 100$

O escoamento em uma cavidade com $Re = 100$ foi simulado por 2500 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,01$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Duração das simulações do escoamento em uma cavidade com $Re = 100$.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	5 h 32 min	7,97 s
Quadrático	28 h 20 min	40,80 s

Os campos de velocidade horizontal e vertical em regime permanente obtidos na simulação com a malha de elementos quadráticos, bem como a comparação dos perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ e vertical em $x = 0,5$ com os resultados de referência para ambos os tipos de elemento, estão expostos nas Figuras 4.8, 4.9 e 4.10.

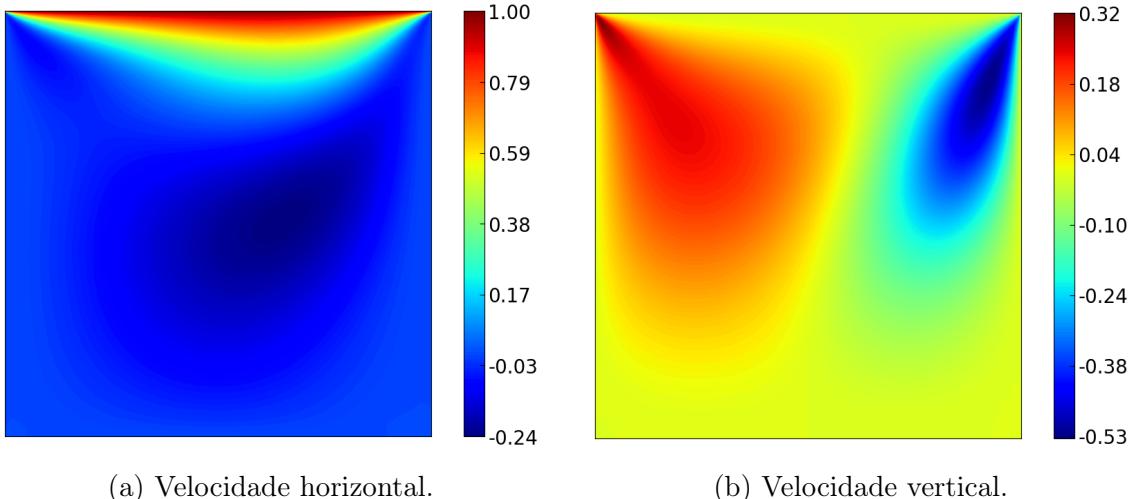


Figura 4.8: Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento em uma cavidade com a malha de elementos quadráticos e $Re = 100$.

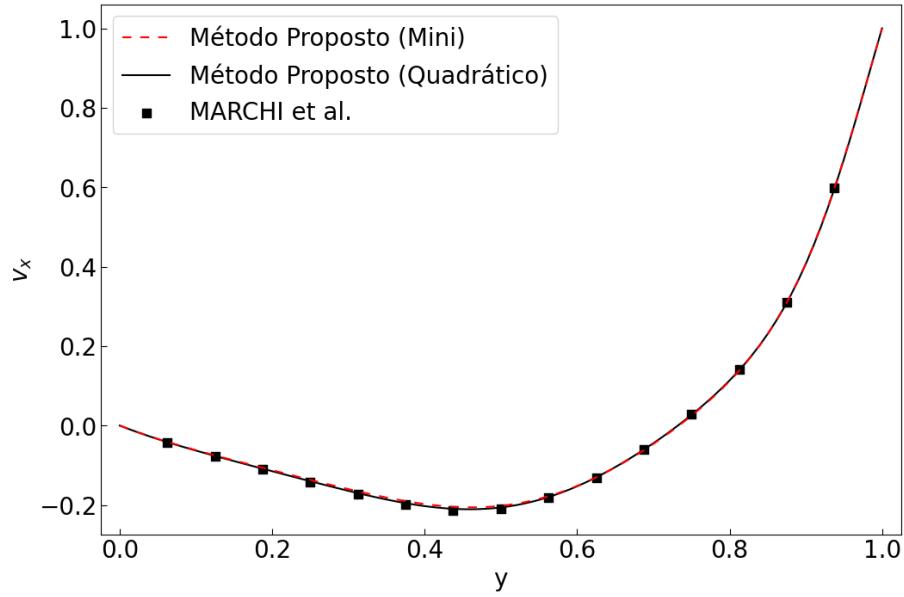


Figura 4.9: Comparação entre os perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 100$.

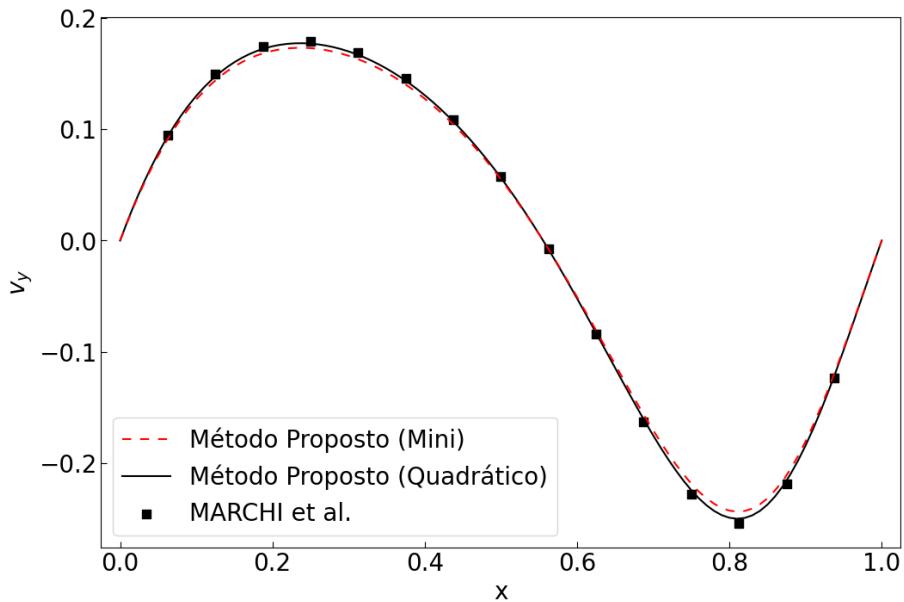


Figura 4.10: Comparação entre os perfis de velocidade vertical em $x = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 100$.

Caso 3: $Re = 1000$

O escoamento em uma cavidade com $Re = 1000$ foi simulado por 10000 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,01$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.5.

Tabela 4.5: Duração das simulações do escoamento em uma cavidade com $Re = 1000$.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	17 h 59 min	6,47 s
Quadrático	111 h 29 min	40,13 s

Os campos de velocidade horizontal e vertical em regime permanente obtidos na simulação com a malha de elementos quadráticos, bem como a comparação dos perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ e vertical em $x = 0,5$ com os resultados de referência para ambos os tipos de elemento, estão expostos nas Figuras 4.11, 4.12 e 4.13.

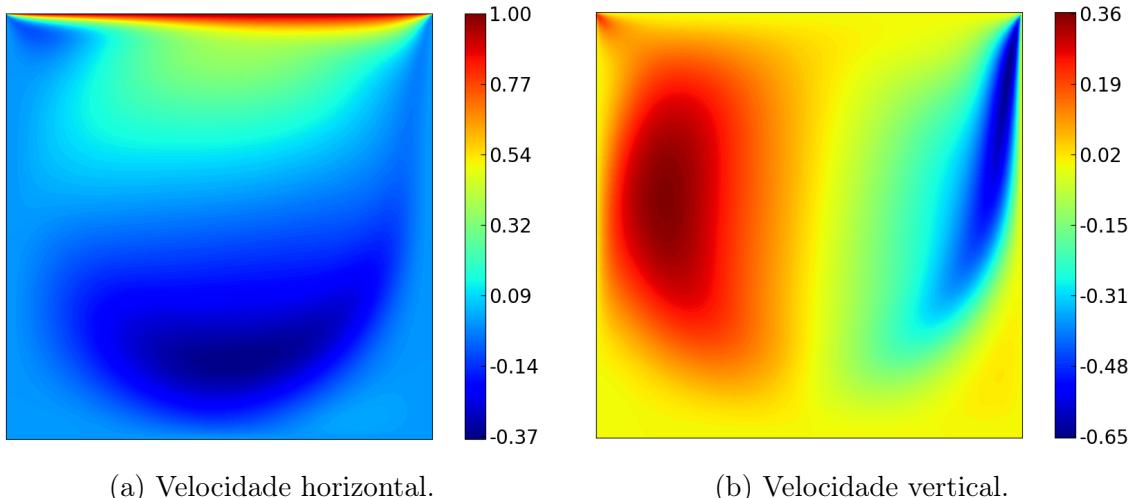


Figura 4.11: Campos de velocidade horizontal e vertical obtidos na simulação do escoamento em uma cavidade com a malha de elementos quadráticos e $Re = 1000$.

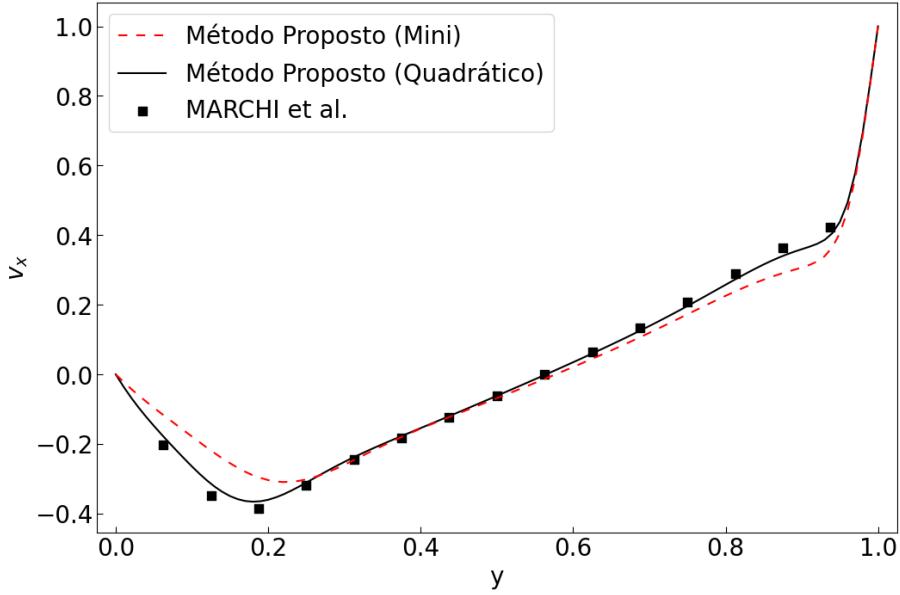


Figura 4.12: Comparação entre os perfis de velocidade horizontal em $y = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 1000$.

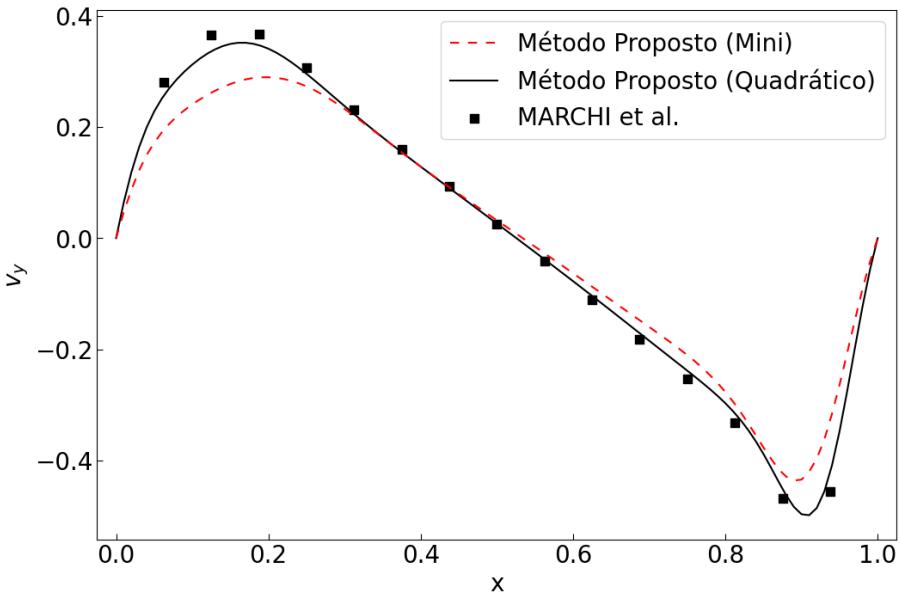


Figura 4.13: Comparação entre os perfis de velocidade vertical em $x = 0,5$ obtidos nas simulações e o resultado de referência, para o escoamento em uma cavidade com $Re = 1000$.

Novamente, para quantificar a correspondência dos perfis de velocidade obtidos nas simulações com os perfis de referência, obtidos por MARCHI *et al.* [37], calculou-se a norma L_2 da diferença entre os perfis. A Tabela 4.6 mostra os valores calculados para cada simulação realizada.

Tabela 4.6: Erros das simulações do escoamento em uma cavidade.

Re	$\ \mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}} \ _2$	
	Mini	Quadrático
10	$2,44 \times 10^{-3}$	$8,26 \times 10^{-4}$
100	$5,95 \times 10^{-3}$	$2,10 \times 10^{-3}$
1000	$5,65 \times 10^{-2}$	$1,63 \times 10^{-2}$

Novamente, foram obtidos valores de erro bastante reduzidos frente às magnitudes das velocidades do escoamento em questão, o que indica uma alta acurácia da metodologia proposta para a obtenção dos resultados de referência. Verifica-se, entretanto, um crescimento do erro com o aumento do número de Reynolds. Nas Figuras 4.12 e 4.13, referentes às simulações com número de Reynolds igual a 1000, pode-se visualizar, principalmente para a malha com elementos mini, que os máximos e mínimos dos resultados de referência não são atingidos pela simulação, o que evidencia o fenômeno de difusão intrínseco ao método implementado. Tal fenômeno é desprezível para números de Reynolds moderados, mas se torna significativo em simulações com número de Reynolds mais elevados. Para as simulações em questão, ainda que perceptível, a difusão é pouco significativa, não comprometendo a conformidade de seus resultados com os de referência.

A respeito das durações das simulações, apresentadas nas Tabelas 4.3, 4.4 e 4.5, verifica-se um pequeno decréscimo com o aumento do número de Reynolds. Todavia, o principal fator que influencia o tempo de simulação permanece sendo o tipo de elemento utilizado, com a duração das simulações com a malha de elementos quadráticos superando em até 520% à das simulações com a malha de elementos mini, no caso com $Re = 1000$. Mais uma vez, isso se deve à maior quantidade de nós e, principalmente, à maior quantidade de cálculos efetuados por iteração em decorrência do cálculo numérico das matrizes dos elementos.

4.2 Escoamentos Bifásicos

Uma vez validada a metodologia para escoamentos monofásicos, continuou-se o processo de validação, desta vez para escoamentos bifásicos – que consistem no escopo deste trabalho.

Inicialmente, simulou-se uma bolha estática, e a compatibilidade dos resultados com a solução analítica desse problema indicou um adequado acoplamento entre o campo de pressão e a tensão superficial na metodologia proposta.

Em seguida, simulou-se o escoamento da gota oscilante, e a conformidade entre a frequência de oscilação da gota obtida na simulação e seu resultado analítico

também corroborou a validade da metodologia. A fim de avaliar a influência da espessura da região da interface sobre a simulação do escoamento, realizou-se um estudo paramétrico, também exposto neste capítulo.

Prosseguiu-se com a simulação de escoamentos de maior complexidade, como a bolha em ascensão e a instabilidade de Rayleigh-Taylor. Em ambos os casos, os resultados das simulações se mostraram compatíveis com resultados numéricos relatados na literatura, demonstrando uma adequada modelagem das forças de gravidade e indicando um bom desempenho da metodologia mesmo para escoamentos com deformações significativas na interface entre os fluidos.

Por fim, simularam-se casos de coalescência de duas bolhas inicialmente circulares e de duas bolhas de Taylor. Para o primeiro caso, ratificou-se a validade da metodologia a partir da similaridade dos resultados da simulação com experimentos de referência. Com as bolhas de Taylor, verificou-se que o efeito das paredes sobre sua dinâmica não é um impedimento para a simulação do escoamento e para a descrição das mudanças topológicas. Mais uma vez, estudos paramétricos foram efetuados, a fim de avaliar a influência dos números de Galileu e Eötvös sobre o fenômeno da coalescência.

Todos as simulações supracitadas, bem como as conclusões tomadas a partir de seus resultados, serão descritas detalhadamente nas subseções a seguir.

4.2.1 Bolha Estática

Uma simulação inicial para a validação do código para escoamentos bifásicos foi o problema da bolha estática. Neste caso, considera-se uma bolha de um fluido imersa em outro fluido, sem a ação da gravidade, conforme a geometria exposta na Figura 4.14. Nas fronteiras inferior, esquerda e direita do domínio, foram impostas condições de contorno de não deslizamento, enquanto na fronteira superior, foi imposta uma condição de pressão prescrita nula.

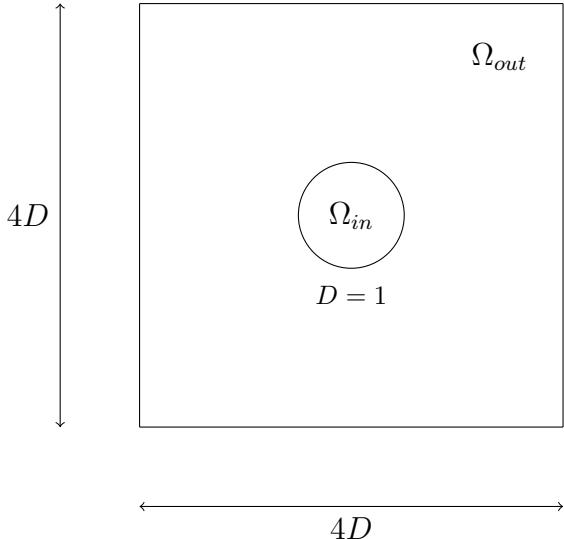


Figura 4.14: Geometria inicial do problema da bolha estática.

A bolha, inicialmente parada e na ausência de forças externas, tende a permanecer parada, com seu formato circular mantido pela ação da tensão interfacial. A Equação de Navier-Stokes, na ausência dos elementos associados à velocidade, se reduz a (4.4).

$$\nabla p = \frac{1}{We} \mathbf{f} = \frac{1}{We} \kappa \delta \mathbf{n} \quad (4.4)$$

Portanto, o resultado esperado é um perfil de pressão uniforme no interior da bolha, com valor exposto em (4.5), onde \$R\$ é o raio da bolha, dada a imposição de uma pressão de referência nula na região exterior à bolha.

$$p_{in} = \frac{1}{We} \mathbf{f} = \frac{\kappa}{We} = \frac{1}{We R} \quad (4.5)$$

Este escoamento foi simulado com \$We = 10\$ e \$R = 0,5\$, sendo esperada, portanto, uma pressão uniforme \$p = 0,2\$ no interior da bolha. Foram considerados também o parâmetro \$Re = 100\$ e as seguintes propriedades para os fluidos: \$\rho_{in} = 0,01\$ e \$\mu_{in} = 0,5\$ para o fluido interno, e \$\rho_{out} = 1\$ e \$\mu_{out} = 1\$ para o fluido externo. Vale ressaltar que as estritas definições dos números de Reynolds, Weber, Galileu e Eötvös não se aplicam a este escoamento, que não possui uma velocidade característica nem sofre a ação da gravidade; entretanto, por simplicidade, a razão entre as forças iniciais e as forças viscosas e a razão entre as forças iniciais e as forças de tensão interfacial envolvidas no escoamento – que são o que realmente importa para caracterizá-lo – foram denominadas, respectivamente, número de Reynolds e número de Weber.

Para a simulação deste escoamento, foram utilizadas duas malhas triangulares: uma malha com 47566 elementos mini e 71618 nós; e uma malha com 47566 elementos quadráticos e 95669 nós. Para a representação da bolha, definiu-se inicialmente uma malha com 112 pontos, a fim de compatibilizar o refinamento da interface com o da malha fixa. Por fim, definiu-se uma razão de espessura da região da interface igual a 1.

O escoamento foi simulado por 1000 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,005$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.7, na qual novamente se verifica uma significativa influência do tipo de elemento que compõe a malha.

Tabela 4.7: Duração das simulações do problema da bolha estática.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	08 h 52 min	31,92 s
Quadrático	25 h 03 min	90,18 s

O campo de pressão obtido ao final da simulação com elementos quadráticos – praticamente igual ao da simulação com elementos mini – está exposto na Figura 4.15. Vale destacar que a região de transição de coloração nas proximidades da interface da bolha retrata a suavização do perfil de pressão, que, apesar de não prevista no modelo teórico, era esperada para o resultado da simulação, visto que é decorrente da utilização da função de Heaviside suavizada para a representação da interface.

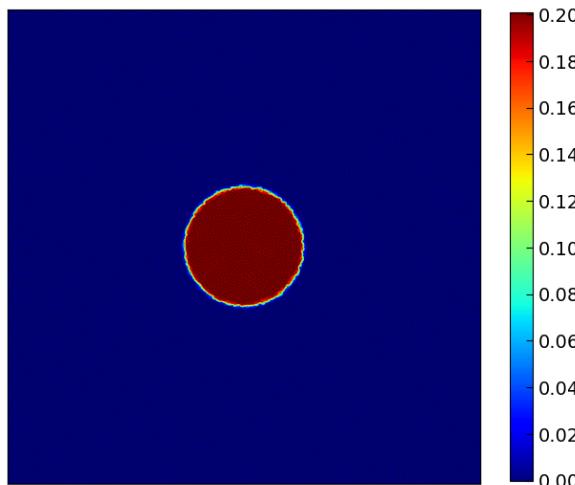


Figura 4.15: Campo de pressão obtido ao final da simulação do problema da bolha estática com a malha de elementos quadráticos.

A fim de validar os resultados das simulações, compararam-se os perfis horizontais de pressão que passam pelo centro da bolha obtidos nas simulações com o perfil analítico. O resultado para a simulação com elementos mini está exposto na Figura 4.16, e o resultado para a simulação com elementos quadráticos está exposto na Figura 4.17. Novamente, pode-se notar a suavização do perfil de pressão que, apesar de não prevista no cálculo analítico, é compatível com a formulação aplicada para a simulação, na qual a suavização da interface foi imposta artificialmente.

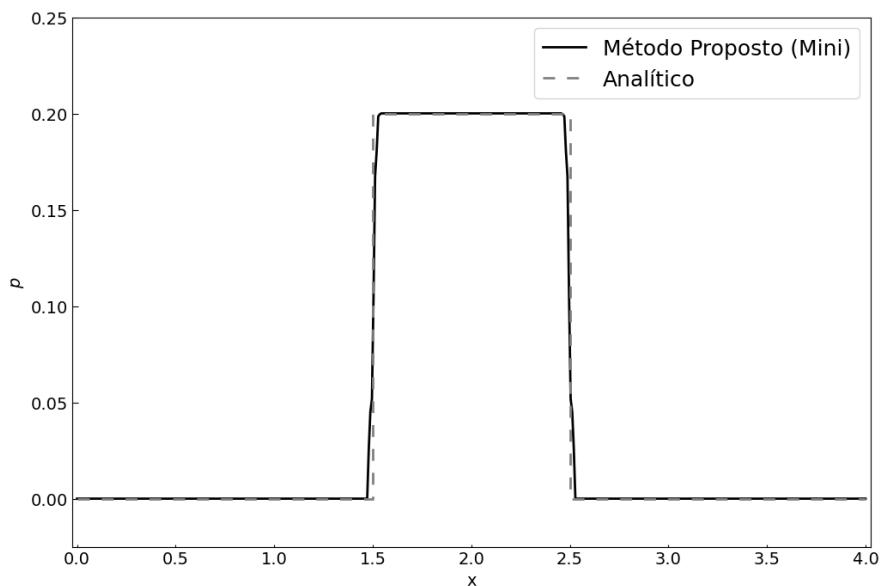


Figura 4.16: Comparação entre o perfil horizontal de pressão obtido ao final da simulação e o perfil analítico, para o problema da bolha estática com a malha de elementos mini.

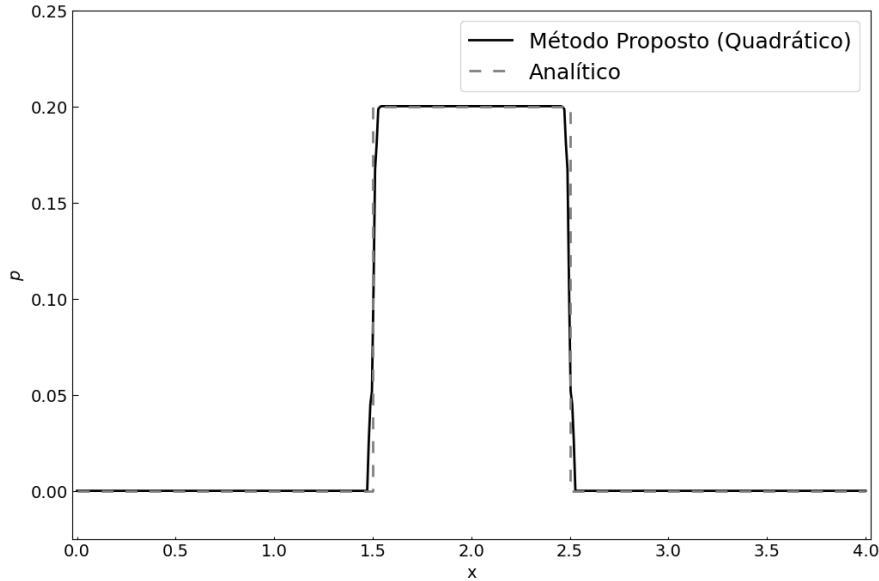


Figura 4.17: Comparação entre o perfil horizontal de pressão obtido ao final da simulação e o perfil analítico, para o problema da bolha estática com a malha de elementos quadráticos.

A Tabela 4.8 mostra a comparação da pressão interna obtida ao final da simulação com seu resultado analítico, mostrando elevada compatibilidade entre a metodologia aplicada e a teoria. Cabe ainda ressaltar que a pequena discrepância com relação ao resultado de referência se deve ao número finito de pontos que descreve a interface, conferindo-lhe um aspecto poligonal que, na formulação aplicada, não será capaz de representar fielmente o formato circular da bolha do modelo teórico.

Tabela 4.8: Pressões internas e erros obtidos nas simulações do problema da bolha estática.

Elemento	Pressão Interna	Erro
Mini	0,200079	0,039%
Quadrático	0,200079	0,039%

Apesar da simplicidade da simulação, este caso permitiu validar o acoplamento entre o campo de pressão e a tensão interfacial na metodologia proposta, para ambos os tipos de elemento utilizados, permitindo o avanço para simulações com grau de complexidade mais elevado.

4.2.2 Gota Oscilante

O problema da gota oscilante é bastante similar ao da bolha estática. Neste caso, também se considera um fluido inicialmente parado e imerso em outro fluido sem

ação da gravidade, e se impõem as mesmas condições de contorno – pressão prescrita nula na fronteira superior do domínio e não deslizamento nas demais fronteiras. Uma diferença com relação ao caso anterior é que o fluido interno tem densidade maior do que o externo. A principal diferença, no entanto, consiste no fato de que a geometria inicial da gota é elíptica, e não circular, como mostra a Figura 4.18.

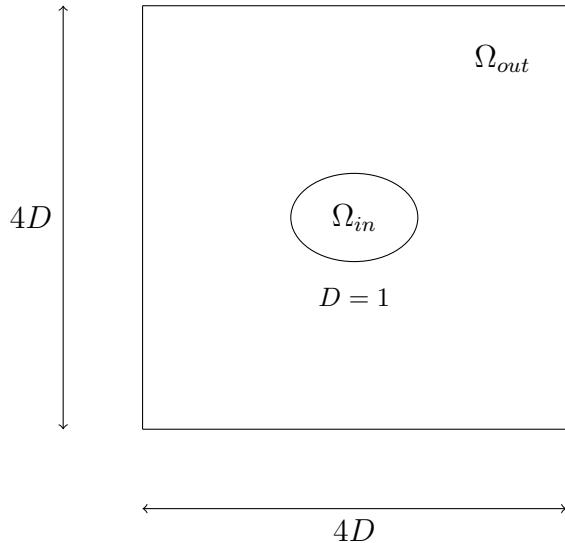


Figura 4.18: Geometria inicial do escoamento da gota oscilante (com a excentricidade da elipse acentuada, para fins de ilustração).

Na simulação anterior, corroborando a teoria, verificou-se que o estado de equilíbrio da gota sob ação da tensão interfacial seria circular. Portanto, para esta simulação, devido à perturbação inicial caracterizada pela geometria elíptica da gota, espera-se que a tensão interfacial leve a um movimento de redução da excentricidade da elipse, que, associado ao amortecimento causado pela viscosidade, provocará um movimento de oscilador harmônico amortecido.

Este escoamento foi simulado com uma gota de diâmetro $D = 1$, com uma perturbação horizontal inicial de 0,01. Os parâmetros definidos para o escoamento foram $Re = 100$ e $We = 10$, e, para os fluidos, foram consideradas as seguintes propriedades: $\rho_{in} = 1$ e $\mu_{in} = 1$ para o fluido interno, e $\rho_{out} = 0,001$ e $\mu_{out} = 0,01$ para o fluido externo. Assim como na subseção anterior, apesar de as definições rigorosas dos números de Reynolds e Weber não se aplicarem a este caso, definições mais abrangentes desses parâmetros foram empregadas para representar, respectivamente, a razão entre as forças iniciais e as forças viscósas e a razão entre as forças iniciais e as forças de tensão interfacial envolvidas no escoamento. Ademais, foram utilizadas as mesmas malhas triangulares da simulação anterior: uma malha com 47566 elementos mini e 71618 nós; e uma malha com 47566 elementos quadráticos

e 95669 nós. Para a representação da gota, definiu-se inicialmente uma malha com 112 pontos, a fim de compatibilizar o refinamento da interface com o da malha fixa.

Por fim, foram consideradas cinco diferentes razões de espessura da região da interface, representadas pelo parâmetro h , de modo a possibilitar uma análise da influência desse parâmetro nos resultados da simulação. Os valores considerados para h foram 0, 1, 3, 5 e 10. Na simulação com a espessura nula, não há nenhuma suavização da interface, e a transição das propriedades entre as fases do fluido é brusca. Quanto maior esse parâmetro, maior a suavização efetuada, que confere uma maior estabilidade à simulação, apesar da maior artificialidade das condições impostas ao problema.

O escoamento foi simulado por 1600 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,005$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.9. Nota-se que a espessura da região da interface não exerce influência relevante sobre o tempo de simulação, ao contrário do tipo de elemento, que, por interferir na quantidade de nós da malha e na quantidade de cálculos realizados a cada iteração, afeta significativamente a sua duração.

Tabela 4.9: Duração das simulações do escoamento da gota oscilante.

h	Duração				
	Total		Por Iteração		
	Mini	Quadrático	Mini	Quadrático	
0	22 h 35 min	52 h 40 min	50,81 s	118,50 s	
1	22 h 36 min	52 h 13 min	50,85 s	117,49 s	
3	23 h 03 min	51 h 42 min	51,86 s	116,32 s	
5	22 h 41 min	52 h 05 min	51,04 s	117,19 s	
10	22 h 40 min	51 h 33 min	51,00 s	115,99 s	

A Figura 4.19 expõe o campo de velocidade horizontal ao longo da simulação efetuada com a malha de elementos quadráticos e com razão de espessura da região da interface igual a 1. Nessa figura, é perceptível que a tendência inicial da gota é a redução de seu comprimento horizontal, devido à ação da tensão interfacial, que age no sentido de atingir o estado de equilíbrio da gota, dado por seu formato circular. Esse movimento, no entanto, é amortecido pela viscosidade do fluido, que, em conjunto com os demais parâmetros do escoamento, constituem uma condição de subamortecimento. A gota, portanto, assume o movimento de um oscilador harmônico amortecido, que pode ser notado devido à inversão das cores vermelha e azul a cada período da oscilação e à redução da intensidade dessas cores com o passar

das iterações – fenômenos que podem ser observados, por exemplo, no conjunto das subfiguras (b), (e), (h) e (k).

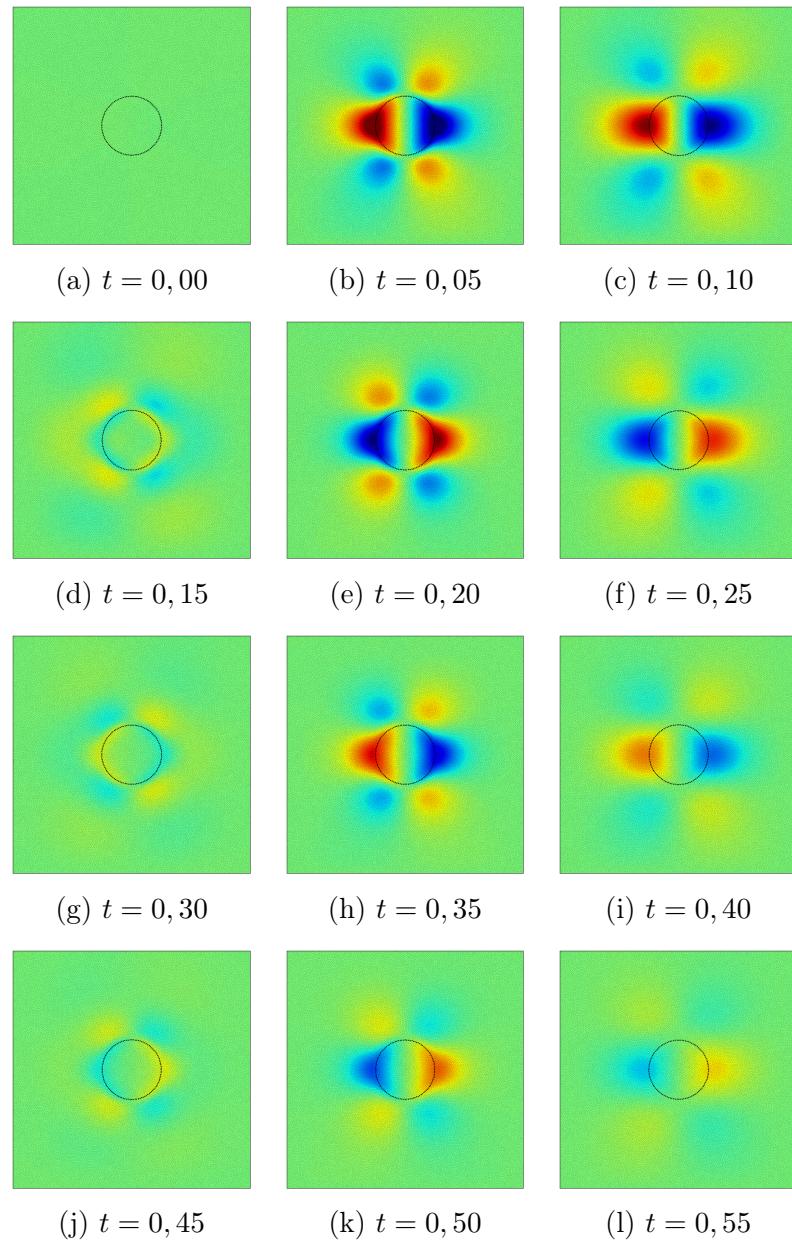


Figura 4.19: Campo de velocidade horizontal ao longo da simulação do escoamento da gota oscilante com a malha de elementos quadráticos e $h = 1$.

A evolução do comprimento horizontal da gota ao longo das simulações com razão de espessura da região da interface igual a 0, 1, 3, 5 e 10 está exposta, respectivamente, nas Figuras 4.20, 4.21, 4.22, 4.23 e 4.24.

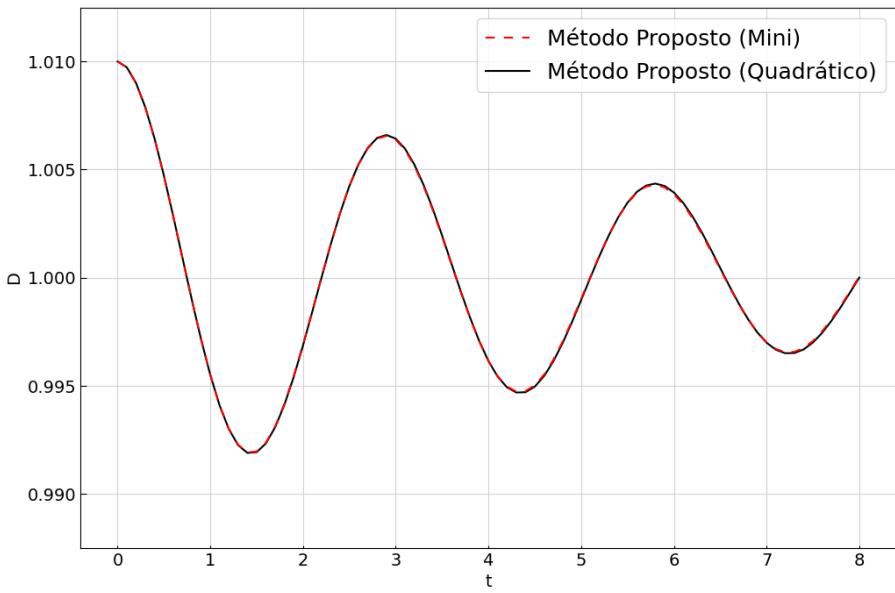


Figura 4.20: Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 0$.

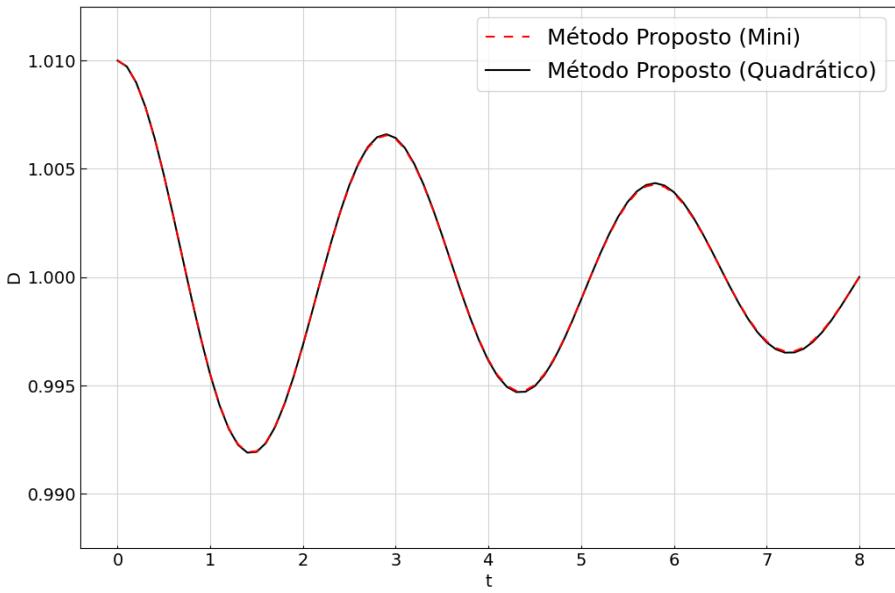


Figura 4.21: Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 1$.

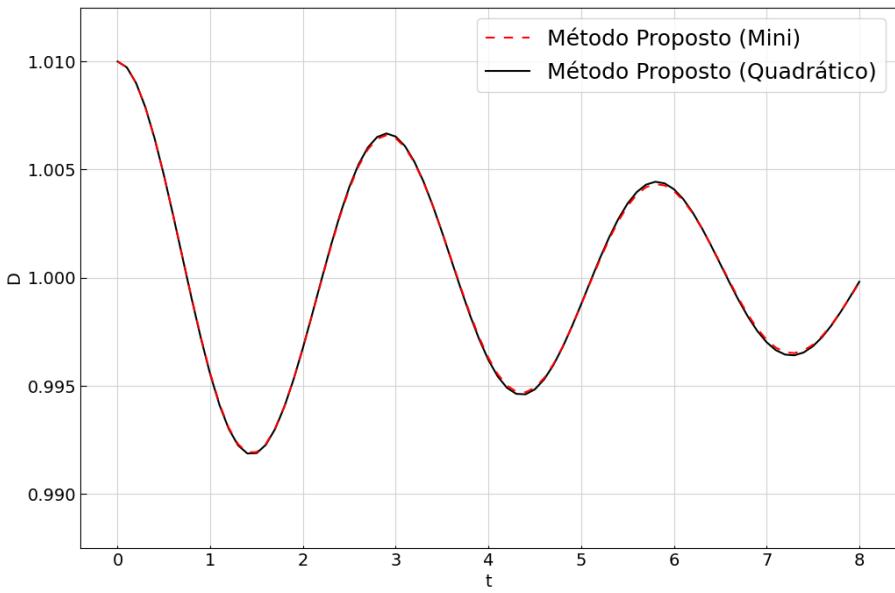


Figura 4.22: Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 3$.

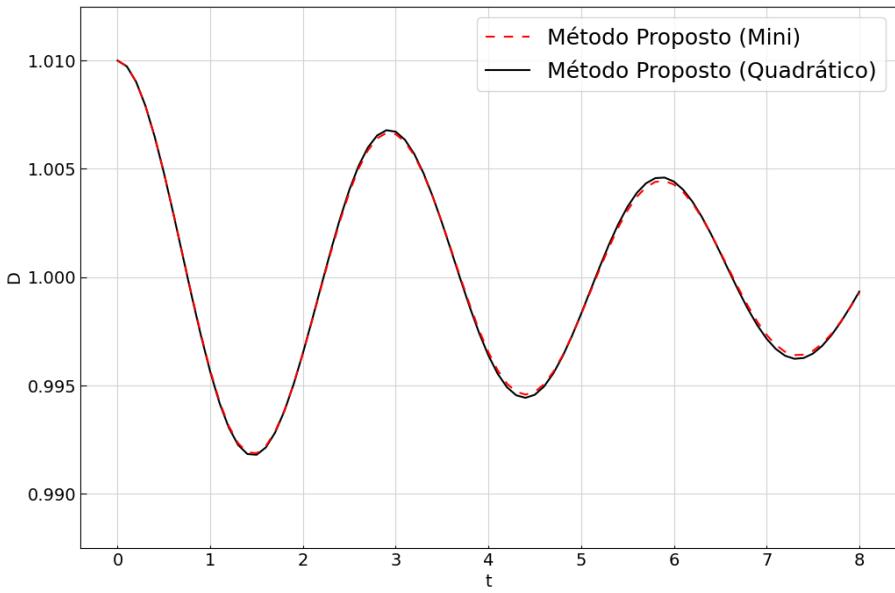


Figura 4.23: Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 5$.

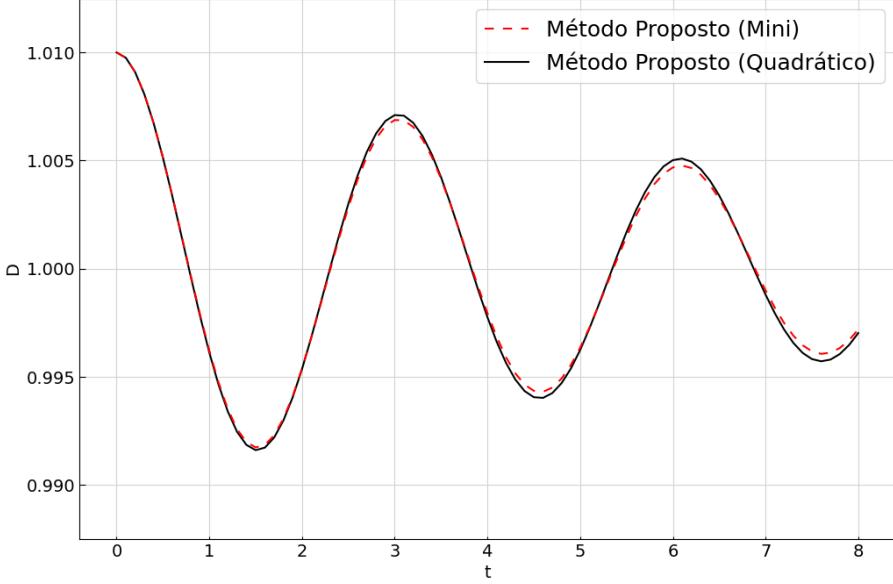


Figura 4.24: Evolução do comprimento horizontal da gota oscilante ao longo da simulação com $h = 10$.

A partir das figuras acima, pode-se verificar qualitativamente que o comportamento de oscilador harmônico amortecido foi obtido para todas as espessuras da região da interface consideradas. A fim de validar a metodologia proposta, seguiu-se com uma validação quantitativa, baseada na frequência de oscilação da gota obtida em cada simulação.

Essa frequência foi calculada analiticamente por STRUTT [38] e sua teoria foi estendida por FYFE *et al.* [39], para a consideração dos efeitos associados ao fluido externo. A frequência de oscilação, de acordo com essa teoria, pode ser calculada por (4.6), onde n é o modo de oscilação, σ é a tensão interfacial, ρ_{in} é a densidade do fluido da gota, ρ_{out} é a densidade do fluido externo e R é o raio de referência da gota.

$$\omega = \sqrt{\frac{(n^3 - n) \sigma}{(\rho_{in} + \rho_{out}) R^3}} \quad (4.6)$$

Aplicando os parâmetros da simulação para o cálculo do menor modo de oscilação, representado por $n = 2$, obtém-se uma frequência de oscilação analítica $\omega = 2,1898$.

A Tabela 4.10 expõe as frequências obtidas para cada uma das simulações executadas, cujos resultados foram previamente expostos nas Figuras 4.20, 4.21, 4.22, 4.23 e 4.24. Esses valores foram comparados com a frequência analítica calculada, por meio de uma métrica de erro relativo.

Tabela 4.10: Frequências de oscilação e erros obtidos nas simulações do escoamento da gota oscilante, com diferentes tipos de elemento e razões de espessura da região da interface.

h	Mini		Quadrático	
	ω	Erro	ω	Erro
0	2,1557	-1,56%	2,1539	-1,64%
1	2,1542	-1,63%	2,1543	-1,62%
3	2,1450	-2,05%	2,1471	-1,95%
5	2,1266	-2,88%	2,1299	-2,73%
10	2,0497	-6,40%	2,0540	-6,20%

Para fins de visualização dos resultados da tabela, a Figura 4.25 mostra um gráfico cujo eixo horizontal é a razão de espessura da região da interface utilizada na simulação e cujo eixo vertical é a frequência de oscilação.

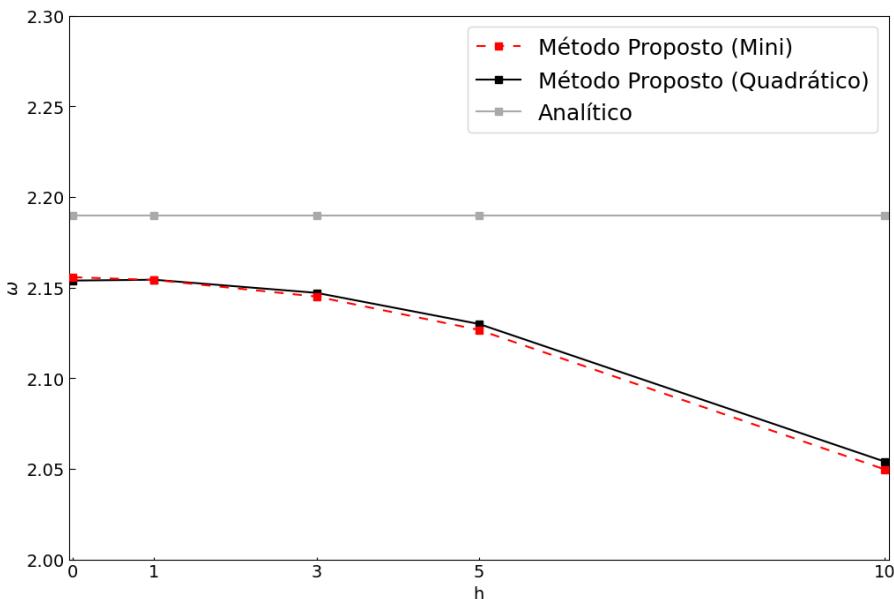


Figura 4.25: Frequências de oscilação obtidas na simulação do escoamento da gota oscilante, com diferentes tipos de elemento e razões de espessura da região da interface.

Verifica-se por meio do gráfico que, com o aumento da espessura da região da interface, há uma tendência decrescente da frequência da oscilação, distanciando-se cada vez mais do valor de referência. O erro obtido se mostra aproximadamente estável até a razão de espessura da região da interface igual a 1 e, para valores superiores, o erro tem uma trajetória crescente.

Tal resultado pode ser explicado pelo fato de que a suavização da interface é uma artificialidade numérica sem fundamento na realidade, que é introduzida no modelagem do fluido com o único intuito de conferir estabilidade à simulação. Neste caso, como a oscilação da gota tem uma baixa amplitude, o número de Reynolds do escoamento não é elevado e as malhas e o passo temporal escolhidos estão adequados para a simulação, esta já é suficientemente estável. O artifício numérico da suavização da interface, portanto, apenas distancia o modelo utilizado para o fluido, levando a um maior erro obtido nos resultados da simulação sem nenhuma contrapartida positiva.

Nota-se ainda que, de modo geral, a frequência de oscilação obtida nas simulações com a malha de elementos quadráticos foi mais próxima da referência do que a obtida com a malha de elementos mini, conforme esperado. Entretanto, a diferença obtida entre esses dois casos foi praticamente insignificante. Esse comportamento pode ser explicado pelo fato de que se simulou uma amplitude de oscilação bastante reduzida em uma malha consideravelmente refinada, o que reduz a magnitude dos efeitos não lineares das variáveis do escoamento no interior de cada elemento. Portanto, a grande vantagem dos elementos quadráticos, que é capturar essas não linearidades, torna-se pouco significativa neste caso.

Com base nas conclusões descritas acima, optou-se por, nas próximas simulações, prosseguir com uma razão de espessura da região da interface igual a 1, pelo fato de esse valor ter demonstrado um bom compromisso entre a estabilidade da simulação e a acurácia de seus resultados.

4.2.3 Bolha em Ascensão

Simulou-se também o problema da bolha em ascensão, que se assemelha ao problema da bolha estática, com a única diferença na formulação do problema sendo a ação da gravidade. Este escoamento foi simulado com uma bolha de diâmetro $D = 0,5$, em um domínio com largura igual a 1 e altura igual a 2, conforme a Figura 4.26. Foram impostas uma condição de contorno de não deslizamento na fronteira inferior do domínio, condições de simetria nas fronteiras esquerda e direita e uma condição de pressão prescrita nula na fronteira superior.

O problema da bolha em ascensão foi simulado com dois distintos conjuntos de propriedades para os fluidos: no primeiro caso, foram considerados os números adimensionais $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$, o fluido da bolha com densidade $\rho_{in} = 100$ e viscosidade $\mu_{in} = 1$ e o fluido externo com densidade $\rho_{out} = 1000$ e viscosidade $\mu_{out} = 10$; no segundo caso, foram considerados os números adimensionais $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$, o fluido da bolha com densidade $\rho_{in} = 1$ e viscosidade $\mu_{in} = 0,1$ e o fluido externo com densidade $\rho_{out} = 1000$ e viscosidade $\mu_{out} = 10$. Para a simulação deste

escoamento, em ambos os casos, foram utilizadas duas malhas triangulares: uma malha com 100664 elementos mini e 151411 nós; e uma malha com 100664 elementos quadráticos e 202157 nós. Para a representação da bolha, definiu-se inicialmente uma malha com 230 pontos, a fim de compatibilizar o refinamento da interface com o da malha fixa. Por fim, definiu-se uma razão de espessura da região da interface igual a 1.

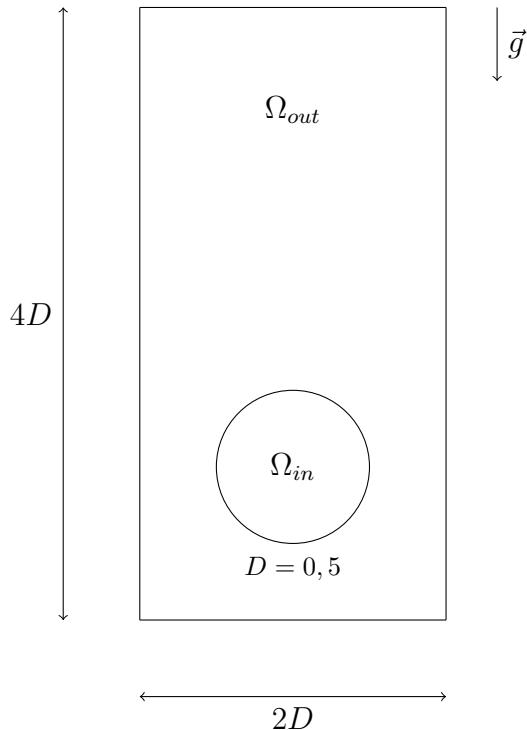


Figura 4.26: Geometria inicial do escoamento da bolha em ascensão.

As métricas consideradas para a avaliação dos resultados foram: a evolução da posição vertical do centroide da bolha ao longo da simulação; a evolução da circularidade da bolha ao longo da simulação; e a geometria da interface no instante $t = 3$. Considerando uma bolha formada pelos pontos (x_i, y_i) , para $0 \leq i \leq n$, com área igual a A e perímetro igual a P , temos que a posição vertical do centroide da bolha, y_c , é calculada por (4.7), enquanto a circularidade, C , é definida como a razão entre o perímetro do círculo de área equivalente à da bolha, P_e , e o perímetro real da bolha, P , como exposto em (4.8).

$$y_c = \frac{1}{6A} \left[(y_n + y_0) (x_n y_0 - x_0 y_n) + \sum_{i=0}^{n-1} (y_i + y_{i+1}) (x_i y_{i+1} - x_{i+1} y_i) \right] \quad (4.7)$$

$$C = \frac{P_e}{P} = \frac{\sqrt{4\pi A}}{P} \quad (4.8)$$

Os valores de referência para todas essas métricas foram publicados por HYSING *et al.* [40], em artigo que é frequentemente referenciado nas validações de metodologias no âmbito dos escoamentos bifásicos. Nele, são expostos os resultados das simulações de dois escoamentos distintos. Todavia, para cada um deles, apresentam-se resultados obtidos por meio de diferentes métodos e utilizando diferentes malhas para discretizar o domínio. Para a validação da metodologia proposta no atual trabalho, foram utilizados como referência os resultados obtidos por meio do software *FreeLIFE* com as malhas mais refinadas, que se baseiam no Método dos Elementos Finitos e em uma abordagem do tipo *level-set* para representação da interface.

Vale ressaltar, ainda, que a publicação de HYSING *et al.* [40] considera as variáveis dimensionais, diferentemente do realizado até então neste trabalho, no qual a metodologia aplicada pressupõe uma prévia adimensionalização do problema. A fim de viabilizar a comparação com os resultados de referência em sua forma original, os resultados das simulações efetuadas serão expostos também em sua forma dimensional nos itens a seguir.

Caso 1: $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$

O primeiro caso simulado, com um reduzido número de Eötvös, caracteriza um escoamento com grande relevância da tensão interfacial frente às forças de empuxo. Espera-se neste caso, portanto, que a bolha assuma um movimento de ascensão, devido a sua densidade inferior à do fluido externo, e que atinja um formato próximo do circular.

O escoamento foi simulado por 7500 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,0004$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.11, na qual, mais uma vez, verifica-se uma forte influência do elemento utilizado sobre a duração da simulação.

Tabela 4.11: Duração das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	231 h 22 min	111,06 s
Quadrático	499 h 02 min	239,54 s

A Figura 4.27 expõe a geometria da interface da bolha em diferentes instantes da simulação efetuada com a malha de elementos quadráticos. Nessa figura, é perceptível o movimento de ascensão da bolha bem como a deformação de sua interface, que atinge formato levemente achatado, com elevada circularidade, devido à grande relevância da tensão interfacial no escoamento. Tal resultado confirma qualitativamente o comportamento esperado para o escoamento com base em seus números adimensionais.

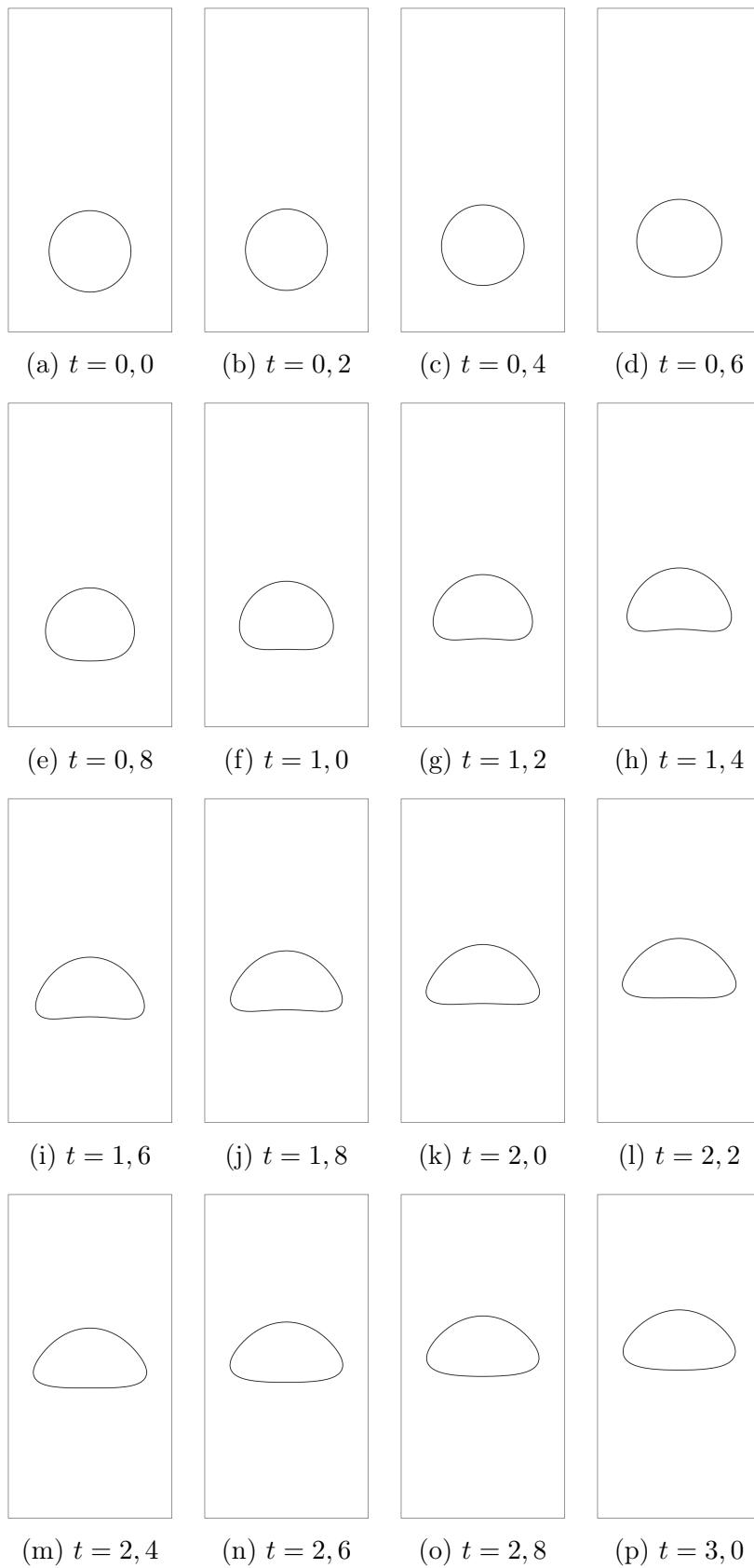


Figura 4.27: Geometria da interface em diferentes instantes da simulação da bolha em ascensão com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$.

Uma segunda validação qualitativa dos resultados foi a análise comparativa da geometria da interface no instante $t = 3$ entre a simulação com a malha de elementos mini, a simulação com a malha de elementos quadráticos e o resultado de referência, como mostra a Figura 4.28. As geometrias obtidas são praticamente indistinguíveis, denotando uma elevada compatibilidade entre a metodologia proposta e a referência.

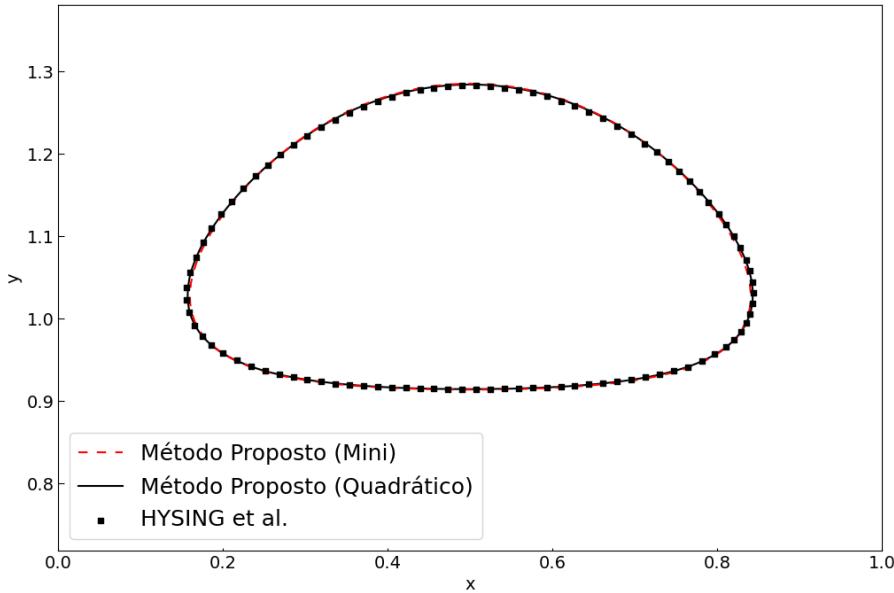


Figura 4.28: Geometria da interface no instante $t = 3$ da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$.

Para possibilitar uma validação quantitativa, a Figura 4.29 expõe a evolução da posição vertical do centroide da bolha ao longo do escoamento. A elevada correspondência entre os resultados obtidos nas simulações e o da referência, tanto com o elemento mini como com o elemento quadrático, indica um adequado acoplamento entre as forças de gravidade e a dinâmica da bolha na metodologia proposta.

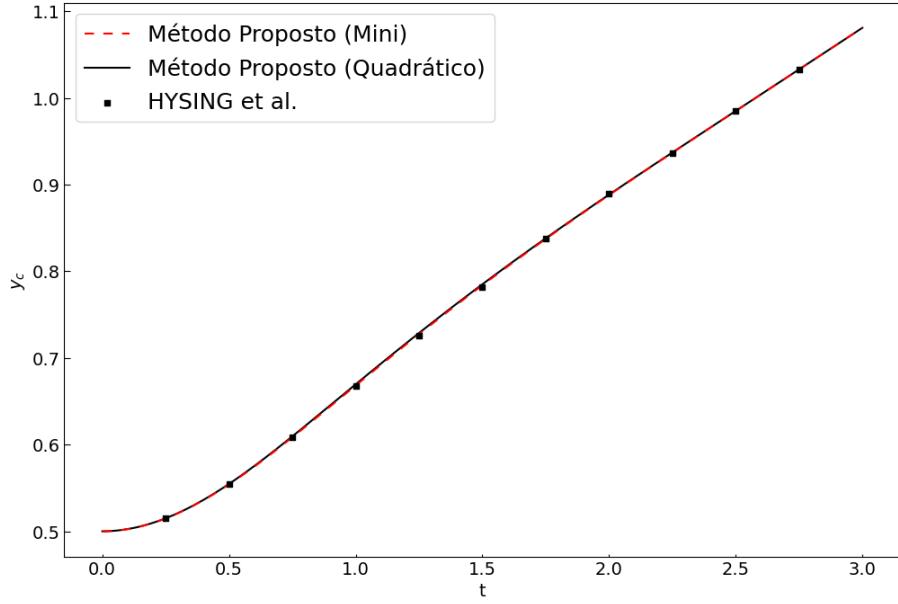


Figura 4.29: Evolução da posição vertical do centroide da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$.

A Figura 4.30, por sua vez, expõe a evolução da circularidade da bolha ao longo da simulação. Novamente, observa-se uma elevada correspondência com a referência, principalmente para a simulação com a malha de elementos quadráticos, que se mostrou capaz de descrever de forma acurada a geometria da interface da bolha em qualquer instante da simulação. Verifica-se, ainda, que o valor mínimo atingido pela circularidade nas simulações efetuadas foi de $C = 0,9$, isto é, que, conforme esperado, a bolha não se distanciou significativamente do formato circular em nenhum momento do escoamento.

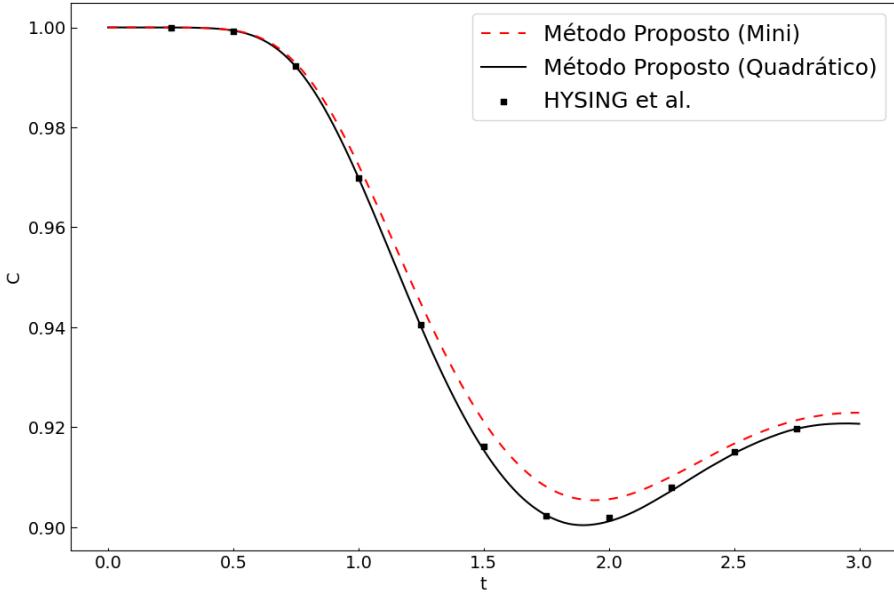


Figura 4.30: Evolução da circularidade da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$.

Para quantificar as correspondências observadas nos gráficos acima, utilizou-se como métrica de erro a norma L_2 da diferença entre os resultados das simulações e os resultados de referência. Os valores obtidos estão expostos na Tabela 4.12.

Tabela 4.12: Erros das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 10$, quanto à circularidade e à posição vertical do centroide da bolha.

Erro		
	C	y_c
Mini	$3, 10 \times 10^{-3}$	$9, 92 \times 10^{-4}$
Quadrático	$4, 16 \times 10^{-4}$	$1, 58 \times 10^{-3}$

Pode-se notar que ambas as simulações efetuadas, com a malha de elementos mini e com a malha de elementos quadráticos, apresentam valores de erro para a circularidade e para a posição vertical do centroide da bolha que são ordens de grandeza inferiores aos valores dessas variáveis. O elemento quadrático se mostra superior ao elemento mini para a aferição da circularidade, mas, com ambos os elementos, os resultados atingidos são satisfatórios para as variáveis avaliadas. Portanto, a metodologia aplicada se mostra adequada para a descrição do fenômeno da bolha em ascensão com os números adimensionais considerados.

Caso 2: $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$

O segundo caso simulado, com um número de Eötvös superior, caracteriza um escoamento com uma menor relevância da tensão interfacial frente às forças de empuxo. Espera-se, portanto, que a bolha também assuma um movimento de ascensão, mas que, neste caso, sua geometria se afaste mais do formato circular, devido à baixa tensão interfacial.

O escoamento foi simulado por 7500 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,0004$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.13. Verifica-se uma baixa influência dos números adimensionais sobre o tempo da simulação, devido à similaridade com os valores expostos anteriormente, e novamente uma significativa influência do tipo de elemento utilizado.

Tabela 4.13: Duração das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	231 h 45 min	111,24 s
Quadrático	517 h 59 min	248,63 s

A Figura 4.31 expõe a geometria da interface da bolha em diferentes instantes da simulação efetuada com a malha de elementos quadráticos. Nessa figura, também é perceptível o movimento de ascensão da bolha bem como a deformação de sua interface. Entretanto, a deformação da geometria da bolha nesta simulação é bem mais significativa, atingindo uma circularidade consideravelmente inferior, devido à reduzida tensão interfacial envolvida no escoamento. Tal resultado confirma qualitativamente o comportamento esperado para o escoamento com base em seus números adimensionais.

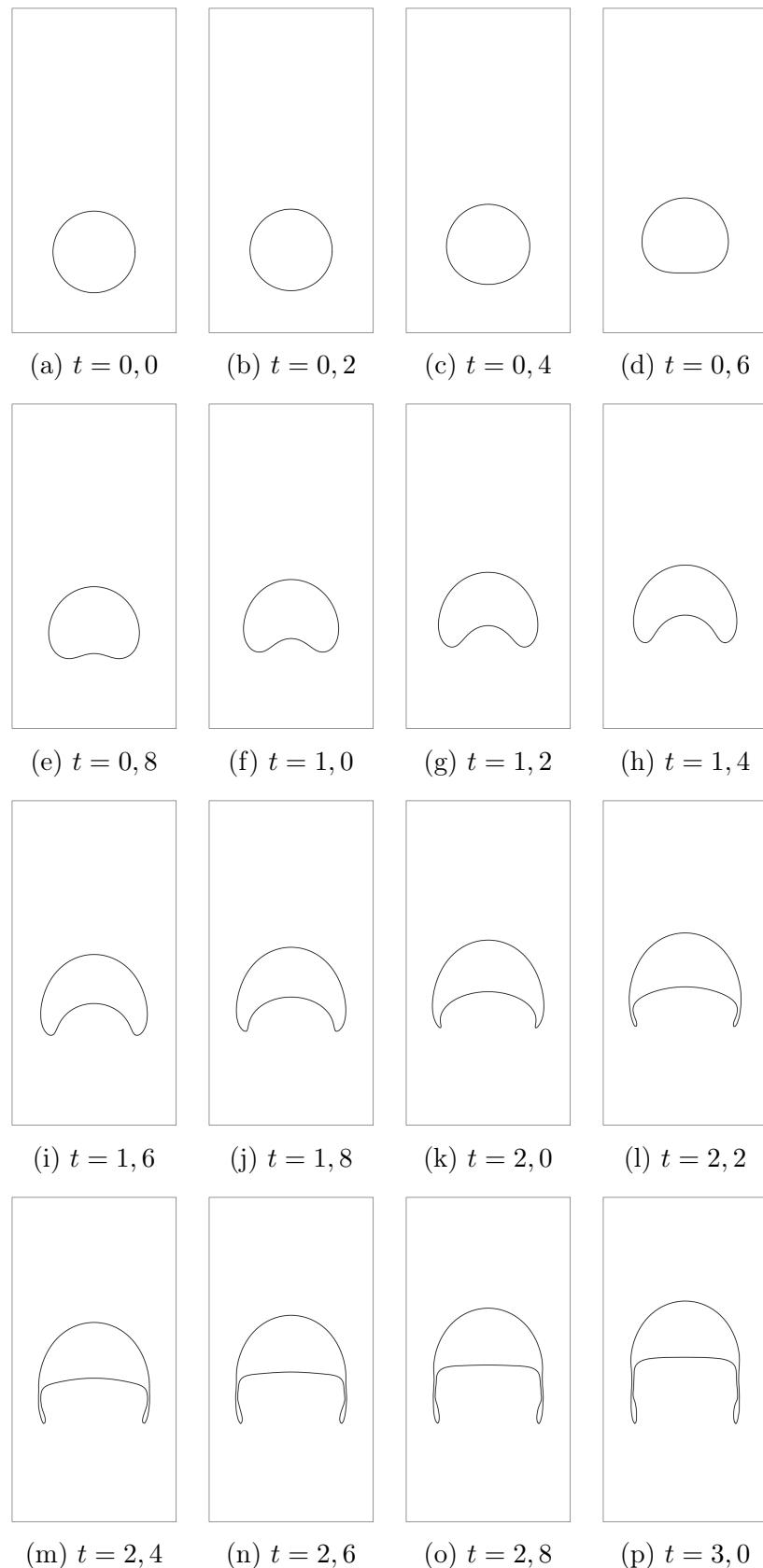


Figura 4.31: Geometria da interface em diferentes instantes da simulação da bolha em ascensão com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$.

Novamente, fez-se uma análise comparativa da geometria da interface no instante $t = 3$ entre a simulação com a malha de elementos mini, a simulação com a malha de elementos quadráticos e o resultado de referência, como mostra a Figura 4.32. Vale ressaltar que a metodologia aplicada pressupõe a ausência de quebra da bolha, isto é, a bolha permaneceria como um objeto único independentemente do cenário da simulação. O formato antinatural atingido pela bolha indica que, na realidade, tal escoamento possivelmente levaria à quebra da bolha, com a formação de pequenas bolhas satélites em suas extremidades inferiores. Entretanto, para fins de validação, a similaridade entre as geometrias obtidas com a metodologia proposta e o resultado de referência é suficiente para corroborar a acurácia do método.

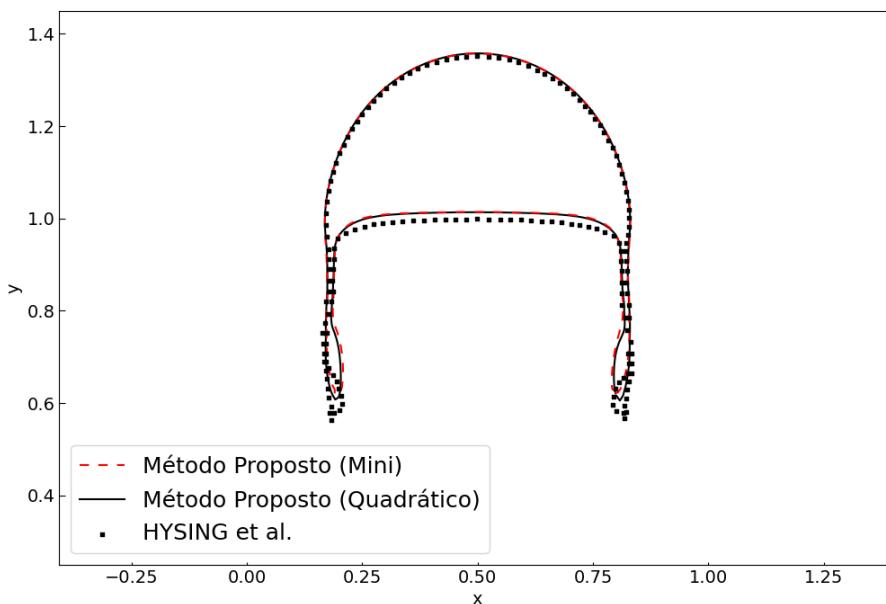


Figura 4.32: Geometria da interface no instante $t = 3$ da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$.

Para possibilitar uma validação quantitativa, a Figura 4.33 expõe a evolução da posição vertical do centroide da bolha ao longo do escoamento. Novamente se encontrou uma elevada correspondência entre os resultados obtidos nas simulações e o da referência, tanto com a malha de elementos mini como com a malha de elementos quadráticos, indicando um adequado acoplamento entre as forças de gravidade e a dinâmica da bolha na metodologia proposta.

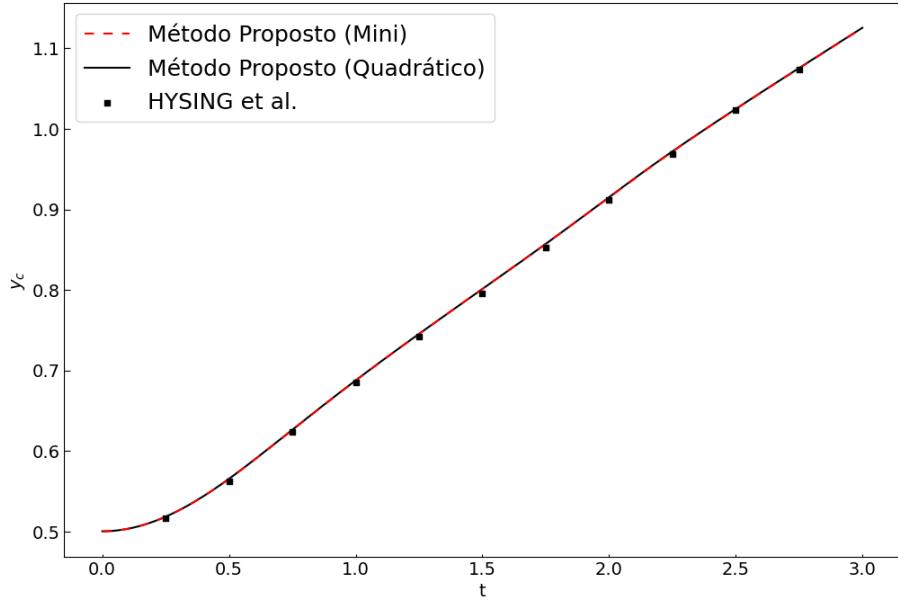


Figura 4.33: Evolução da posição vertical do centroide da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$.

A Figura 4.34, por sua vez, expõe a evolução da circularidade da bolha ao longo da simulação. Novamente, observa-se uma elevada correspondência com a referência, para as malhas de ambos os tipos de elemento. Nos instantes finais da simulação, verifica-se o início de uma pequena divergência entre as simulações e a referência. Entretanto, tal desvio ocorre justamente no momento em que o formato da bolha não reflete mais um comportamento compatível com a realidade, sendo mais relevante para a validação a alta conformidade entre as curvas observada nos instantes anteriores. Verifica-se, ainda, que o valor mínimo atingido pela circularidade nas simulações efetuadas foi de $C = 0,49$, isto é, que, conforme esperado, a bolha se distanciou consideravelmente da geometria circular devido à baixa tensão interfacial envolvida no escoamento.

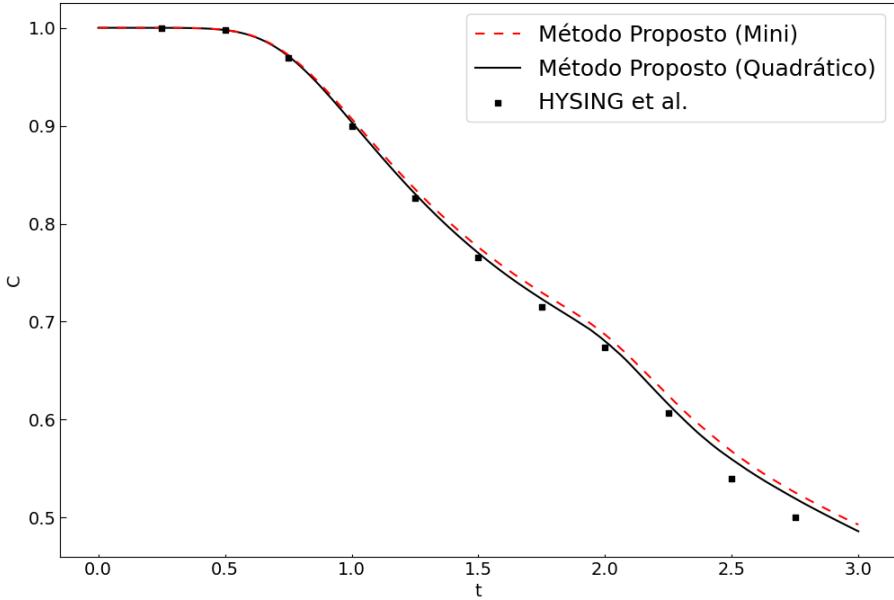


Figura 4.34: Evolução da circularidade da bolha ao longo da simulação da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$.

Para quantificar as correspondências observadas nos gráficos acima, mais uma vez se utilizou como métrica de erro a norma L_2 da diferença entre os resultados das simulações e os resultados de referência. Os valores obtidos estão expostos na Tabela 4.14.

Tabela 4.14: Erros das simulações da bolha em ascensão com $Ga^{1/2} = 35$ e $Eo = 125$, quanto à circularidade e à posição vertical do centroide da bolha.

	Erro	
	C	y_c
Mini	$1,48 \times 10^{-2}$	$2,97 \times 10^{-3}$
Quadrático	$9,69 \times 10^{-3}$	$3,11 \times 10^{-3}$

Mais uma vez, pode-se notar que ambas as simulações efetuadas, com a malha de elementos mini e com a malha de elementos quadráticos, apresentam valores de erro para a circularidade e para a posição vertical do centroide da bolha que são ordens de grandeza inferiores aos valores dessas variáveis. Em comparação com o caso anterior, observa-se que o método possui um desempenho inferior, principalmente para a circularidade; entretanto, tal comportamento se justifica pelo fato de que as deformações envolvidas neste caso são bastante superiores, devido ao elevado número de Eötvös. O elemento quadrático novamente se mostra superior ao elemento mini para a aferição da circularidade, mas, com ambos os elementos, os resultados

atingidos são satisfatórios para as variáveis avaliadas. Portanto, mesmo com números adimensionais mais críticos, a metodologia aplicada se mostra adequada para a descrição do fenômeno da bolha em ascensão.

4.2.4 Instabilidade de Rayleigh-Taylor

Esta simulação consiste em uma situação de equilíbrio instável, na qual um fluido pesado, com densidade $\rho_1 = 1,225$, é posicionado acima de um fluido leve, com densidade $\rho_2 = 0,1694$, em um domínio com largura igual a 1 e altura igual a 4, tal qual exposto na Figura 4.35. A viscosidade de ambos os fluidos é igual a $3,13 \times 10^{-3}$. Tais parâmetros levam aos números adimensionais $Ga^{1/2} = 391,37$ e $Fr = 0,31928$, que foram aplicados na formulação adimensional do problema.

A interface entre os fluidos é inicialmente definida pela função $y = 0,05 \cos(2\pi x)$ e, nesta simulação, é desprezada a ação da tensão interfacial. A perturbação inicial da interface é amplificada pela ação da gravidade, levando ao surgimento da instabilidade de Rayleigh-Taylor, caracterizada por uma geometria da interface em formato de cogumelo.

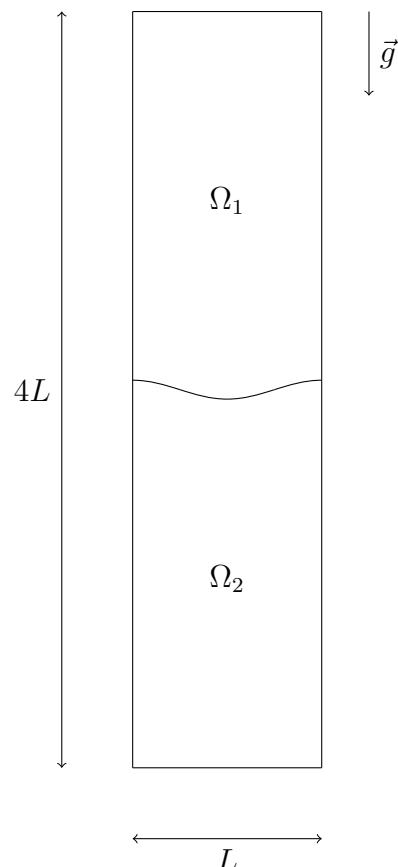


Figura 4.35: Geometria inicial da simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor.

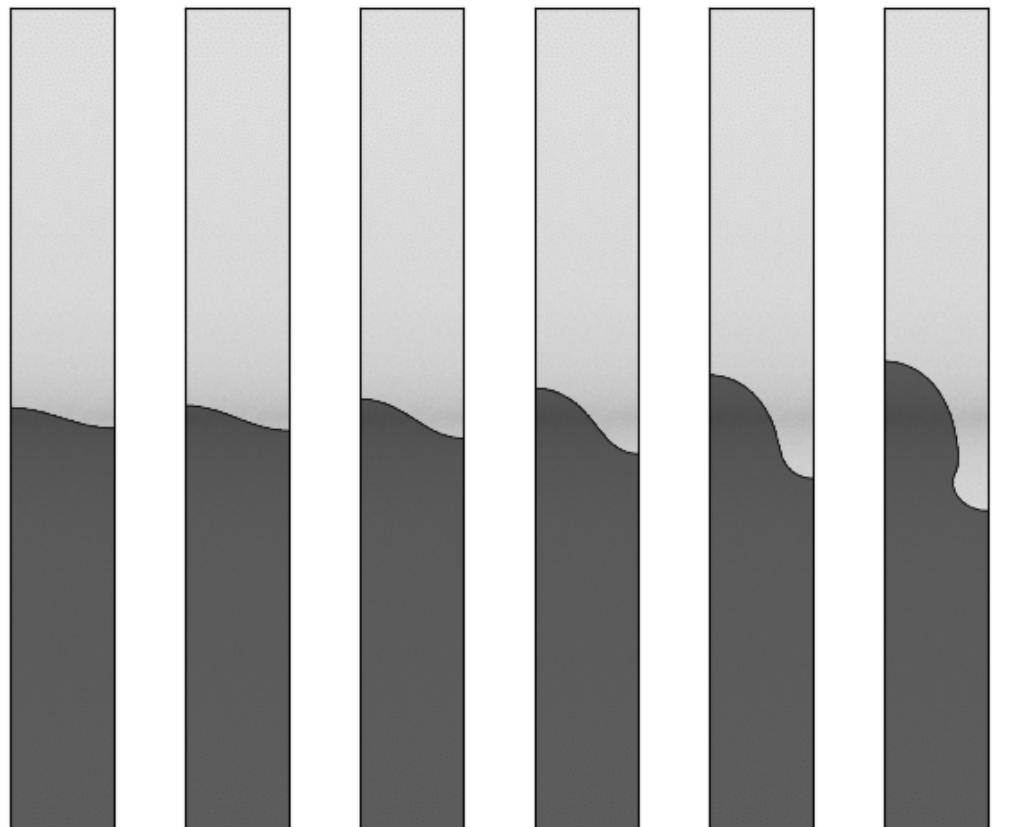
Devido à simetria do problema, foram utilizadas duas malhas triangulares de apenas metade do domínio para a simulação deste escoamento: uma malha com 69910 elementos mini e 105245 nós; e uma malha com 69910 elementos quadráticos e 140579 nós. Foram impostas condições de contorno de não deslizamento nas fronteiras inferior e superior do domínio, condições de simetria em suas fronteiras laterais e uma condição de pressão prescrita nula em seu ponto inferior esquerdo. Para a representação da interface, definiu-se inicialmente uma malha com 154 pontos, a fim de compatibilizar o seu refinamento com o da malha fixa. Por fim, definiu-se uma razão de espessura da região da interface igual a 1.

O escoamento foi simulado por 10000 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,0001$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.15. Novamente, o elemento quadrático está associado a um tempo de simulação consideravelmente superior, tanto pela maior quantidade de nós em sua malha como pelo cálculo numérico das matrizes dos elementos a cada iteração.

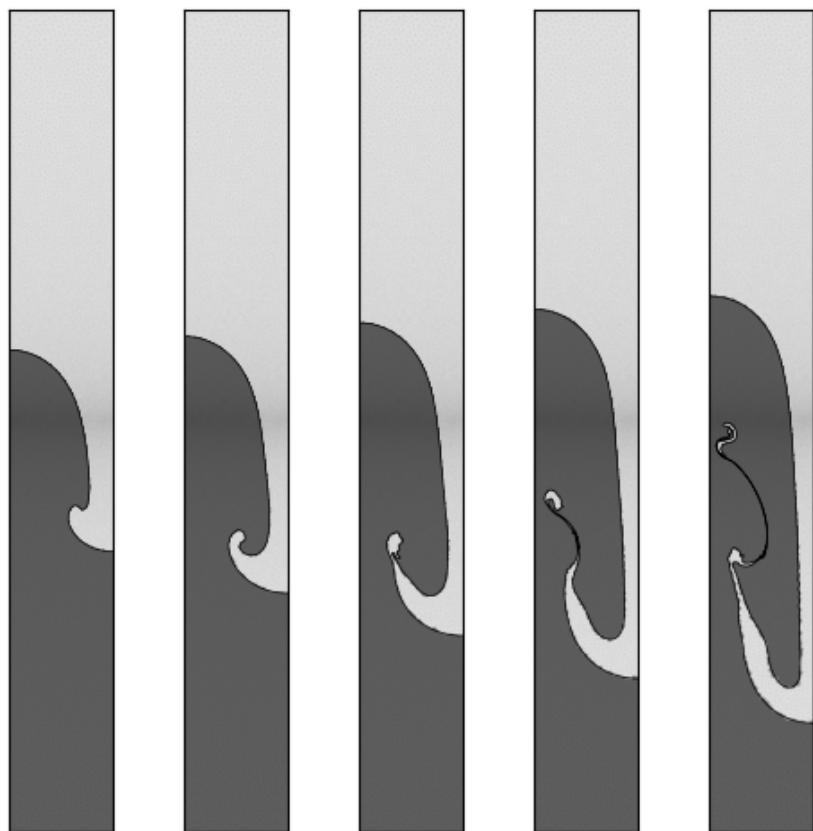
Tabela 4.15: Duração das simulações da instabilidade de Rayleigh-Taylor.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	112 h 41 min	40,57 s
Quadrático	294 h 50 min	106,14 s

A Figura 4.36 expõe a geometria da interface em diferentes instantes da simulação efetuada com a malha de elementos quadráticos. Nessa figura, é perceptível a evolução da interface para o formato de cogumelo, que é característico da instabilidade de Rayleigh-Taylor, o que confirma o comportamento qualitativo esperado para a simulação.



(a) $t = 0$ (b) $t = 0, 1$ (c) $t = 0, 2$ (d) $t = 0, 3$ (e) $t = 0, 4$ (f) $t = 0, 5$



(g) $t = 0, 6$ (h) $t = 0, 7$ (i) $t = 0, 8$ (j) $t = 0, 9$ (k) $t = 1, 0$

Figura 4.36: Evolução da simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor com a malha de elementos quadráticos.

Para a validação do resultado, fez-se uma análise comparativa da geometria da interface nos instantes $t = 0, 2$, $t = 0, 6$, $t = 0, 8$, $t = 0, 9$ e $t = 0, 95$ entre a simulação com a malha de elementos mini, a simulação com a malha de elementos quadráticos e o resultado de referência obtido por LÓPEZ *et al.* [41] a partir de simulações baseadas em uma abordagem do tipo *volume-of-fluid*, como mostra a Figura 4.37.

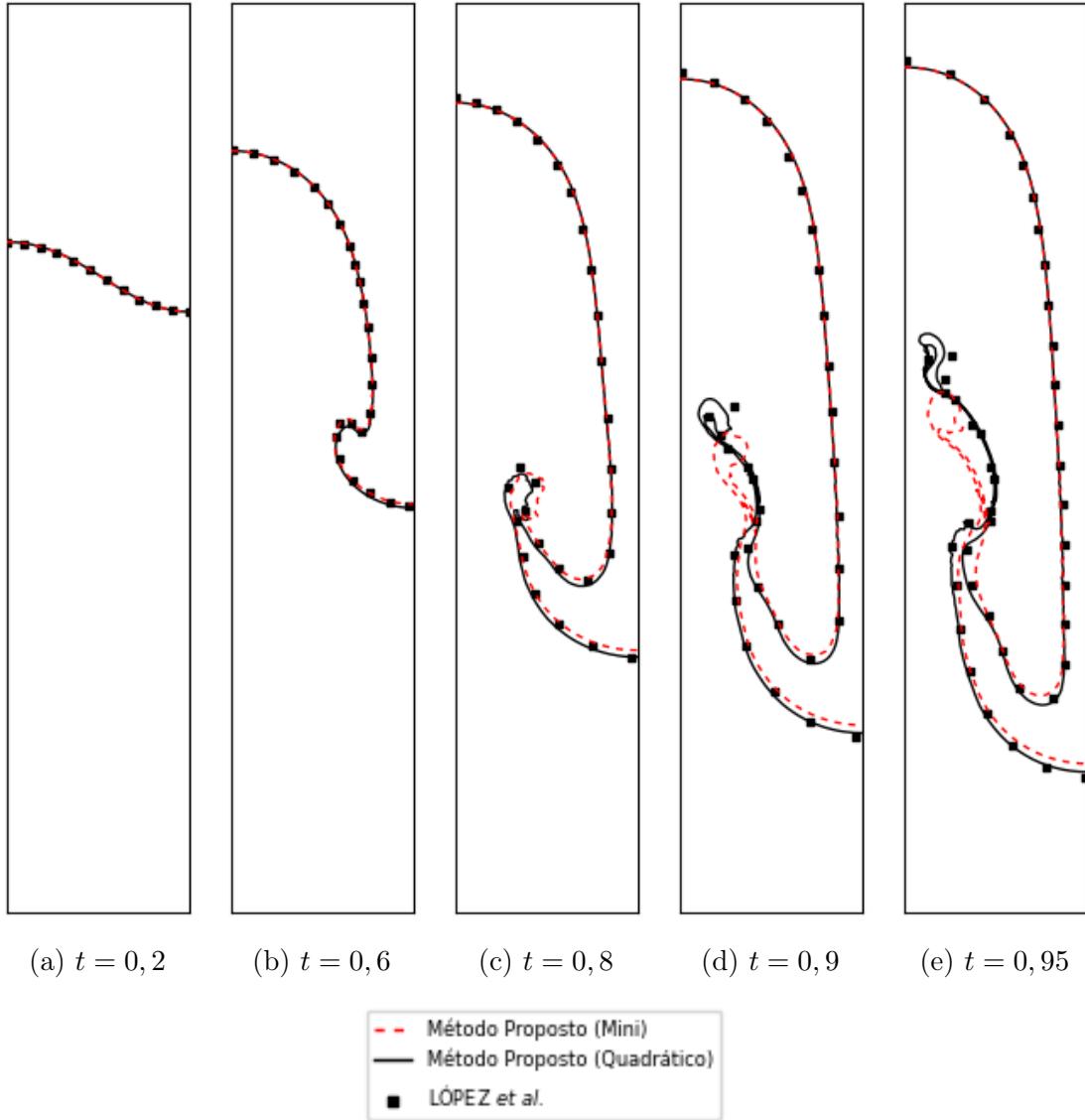


Figura 4.37: Comparação entre a geometria da interface em determinados instantes da simulação e o resultado de referência, para a instabilidade de Rayleigh-Taylor.

Pode-se observar uma elevada similaridade entre os resultados das simulações efetuadas e os resultados da referência. Nota-se, mais uma vez, uma superioridade do elemento quadrático para a descrição da geometria da interface, principalmente nos instantes finais da simulação, nos quais suas deformações são mais significativas. Com ambos os elementos, entretanto, os resultados atingidos são satisfatórios,

corroborando a aplicabilidade da metodologia para a descrição de escoamentos bi-fásicos com complexas geometrias na interface entre os fluidos e, em particular, da instabilidade de Rayleigh-Taylor.

4.2.5 Coalescência de Duas Bolhas

Esta simulação consiste no escoamento de duas bolhas em ascensão, sob ação da gravidade. Neste caso, entretanto, a topologia das bolhas não será conservada. Pela primeira vez, será observado o fenômeno da coalescência das bolhas, conforme a metodologia descrita no capítulo anterior. A geometria inicial do escoamento está exposta na Figura 4.38, e corresponde a duas bolhas de diâmetro $D = 1$, cujos centros estão separados por uma distância de $1,18D$, em um domínio com largura igual a $5D$ e altura igual a $10D$. Foram impostas uma condição de contorno de não deslizamento na fronteira inferior do domínio, condições de simetria nas fronteiras esquerda e direita e uma condição de pressão prescrita nula na fronteira superior.

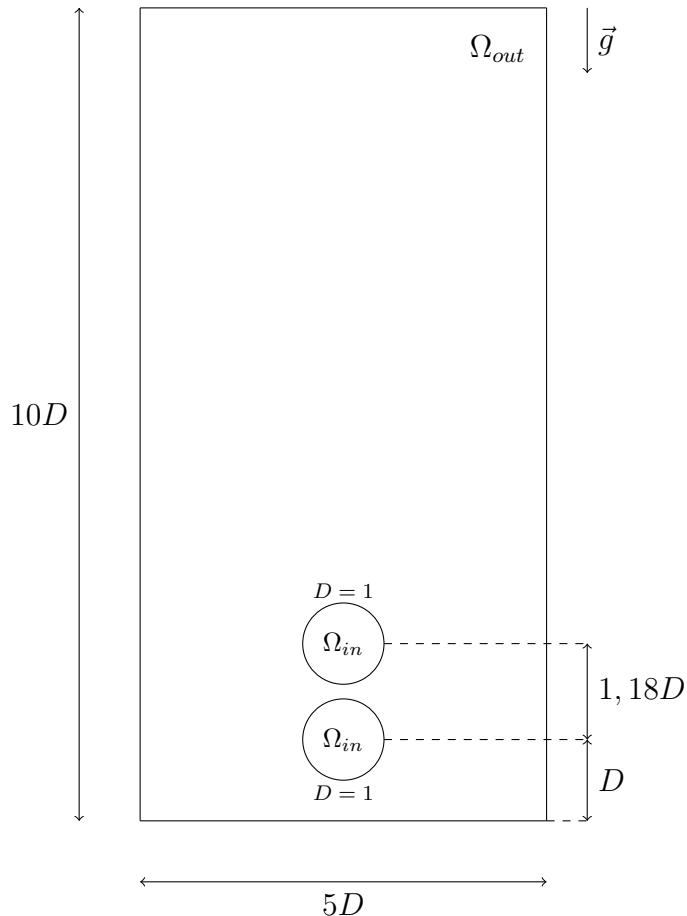


Figura 4.38: Geometria inicial do escoamento com a coalescência de duas bolhas.

Os parâmetros da simulação foram inspirados no experimento de um sistema argicerina conduzido por MANSSEH *et al.* [3], bem como em sua posterior modelagem para simulação computacional efetuada por HASAN e ZAKARIA [42]. Para fins de validação, o escoamento foi inicialmente simulado com os parâmetros $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$ e, para os fluidos, foram consideradas as seguintes propriedades: $\rho_{in} = 1,44$ e $\mu_{in} = 0,01$ para o fluido interno, e $\rho_{out} = 1220$ e $\mu_{out} = 1$ para o fluido externo. Posteriormente, novas simulações foram realizadas com diferentes números de Galileu e Eötvös, a fim de verificar a influência desses parâmetros sobre o fenômeno da coalescência.

Para a simulação deste escoamento, em todos os casos, foram utilizadas duas malhas triangulares: uma malha com 33204 elementos mini e 50046 nós; e uma malha com 33204 elementos quadráticos e 66687 nós. Para a representação das bolhas, definiram-se inicialmente malhas com 50 pontos, a fim de compatibilizar o seu refinamento com o da malha fixa. Por fim, definiu-se uma razão de espessura da região da interface igual a 1.

O escoamento foi simulado por 46000 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,0001$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.16, na qual, mais uma vez, verifica-se uma forte influência do elemento utilizado sobre a duração da simulação.

Tabela 4.16: Duração das simulações da coalescência de duas bolhas com $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	268 h 53 min	21,04 s
Quadrático	645 h 15 min	51,20 s

As Figuras 4.39 e 4.40 expõem a evolução da geometria da interface das bolhas em diferentes instantes das simulações efetuadas, respectivamente, com a malha de elementos mini e com a malha de elementos quadráticos. Em ambas as figuras, é perceptível o movimento de ascensão das bolhas, devido a sua densidade inferior à do fluido externo. A formação de uma região de baixa pressão na traseira da bolha superior faz com que a bolha inferior suba com uma velocidade mais alta, até que, em determinado momento, a curta distância entre as bolhas dá início ao fenômeno da coalescência. Imediatamente após sua ocorrência, observa-se a presença de uma única bolha, com geometria disforme, e a ação da tensão interfacial a leva a um formato de equilíbrio com o passar das iterações.

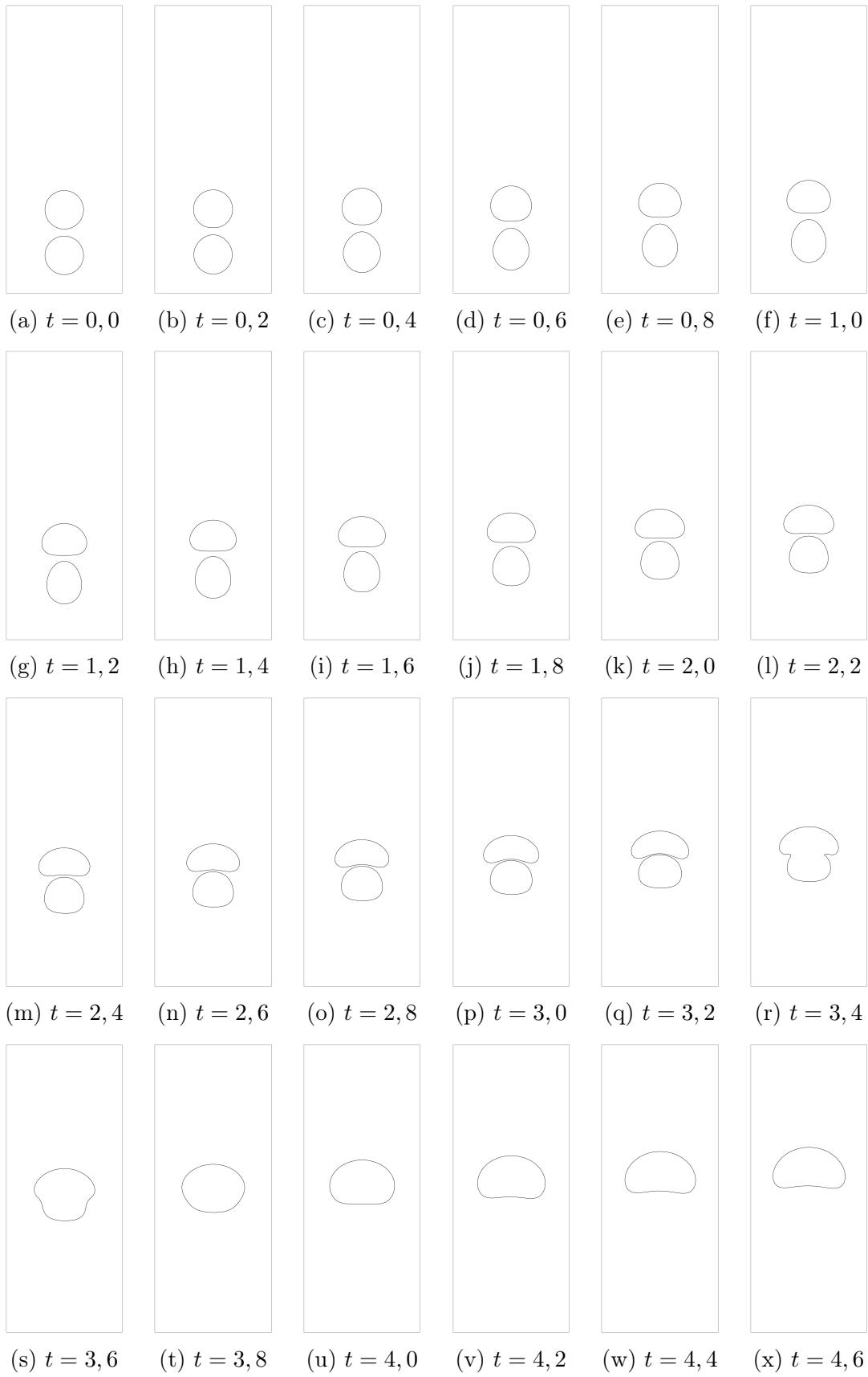


Figura 4.39: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.

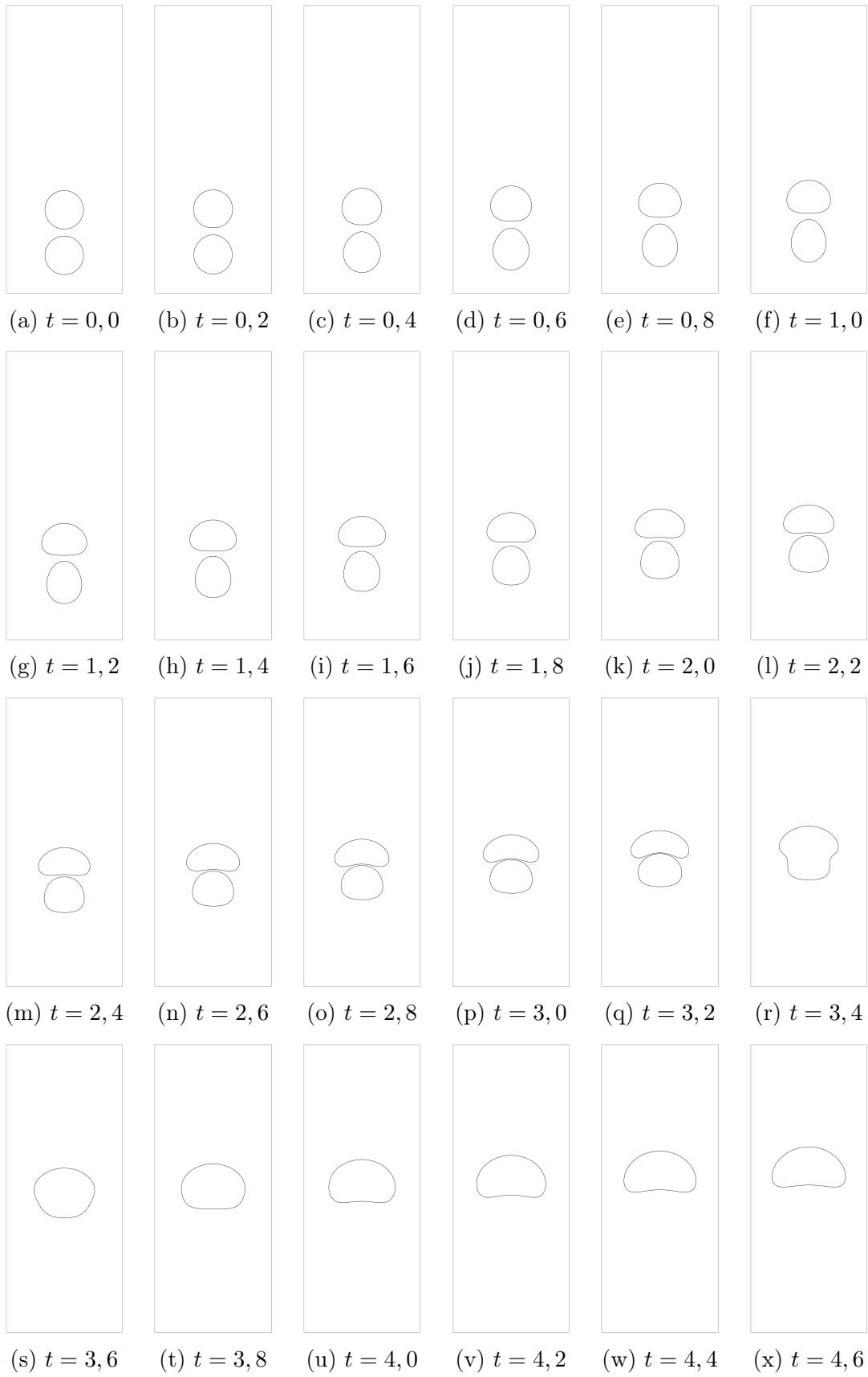


Figura 4.40: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.

As Figuras 4.41 e 4.42, por sua vez, mostram a evolução da geometria da interface em um recorte da simulação próximo ao instante da coalescência, a fim de apresentar em maior detalhe a forma como esse fenômeno foi modelado na metodologia proposta. Em ambas as figuras, percebe-se que as regiões de elevada curvatura causadas pela união das interfaces são progressivamente suavizadas pela ação da tensão interfacial, com a bolha se aproximando de seu formato final.

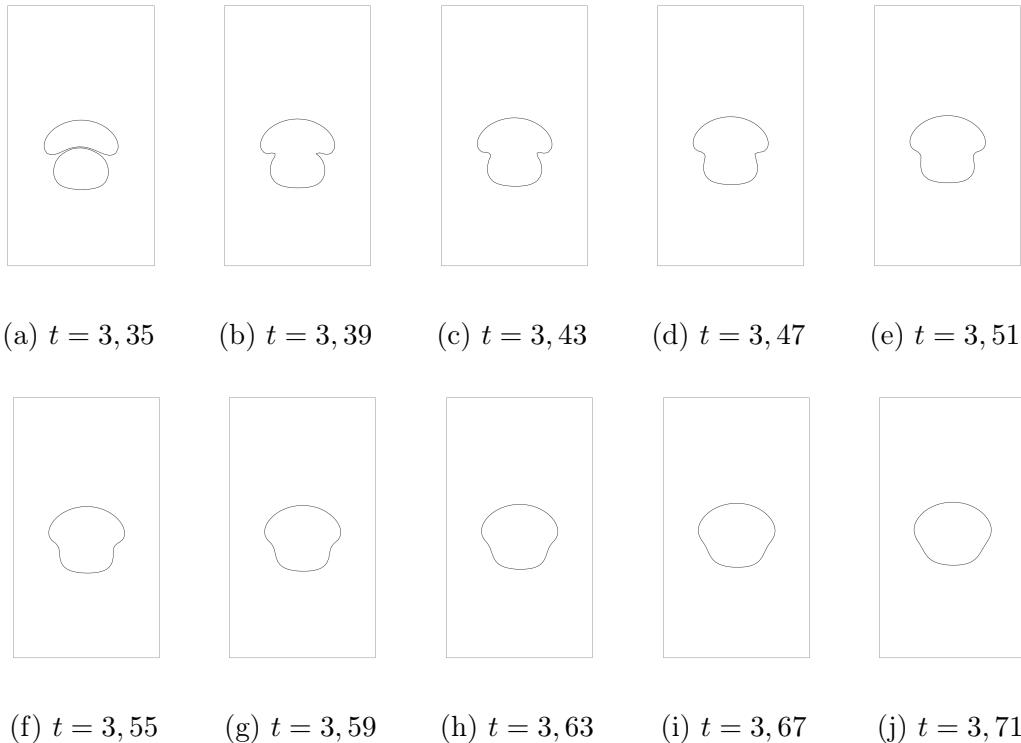
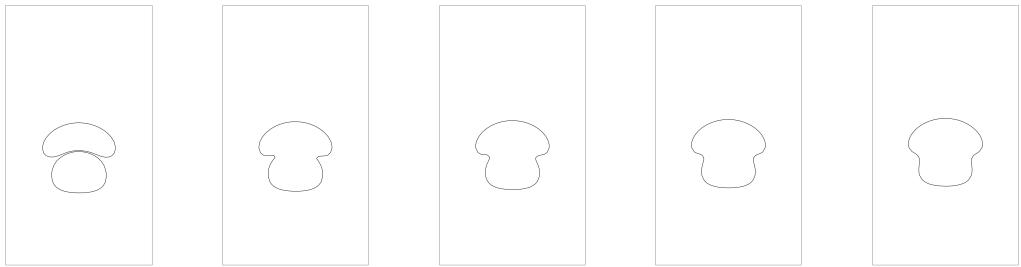
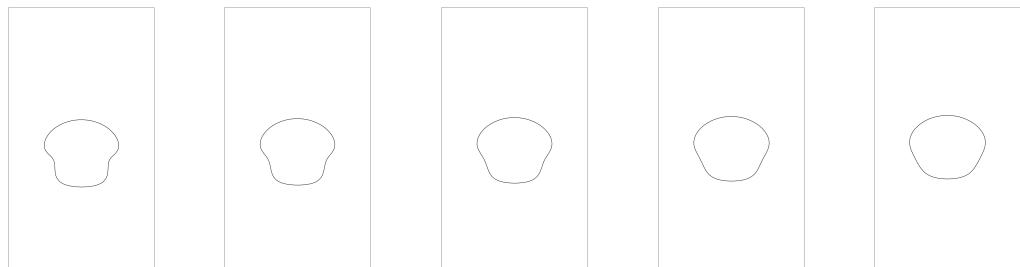


Figura 4.41: Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas com elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.



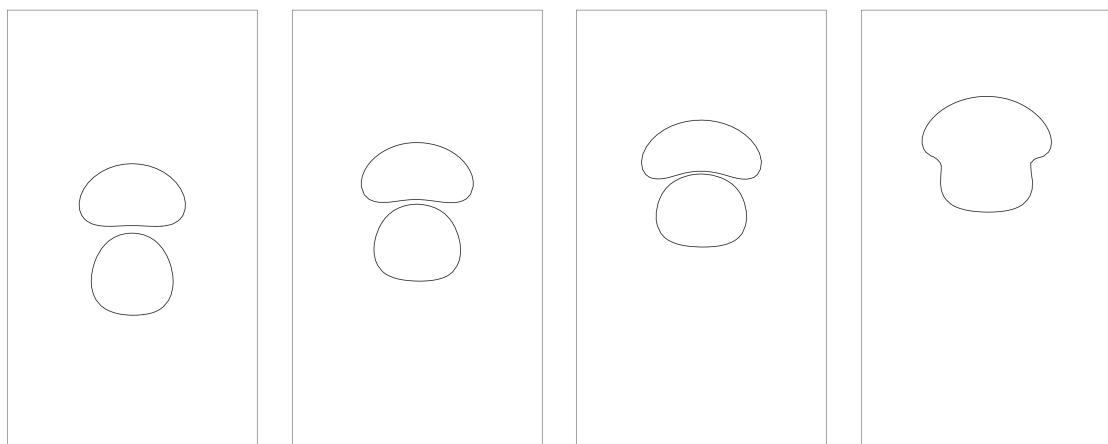
(a) $t = 3, 21$ (b) $t = 3, 25$ (c) $t = 3, 29$ (d) $t = 3, 33$ (e) $t = 3, 37$



(f) $t = 3, 41$ (g) $t = 3, 45$ (h) $t = 3, 49$ (i) $t = 3, 53$ (j) $t = 3, 57$

Figura 4.42: Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas com elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.

A validação da metodologia foi feita por meio da comparação entre os resultados das simulações, expostos nas Figuras 4.43 e 4.44, e os do experimento conduzido por MANASSEH *et al.* [3], expostos na Figura 4.45. Mais especificamente, foram comparadas as geometrias da interface nos instantes $t = 2,0$, $t = 2,5$, $t = 3,0$ e $t = 3,5$, sendo verificada uma grande compatibilidade entre as imagens de cada um dos casos.



(a) $t = 2,0$ (b) $t = 2,5$ (c) $t = 3,0$ (d) $t = 3,5$

Figura 4.43: Geometria da interface em determinados instantes da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.

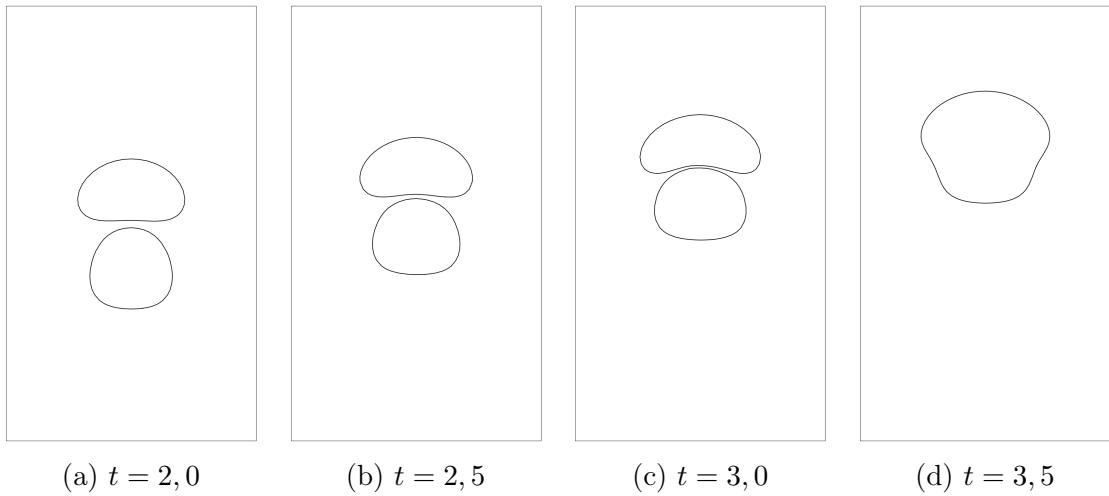


Figura 4.44: Geometria da interface em determinados instantes da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos quadráticos, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.

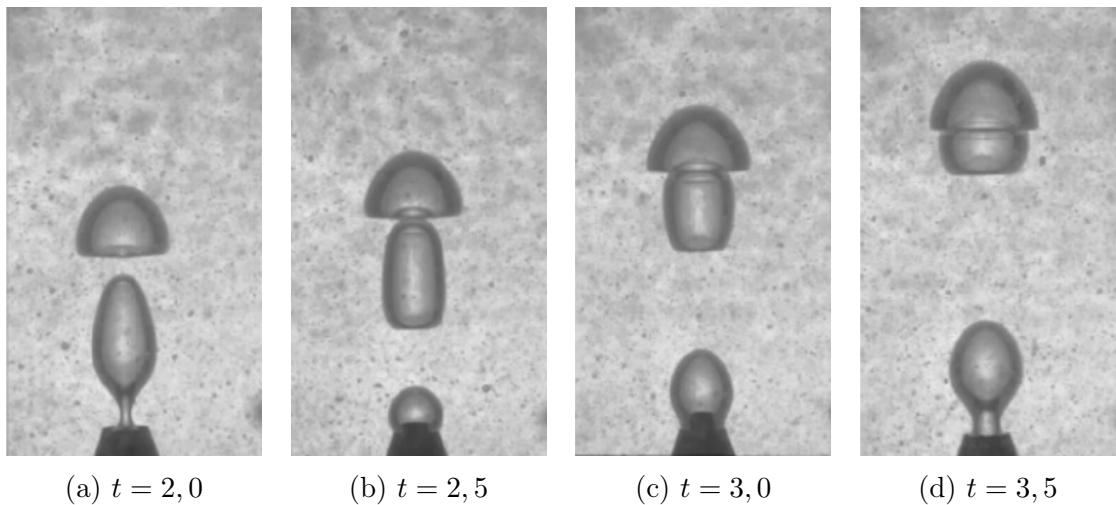


Figura 4.45: Geometria da interface em determinados instantes do experimento da coalescência de duas bolhas conduzido por MANASSEH *et al.* [3].

Vale ressaltar que a comparação entre os resultados possui algumas limitações, a destacar:

- o modelo bidimensional utilizado para a simulação, que considera a curvatura da interface em apenas uma direção para a computação da tensão interfacial, não permitindo uma perfeita equivalência com um experimento real e, portanto, tridimensional;
- a diferença na geometria inicial das bolhas, em especial a bolha inferior, cujo formato no momento de sua inserção no sistema bifásico já é levemente irregular;

- a introdução de uma terceira bolha no escoamento durante o experimento, que exerce alguma influência sobre os campos de velocidade e pressão e, por consequência, sobre as demais bolhas;
- a imperfeição inerente à captação das imagens em um experimento real, que não permite a visualização da posição exata das interfaces das bolhas nem o instante exato da ocorrência do fenômeno da coalescência.

Feitas essas ressalvas, pode-se considerar que a geometria similar da interface em cada um dos instantes das simulações e do experimento, bem como o instante similar de ocorrência do fenômeno da coalescência, são suficientes para validar a metodologia proposta que, embora com limitações, é capaz de representar com significativa concordância o experimento real.

A fim de avaliar mais profundamente a metodologia proposta, realizou-se ainda uma análise paramétrica, por meio da simulação do mesmo escoamento com diferentes números de Galileu e diferentes números de Eötvös. A Tabela 4.17 expõe as sete novas simulações que foram executadas, com os números adimensionais e a duração em cada um dos casos. Em todas elas, utilizou-se a malha de elementos mini descrita anteriormente.

Tabela 4.17: Números adimensionais e duração das novas simulações da coalescência de duas bolhas.

Duração				
$Ga^{1/2}$	Eo	Iterações	Total	Por Iteração
10	1	69000	404 h 31 min	21,11 s
10	10	46000	265 h 37 min	20,79 s
10	50	46000	266 h 10 min	20,83 s
10	100	46000	264 h 15 min	20,68 s
5	5	69000	409 h 20 min	21,36 s
50	5	69000	407 h 11 min	21,24 s
100	5	69000	406 h 42 min	21,22 s

Para as quatro primeiras simulações, manteve-se constante o número de Galileu, a fim de avaliar a influência do número de Eötvös sobre o fenômeno da coalescência. Para as três simulações seguintes, manteve-se o número de Eötvös constante para avaliar a influência do número de Galileu. As evoluções da geometria da interface das sete simulações estão expostas nas Figuras 4.46, 4.47, 4.48, 4.49, 4.50, 4.51 e 4.52.

Caso 1: $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 1$

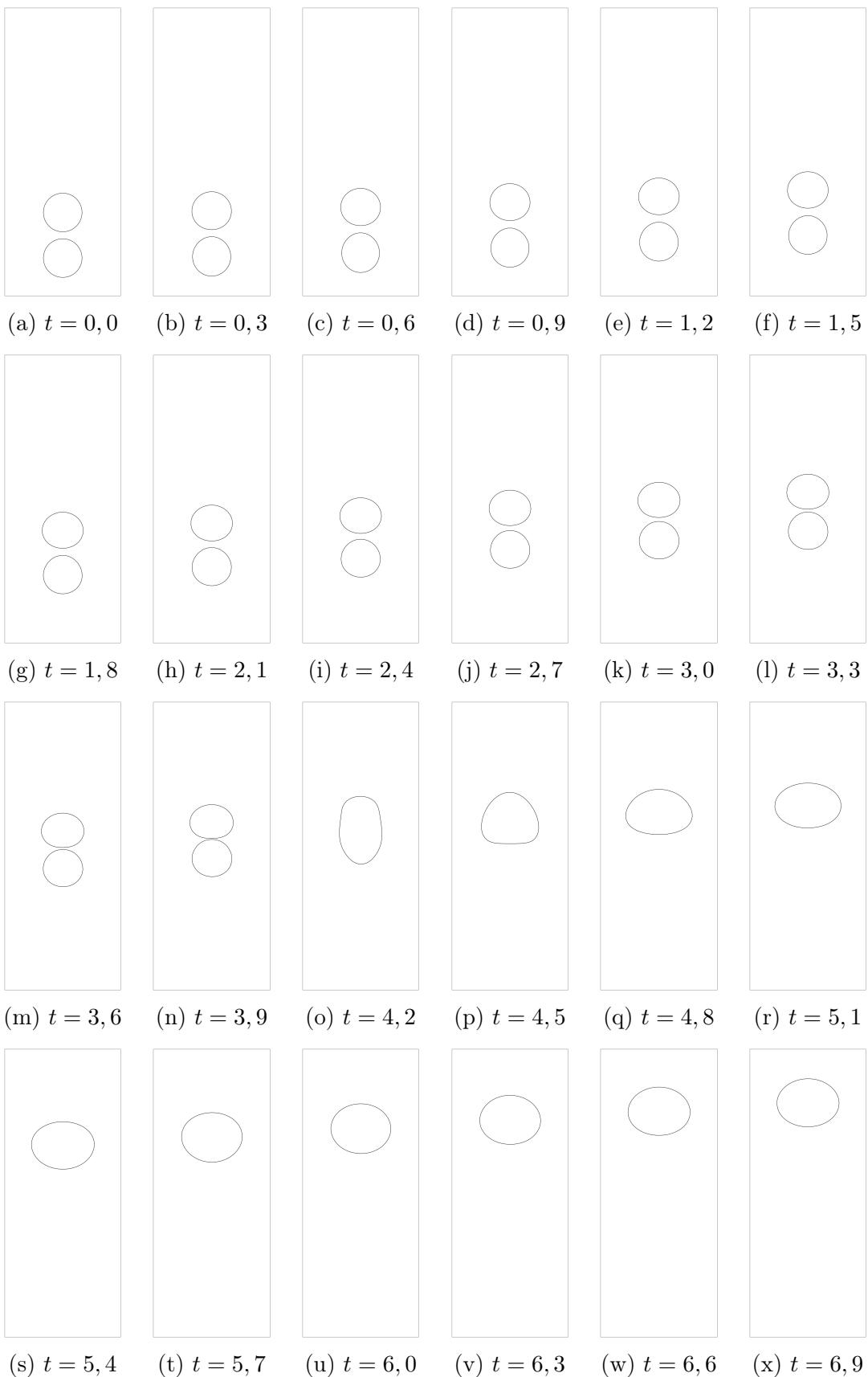


Figura 4.46: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 1$.

Caso 2: $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 10$

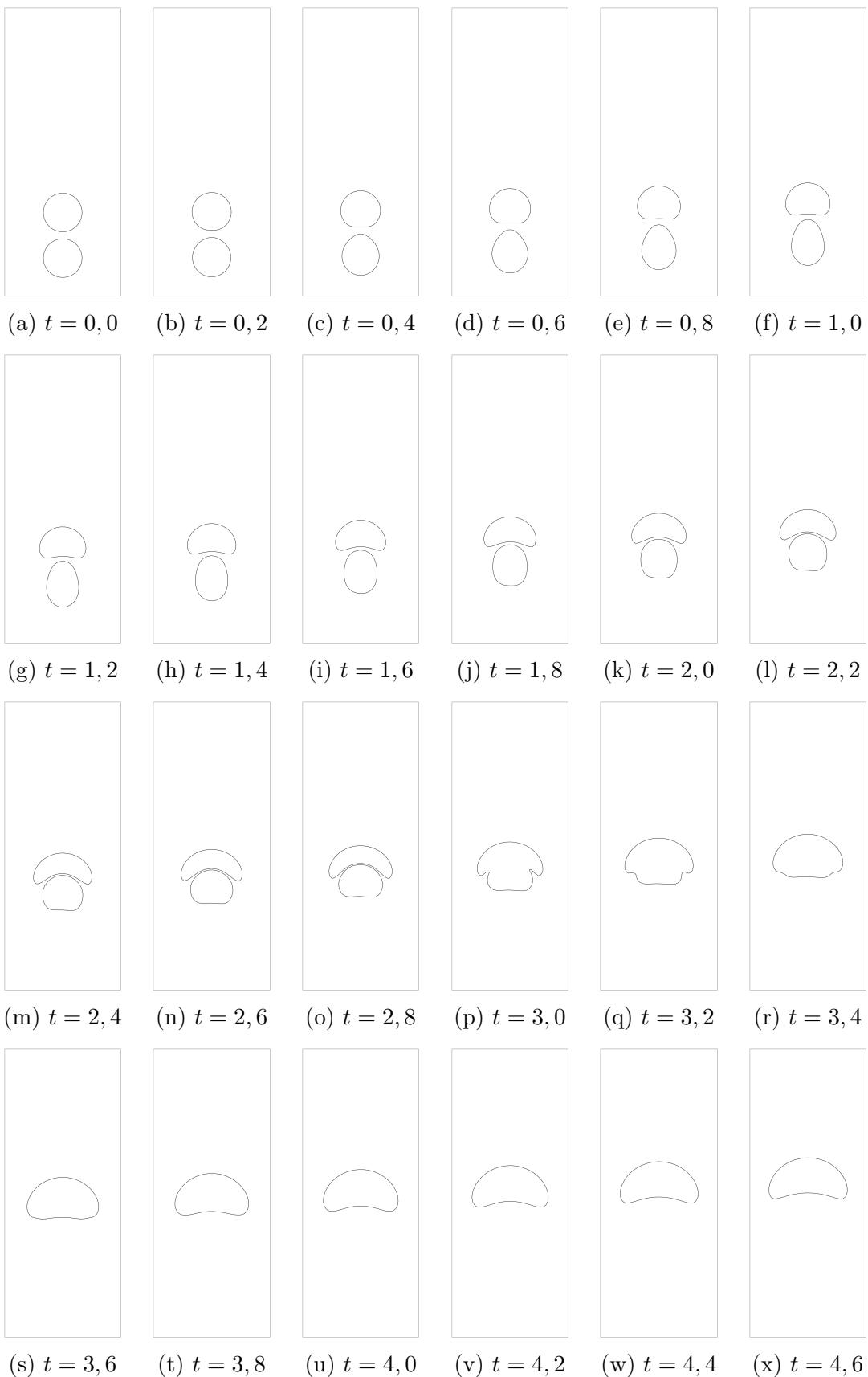


Figura 4.47: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 10$.

Caso 3: $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 50$

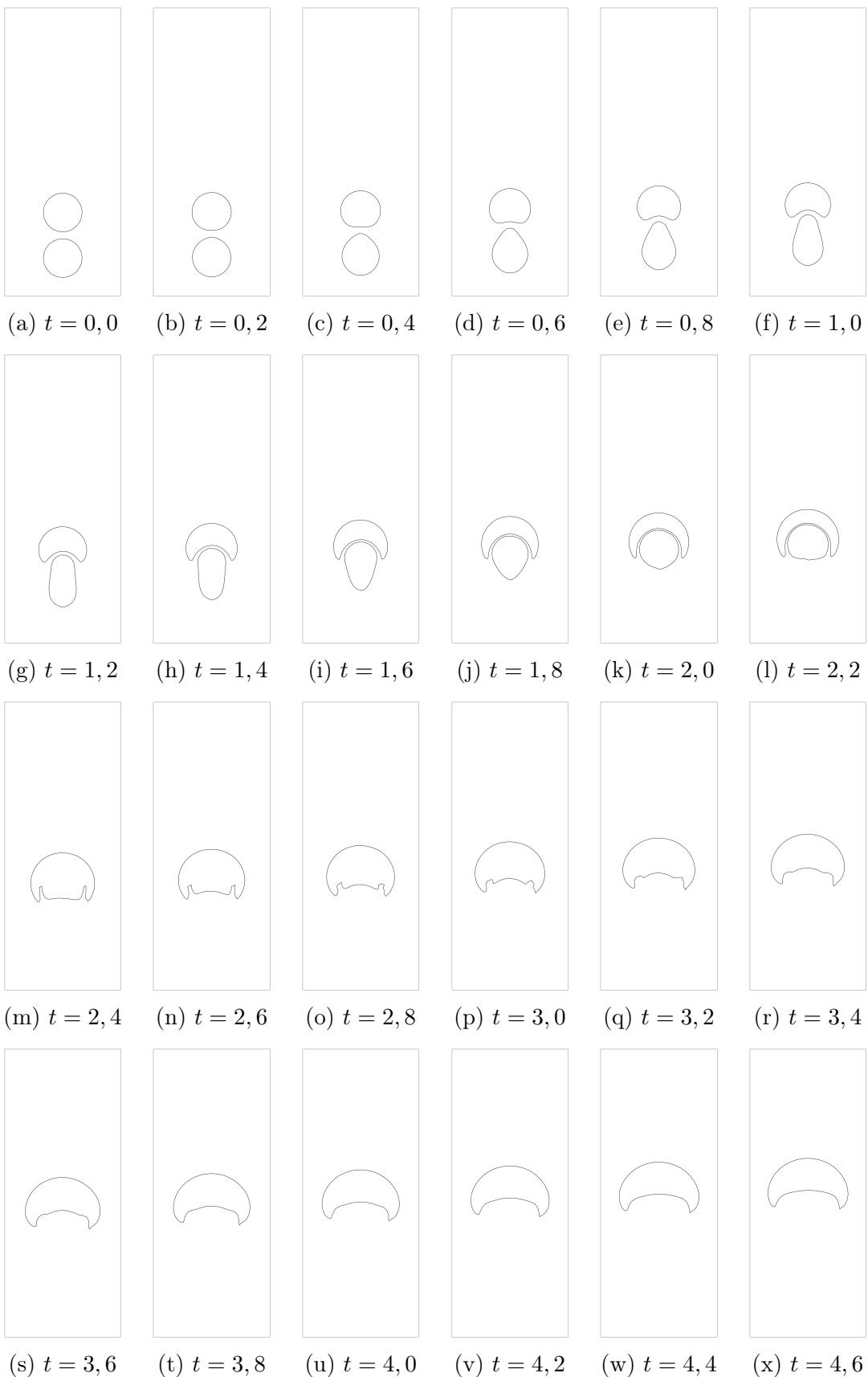


Figura 4.48: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 50$.

Caso 4: $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 100$

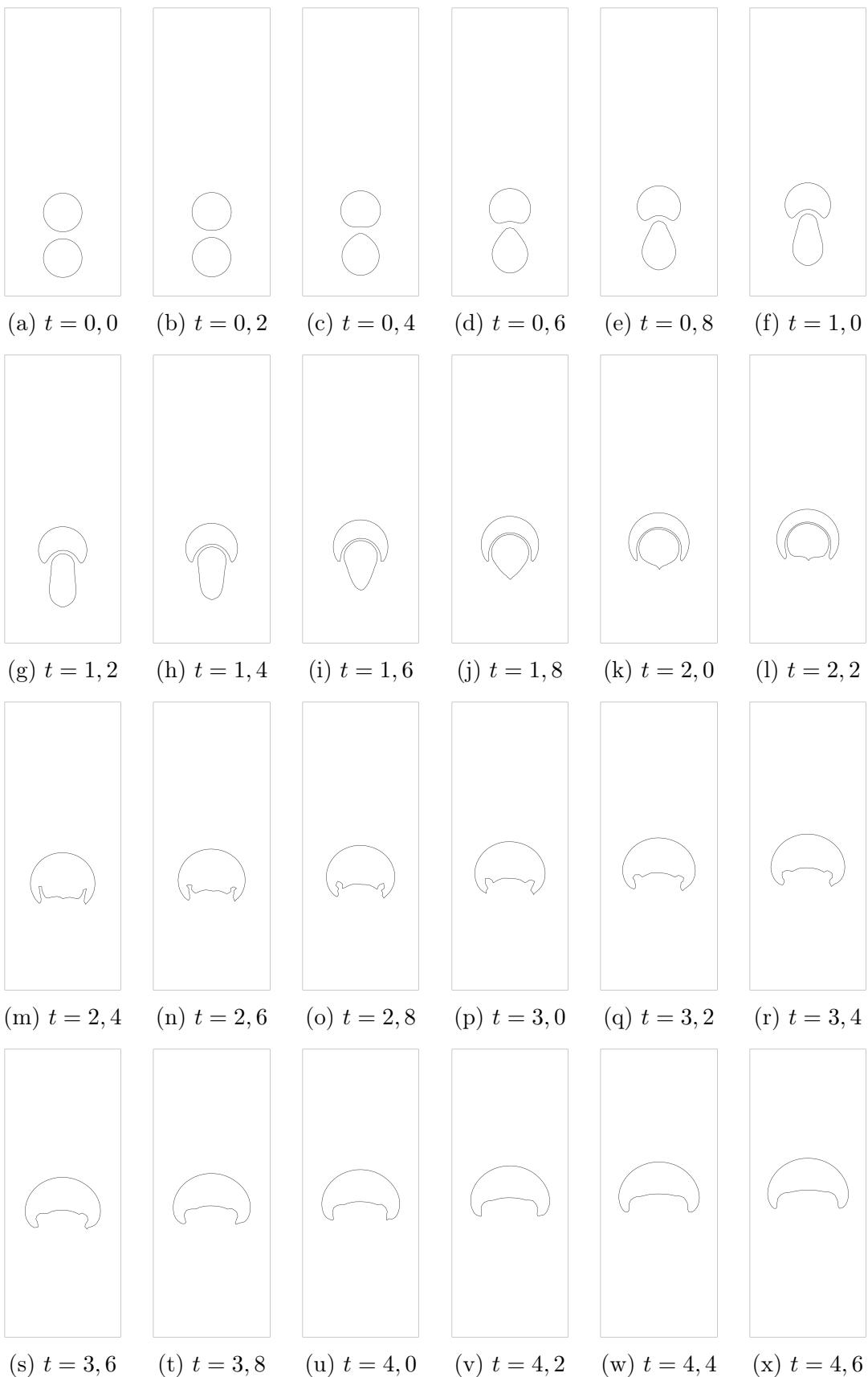


Figura 4.49: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 100$.

Caso 5: $Ga^{1/2} = 5$ e $Eo = 5$

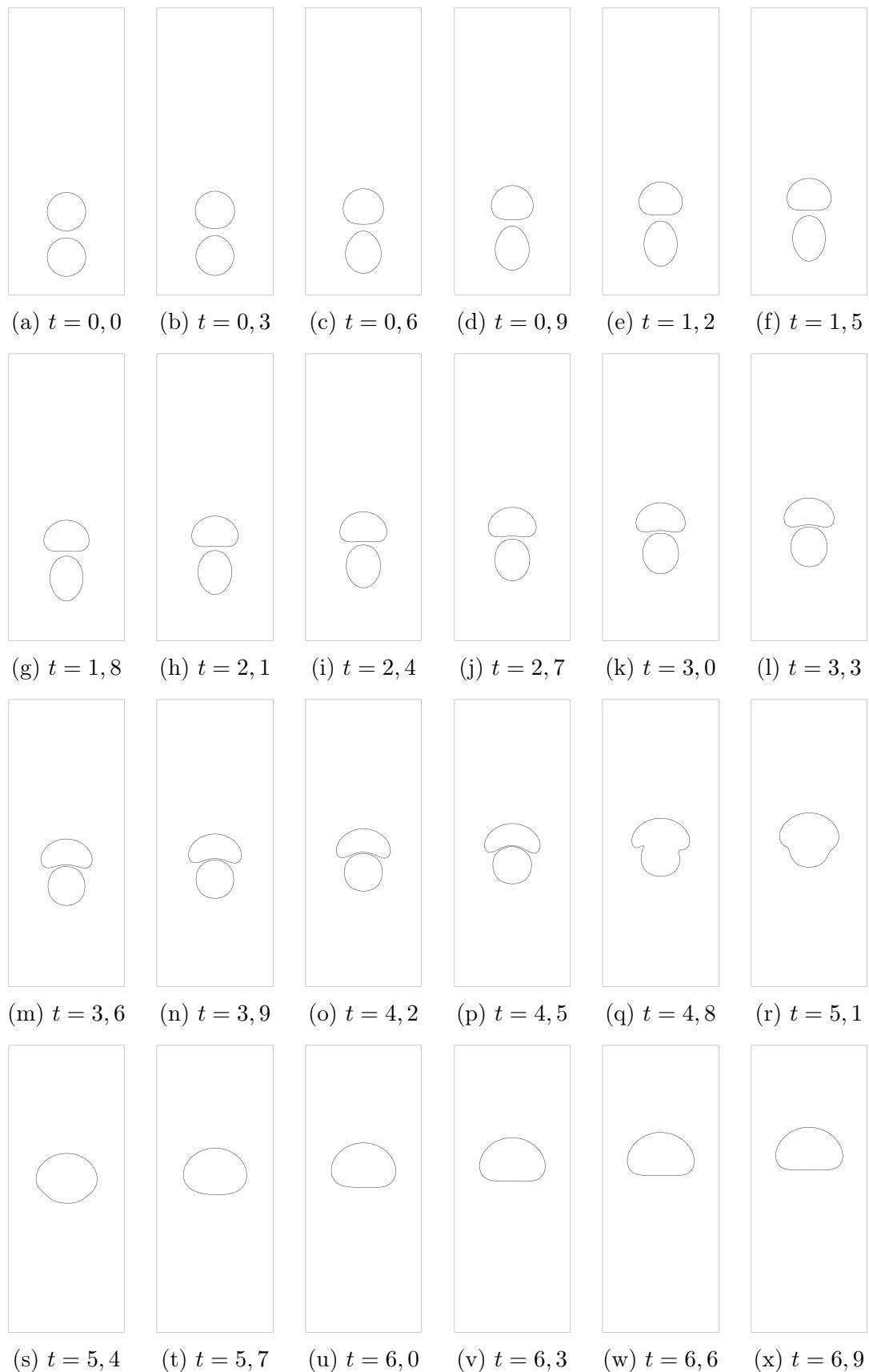


Figura 4.50: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 5$ e $Eo = 5$.

Caso 6: $Ga^{1/2} = 50$ e $Eo = 5$

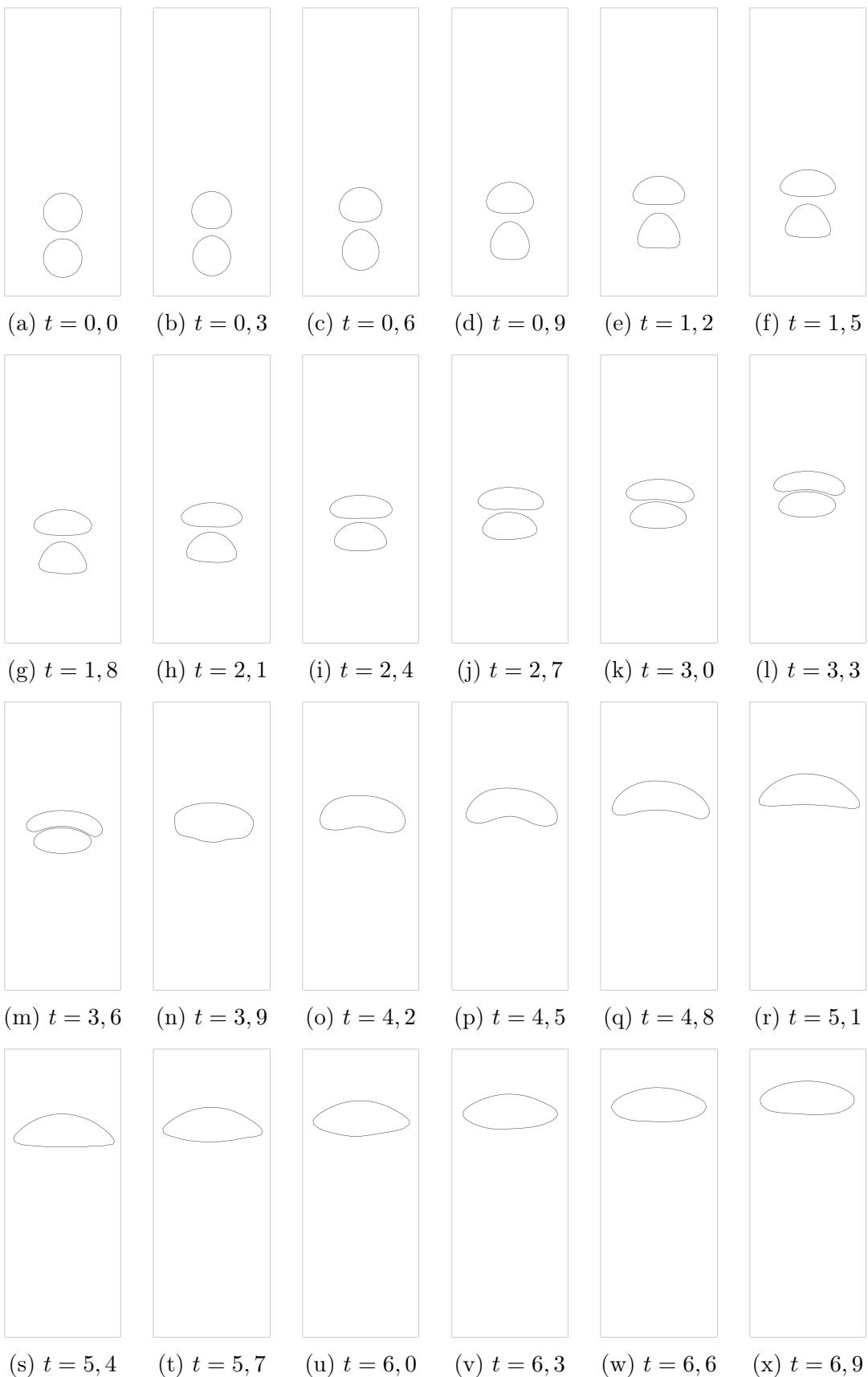


Figura 4.51: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 50$ e $Eo = 5$.

Caso 7: $Ga^{1/2} = 100$ e $Eo = 5$

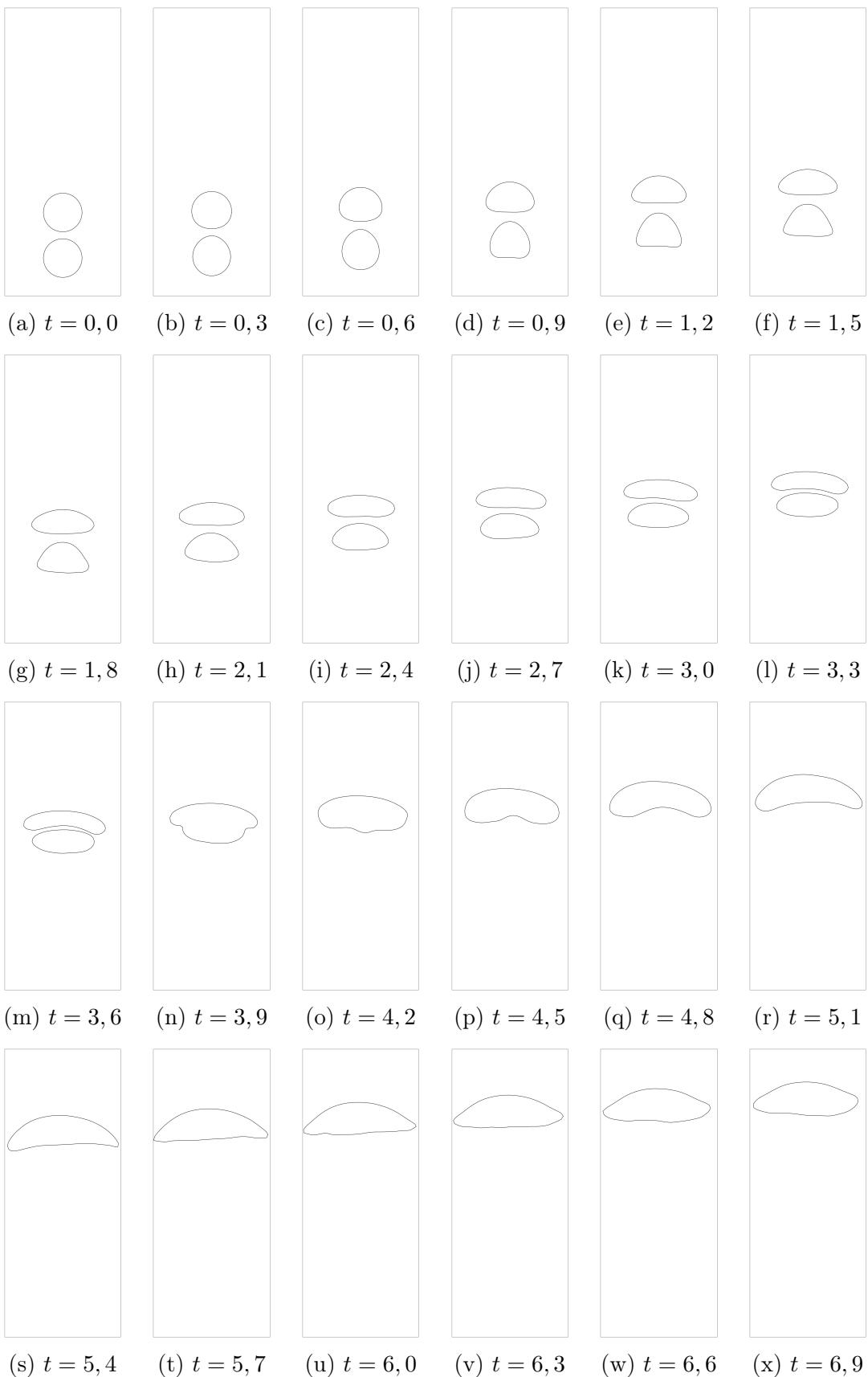


Figura 4.52: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas com a malha de elementos mini, $Ga^{1/2} = 100$ e $Eo = 5$.

Para avaliar a influência do número de Eötvös sobre o fenômeno da coalescência, registrou-se a geometria das bolhas no instante imediatamente anterior à ocorrência da coalescência para os escoamentos com o mesmo número de Galileu, como mostra a Figura 4.53. Nota-se que, para escoamentos com número de Eötvös mais baixos, a grande relevância da tensão interfacial mantém o formato das bolhas com elevada circularidade até o momento da coalescência. Com o aumento do número de Eötvös, a relevância da tensão interfacial diminui, e, consequentemente, as deformações nas interfaces tornam-se mais significativas.

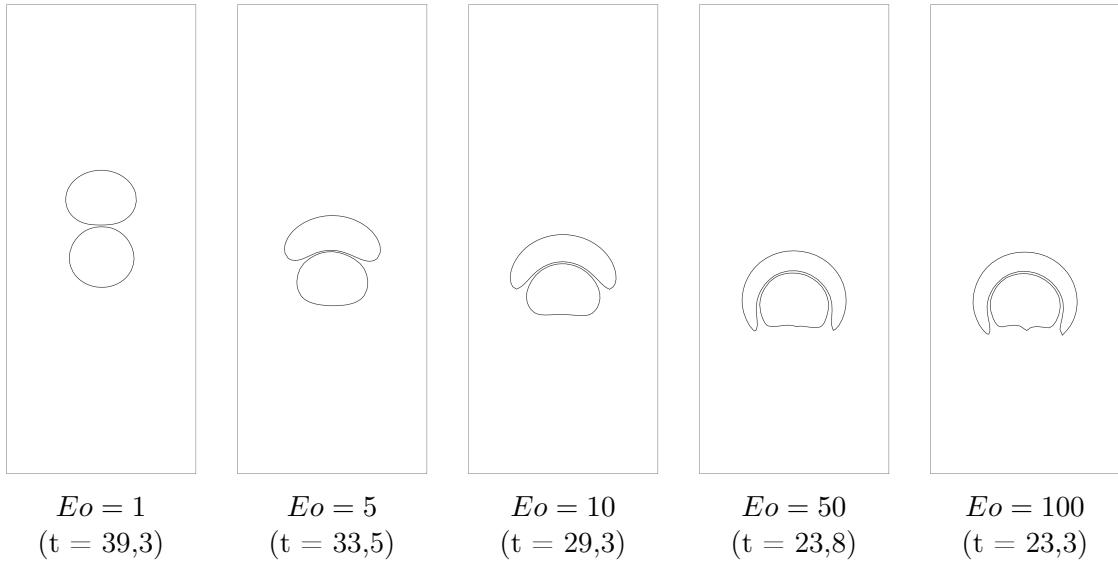


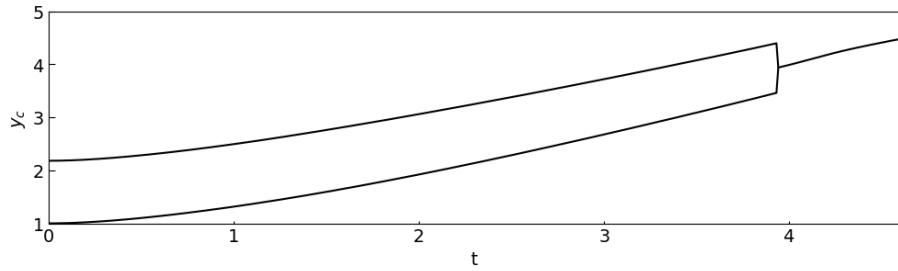
Figura 4.53: Geometria das bolhas no instante imediatamente anterior à coalescência, para as simulações com $Ga^{1/2} = 10$ e diferentes números de Eötvös.

Observa-se, ainda, uma tendência de englobamento da bolha inferior pela bolha superior com o aumento do número de Eötvös. A formação de uma região de baixa pressão na traseira da bolha superior leva a uma subida mais rápida da bolha inferior, até que se forma um fino filme do fluido externo entre suas interfaces. Para os casos com reduzido número de Eötvös, a geometria das interfaces pouco se altera, devido à elevada tensão interfacial, e esse filme diminui com o passar das iterações até atingir um valor mínimo que, na metodologia proposta, dá início ao fenômeno da coalescência. Para os casos com número de Eötvös mais elevado, as interfaces se tornam mais maleáveis, e grandes deformações são observadas, devido à interferência mútua entre as bolhas mediante o campo de pressão do fluido externo. Ocorre, dessa forma, um achatamento da bolha inferior, que se torna verticalmente alongada, devido a sua movimentação para a região de baixa pressão na traseira da bolha superior. A bolha inferior, quando se aproxima, modifica o campo de pressão do fluido externo, impulsionando a bolha superior para as laterais do canal. Esta,

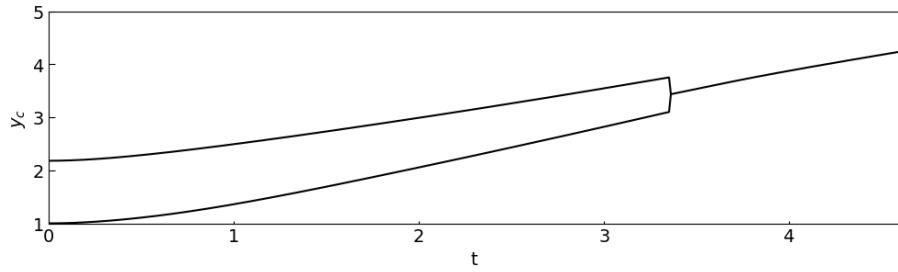
por sua vez, é atraída para a região de baixa pressão na traseira da bolha inferior, caracterizando o fenômeno do englobamento.

Em uma nova forma de visualização do escoamento, dada pela Figura 4.54, mostra-se a evolução da posição vertical do centroide das bolhas, y_c , com o passar do tempo. Em $t = 0$, portanto, o gráfico apresenta duas curvas, que crescem e se aproximam com o passar das iterações, até que se unem em uma única curva no instante da coalescência, seguindo juntas a partir de então.

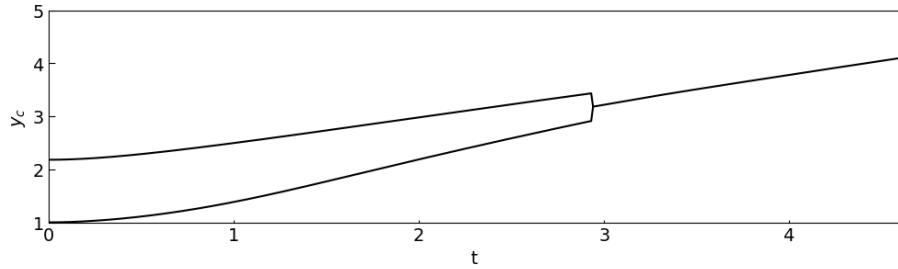
Algumas relevantes informações podem ser extraídas dessa visualização. Em primeiro lugar, verifica-se que o instante de ocorrência da coalescência decresce com o aumento do número de Eötvös, que torna as interfaces mais maleáveis, favorecendo a sua aproximação. Nota-se, ainda, com maiores números de Eötvös, uma mais intensa atração da bolha inferior para a zona de baixa pressão formada na traseira da bolha superior. Para os escoamentos com número de Eötvös mais baixos, observa-se uma aceleração praticamente constante da curva inferior, em sua maior parte devido à diferença de densidade com o fluido externo. Para os números de Eötvös mais elevados, por sua vez, observa-se um acentuado movimento de aceleração da bolha inferior, quando esta se movimenta com direção à zona de baixa pressão, seguida por uma desaceleração, quando as bolhas se encontram suficientemente próximas. Por fim, pode-se visualizar também a maior intensidade do fenômeno de englobamento da bolha inferior pela bolha superior com o crescimento do número de Eötvös, expressa pela menor distância vertical entre as curvas nos instantes anteriores à coalescência.



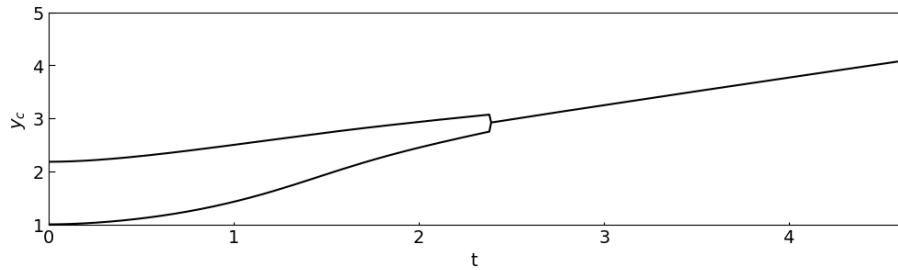
(a) $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 1$.



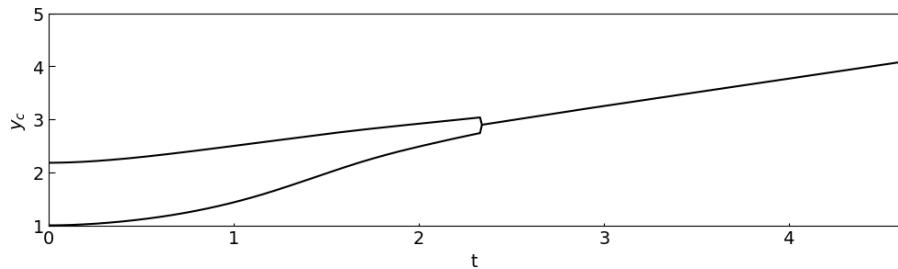
(b) $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.



(c) $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 10$.



(d) $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 50$.



(e) $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 100$.

Figura 4.54: Evolução da posição vertical do centroide das bolhas ao longo das simulações da coalescência de duas bolhas com $Ga^{1/2} = 10$ e diferentes números de Eötvös.

Para avaliar a influência do número de Galileu sobre o fenômeno da coalescência, analogamente, registrou-se a geometria das bolhas no instante imediatamente anterior à ocorrência da coalescência para os escoamentos com o mesmo número de Eötvös, como mostra a Figura 4.55.

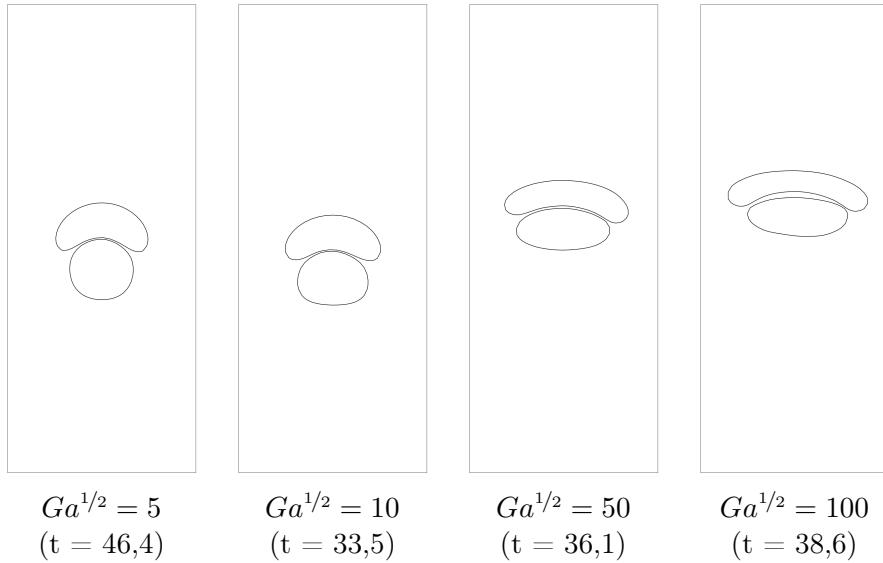
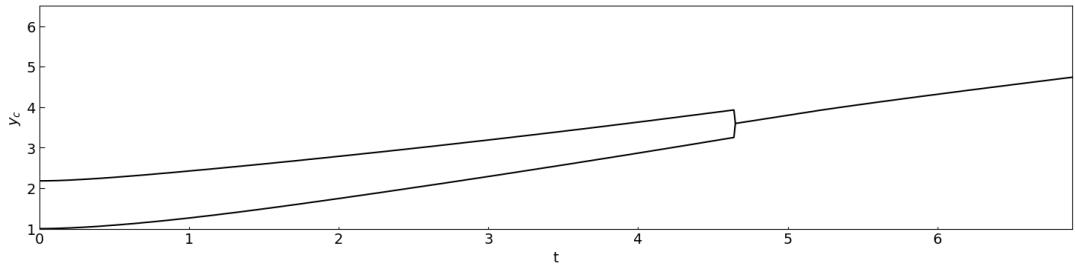


Figura 4.55: Geometria das bolhas no instante imediatamente anterior à coalescência, para as simulações com $Eo = 5$ e diferentes números de Galileu.

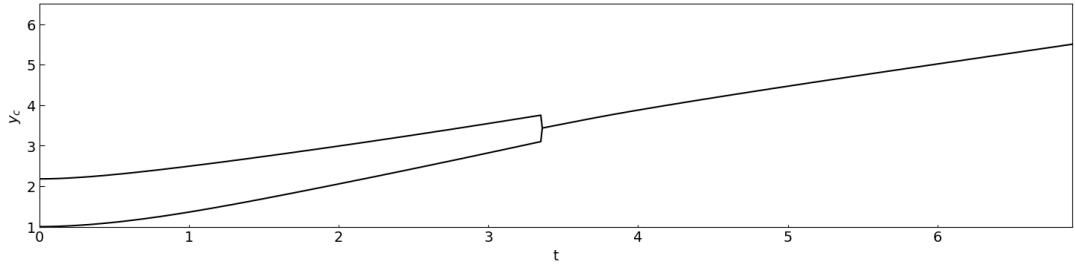
Com um procedimento análogo, gerou-se também a visualização da evolução da posição vertical do centroide das bolhas, y_c , com o passar do tempo, dada pela Figura 4.56.

Analizando esses resultados, entretanto, observa-se que a influência do número de Galileu é maior sobre o escoamento de forma geral do que sobre as particularidades do fenômeno da coalescência. Para os números de Galileu mais baixos, a subida das bolhas é mais lenta e, assim, as bolhas – principalmente a inferior – pouco se distanciam de seu formato original anteriormente à coalescência. Para os números de Galileu mais elevados, as bolhas se achatam devido à alta velocidade do escoamento, dando início ao fenômeno da coalescência com condições bastante distintas.

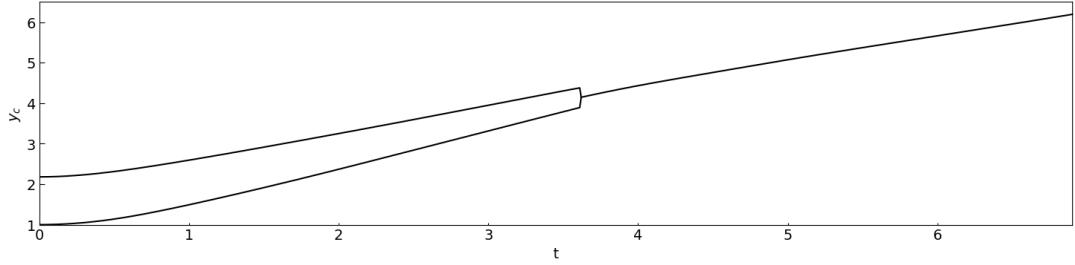
Com respeito ao instante de ocorrência da coalescência, percebe-se que dois principais fatores exercem influência sobre ele. Para números de Galileu mais baixos, as bolhas sobem com velocidades inferiores e, portanto, a coalescência demora mais para ocorrer. Para números de Galileu mais altos, por sua vez, a elevada velocidade do escoamento torna as bolhas achatadas horizontalmente, criando uma condição geométrica que dificulta a sua aproximação relativa, que retarda o fenômeno da coalescência. Neste caso, portanto, com a metodologia implementada, a ocorrência da coalescência é anterior em escoamentos com número de Galileu intermediários.



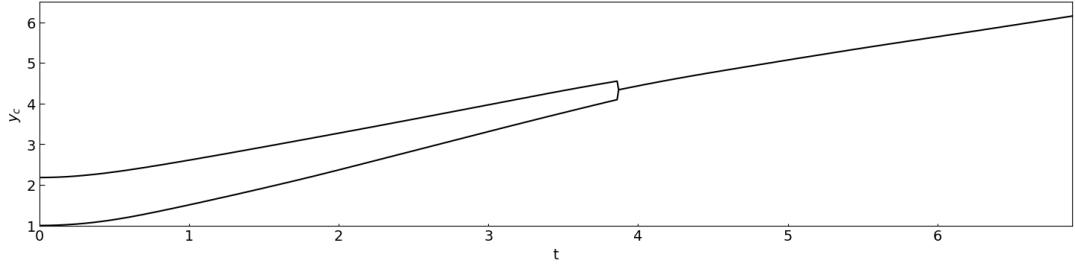
(a) $Ga^{1/2} = 5$ e $Eo = 5$.



(b) $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$.



(c) $Ga^{1/2} = 50$ e $Eo = 5$.



(d) $Ga^{1/2} = 100$ e $Eo = 5$.

Figura 4.56: Evolução da posição vertical do centroide das bolhas ao longo das simulações da coalescência de duas bolhas com $Eo = 5$ e diferentes números de Galileu.

Conclui-se, portanto, que a metodologia proposta neste trabalho é capaz de contemplar mudanças topológicas – neste caso, a coalescência de bolhas – para escoamentos com os mais diversos números adimensionais.

Vale ressaltar, mais uma vez, que a metodologia proposta para o fenômeno da coalescência é um modelo puramente geométrico, que não comprehende a complexa física do problema. Para tal, deveriam ser modelados o escoamento do fluido externo

no fino filme entre as bolhas nos instantes anteriores à coalescência e, muito possivelmente, os efeitos moleculares presentes nessa região. Ainda assim, verificou-se que o modelo foi suficientemente acurado para simular um escoamento de referência, cujos resultados foram comparados com um experimento real.

Além disso, o estudo paramétrico realizado leva a conclusões fisicamente verossímeis, principalmente a respeito da geometria das bolhas e do instante de ocorrência da coalescência. Isso se deve ao fato de que, apesar da coalescência ser arbitrária e artificialmente imposta sobre as bolhas no modelo proposto, o comportamento do escoamento antes e depois da coalescência é fisicamente embasado, podendo também proporcionar importantes conclusões a respeito desse fenômeno.

4.2.6 Coalescência de Duas Bolhas de Taylor

Similarmente ao exposto na subseção anterior, realizou-se também uma simulação da coalescência de duas bolhas alongadas, conhecidas como bolhas de Taylor. Os fenômenos envolvidos neste escoamento são bastante similares aos da simulação anterior, porém, neste caso, tem-se um complicador adicional, que é o efeito das paredes sobre a dinâmica das bolhas.

Novamente, a simulação consiste no escoamento de duas bolhas em ascensão, sob ação da gravidade. Todavia, o diâmetro equivalente de cada uma das bolhas – isto é, o diâmetro do círculo de mesma área – é superior à largura do canal, o que torna o formato das bolhas alongado. A geometria do escoamento está exposta na Figura 4.57 e corresponde a duas bolhas elípticas com semieixo horizontal de 0,48 e semieixo vertical de 0,88, que as tornam equivalentes a uma bolha circular de diâmetro 30% superior à largura $L = 1$ do canal. O canal possui altura igual a 10, e as bolhas estão inicialmente separadas por uma distância igual a 0,25. Mais uma vez, foram impostas uma condição de contorno de não deslizamento na fronteira inferior do domínio, condições de simetria nas fronteiras esquerda e direita e uma condição de pressão prescrita nula na fronteira superior.

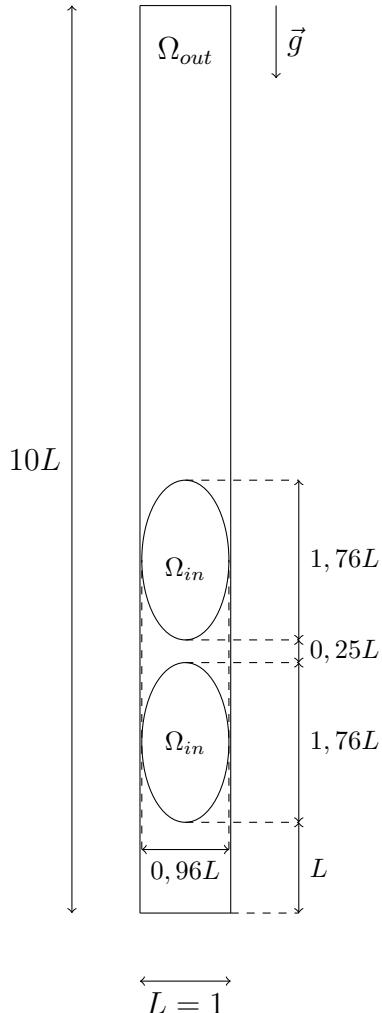


Figura 4.57: Geometria inicial do escoamento com a coalescência de duas bolhas de Taylor.

O escoamento foi simulado com os parâmetros $Ga^{1/2} = 10$ e $Eo = 5$ e, para os fluidos, baseando-se em um sistema ar-água, foram consideradas as seguintes propriedades: $\rho_{in} = 1,145$ e $\mu_{in} = 1,79 \times 10^{-5}$ para o fluido interno, e $\rho_{out} = 997$ e $\mu_{out} = 89 \times 10^{-5}$ para o fluido externo. Foram utilizadas duas malhas triangulares: uma malha com 18952 elementos mini e 28723 nós; e uma malha com 18952 elementos quadráticos e 38493 nós. Para a representação das bolhas, definiram-se inicialmente malhas com 115 pontos, a fim de compatibilizar o seu refinamento com o da malha fixa. Por fim, definiu-se uma razão de espessura da região da interface igual a 1.

O escoamento foi simulado por 9000 iterações, com passo temporal $\Delta t = 0,0025$. A duração de cada simulação está exposta na Tabela 4.18, na qual, mais uma vez, percebe-se relevante influência do tipo de elemento utilizado.

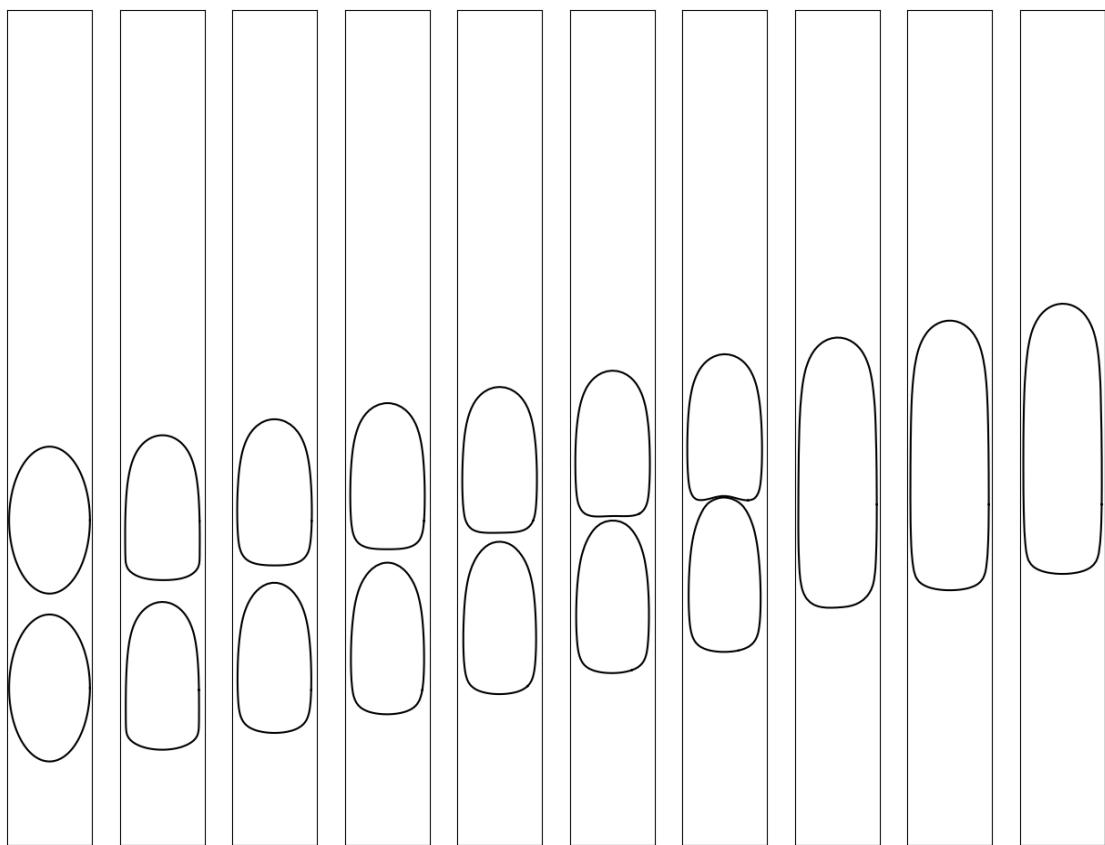
Tabela 4.18: Duração das simulações da coalescência de duas bolhas de Taylor.

Elemento	Duração	
	Total	Por Iteração
Mini	18 h 18 min	7,32 s
Quadrático	50 h 42 min	20,28 s

A Figura 4.58 expõe a geometria da interface da bolha em diferentes instantes da simulação efetuada com a malha de elementos mini. Percebe-se em primeiro lugar a deformação das bolhas, inicialmente no imposto formato elíptico, para atingir sua forma de equilíbrio, típica de uma bolha de Taylor. Em seguida, as bolhas se aproximam, devido à formação de uma zona de baixa pressão abaixo da bolha superior, que faz com que a bolha inferior suba com uma velocidade maior. A aproximação ocorre de maneira gradativa, até que, quando a distância entre as interfaces atinge o valor mínimo estipulado na metodologia, ocorre o fenômeno da coalescência. A partir de então, as interfaces se unem, formando uma única bolha, inicialmente com formato irregular, mas que logo atinge o formato característico de uma bolha de Taylor.

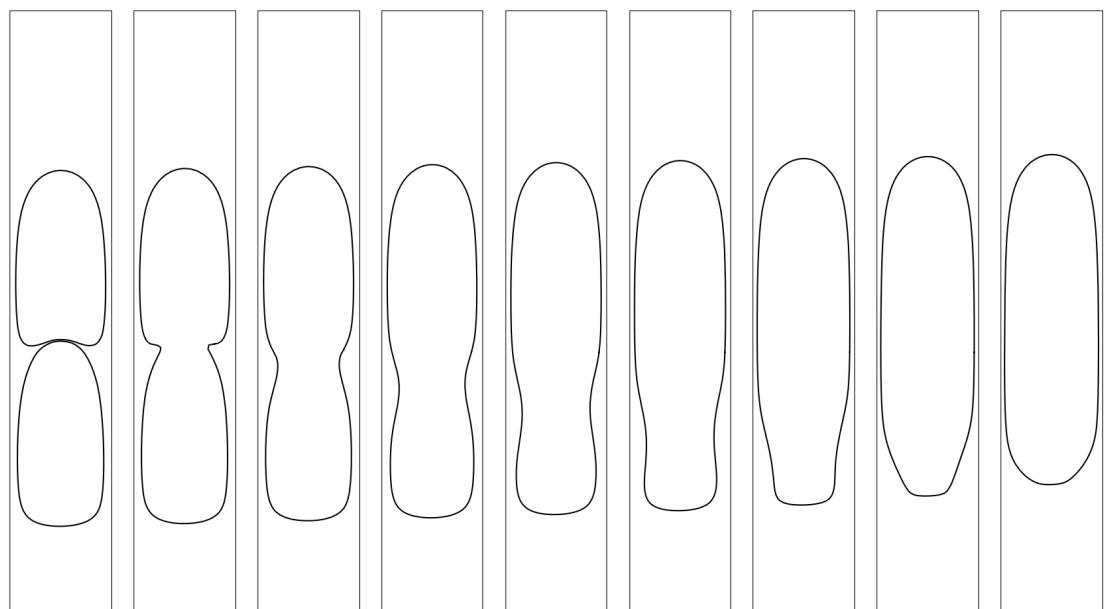
A Figura 4.59 apresenta a geometria da interface em um recorte da supracitada simulação, nos instantes próximos à ocorrência da coalescência, a fim de apresentar em maior detalhe a forma como esta é descrita na metodologia proposta. Nessa figura, percebe-se que a união das interfaces leva à formação de uma onda, que se propaga em direção à parte inferior da bolha. Ao longo de sua propagação, a onda é amortecida, até que a bolha atinge seu formato final.

De forma análoga, as Figuras 4.60 e 4.61 mostram, respectivamente, a geometria da interface ao longo de toda a simulação com a malha de elementos quadráticos e em um recorte focado nos instantes próximos ao fenômeno da coalescência. O comportamento observado em ambas as simulações é bastante similar.



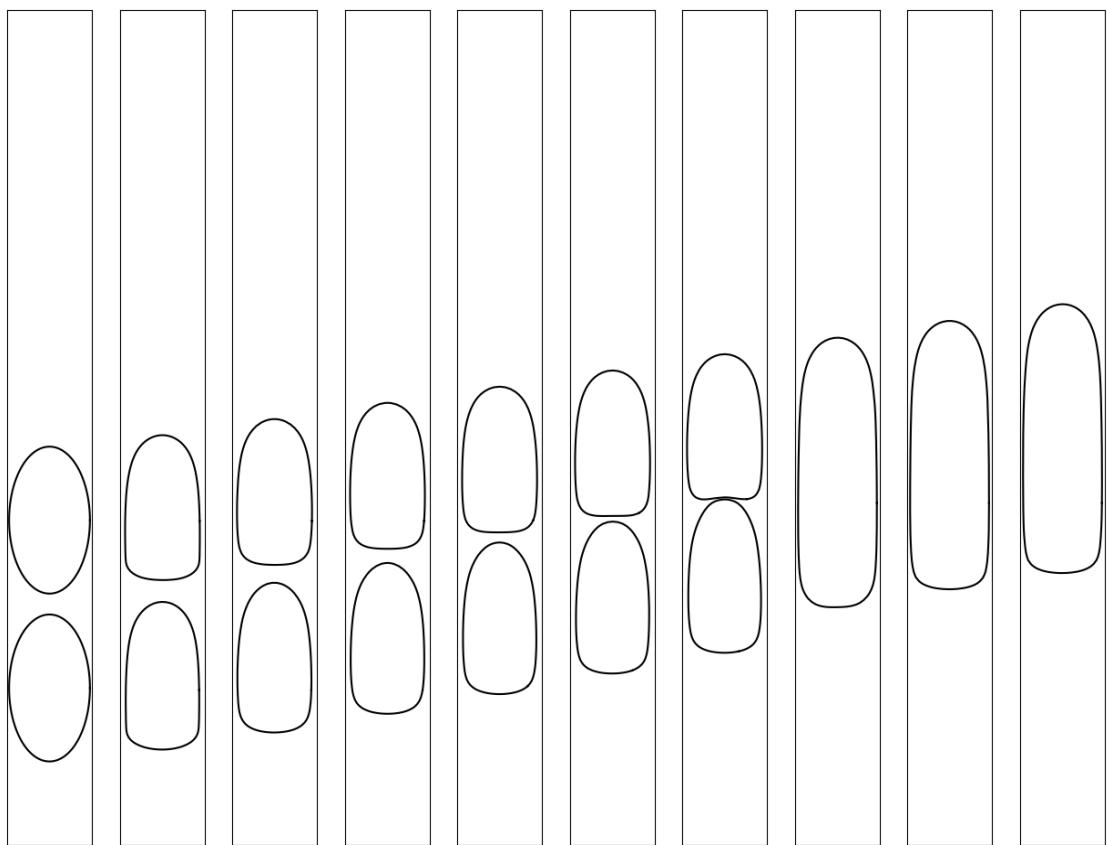
(a) 0,0 (b) 2,5 (c) 5,0 (d) 7,5 (e) 10,0 (f) 12,5 (g) 15,0 (h) 17,5 (i) 20,0 (j) 22,5

Figura 4.58: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos mini.



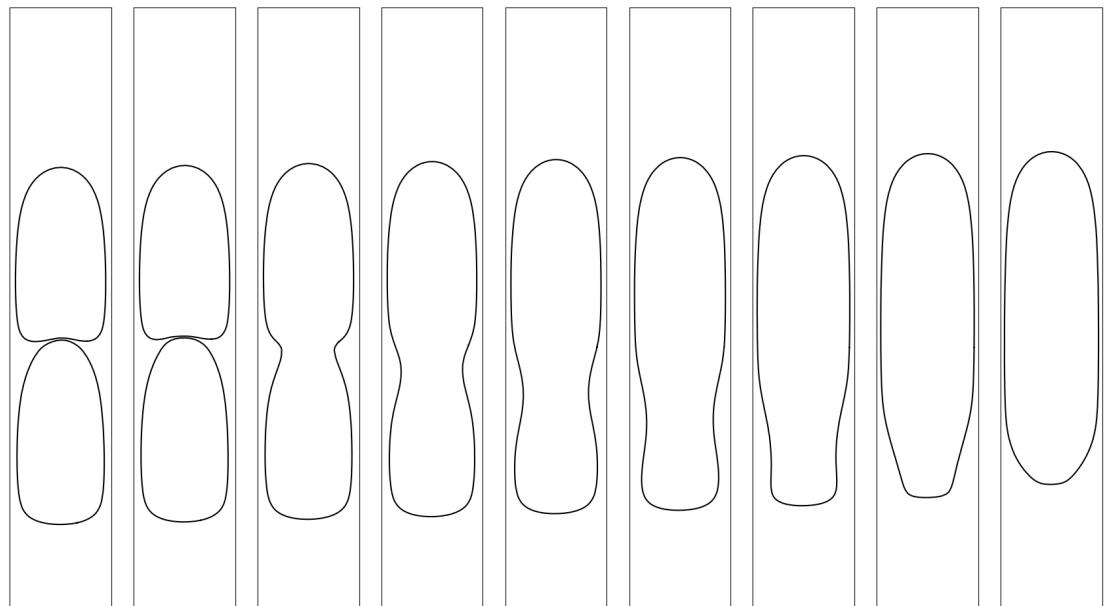
(a) 15,25 (b) 15,50 (c) 15,75 (d) 16,00 (e) 16,25 (f) 16,50 (g) 16,75 (h) 17,00 (i) 17,25

Figura 4.59: Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos mini.



(a) 0,0 (b) 2,5 (c) 5,0 (d) 7,5 (e) 10,0 (f) 12,5 (g) 15,0 (h) 17,5 (i) 20,0 (j) 22,5

Figura 4.60: Evolução da geometria da interface ao longo da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos quadráticos.



(a) 15,25 (b) 15,50 (c) 15,75 (d) 16,00 (e) 16,25 (f) 16,50 (g) 16,75 (h) 17,00 (i) 17,25

Figura 4.61: Evolução da geometria da interface em um recorte da simulação da coalescência de duas bolhas de Taylor com a malha de elementos quadráticos.

A fim de comparar os resultados obtidos com as duas malhas, gerou-se a visualização da evolução da posição vertical do centroide das bolhas, y_c , com o passar do tempo, exposta na Figura 4.62. A principal diferença observada consiste no instante de ocorrência da coalescência, que é posterior com a malha de elementos quadráticos, possivelmente por uma modelagem mais adequada do filme entre as interfaces, que resiste à compressão exercida por ambas as bolhas, retardando a sua aproximação.

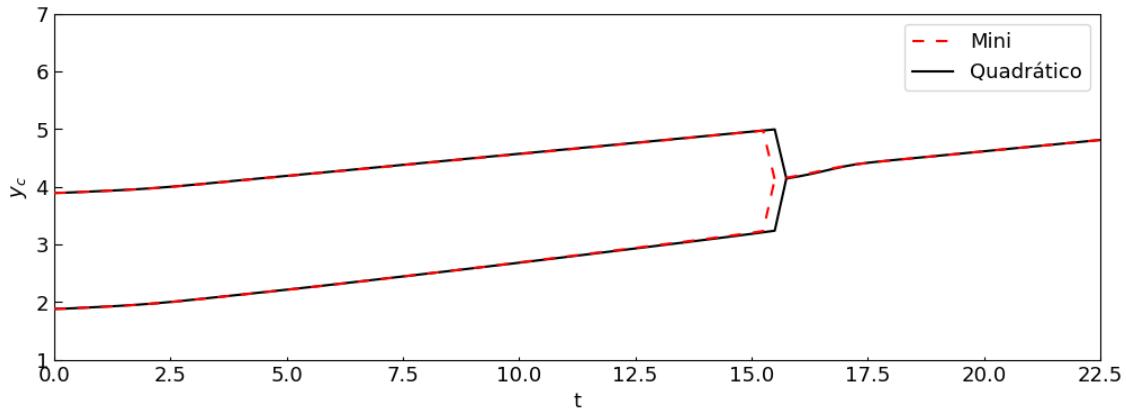


Figura 4.62: Evolução da posição vertical do centroide das bolhas ao longo das simulações da coalescência de duas bolhas de Taylor.

Mesmo com condições ainda mais críticas, que envolvem os efeitos da parede sobre a dinâmica das bolhas, observa-se que a metodologia proposta foi capaz de descrever de forma factível tanto o escoamento como o fenômeno da coalescência, confirmando os comportamentos esperados com base na física do problema.

Capítulo 5

Conclusão

Nesta dissertação, propôs-se uma metodologia para o estudo de escoamentos bifásicos utilizando simulação numérica direta, com base nas equações de Navier-Stokes bidimensionais incompressíveis, no Método dos Elementos Finitos, no método semi-Lagrangeano e em uma estratégia de acompanhamento da interface. Diversos escoamentos foram simulados com o intuito de se validar a metodologia proposta, e cada um desses contribuiu com algumas conclusões a respeito de seu desempenho.

Primeiramente, foram simulados o escoamento entre placas planas e o escoamento em uma cavidade, que, embora monofásicos, permitiram validar a aplicação conjunta e verificar a implementação computacional de uma relevante parcela da metodologia, tais como as equações governantes, o Método dos Elementos Finitos e o método semi-Lagrangeano. Para o escoamento em uma cavidade, notou-se ainda que a incondicional estabilidade do método semi-Lagrangeano – que, como visto ao longo do Capítulo 2, levou a sua rápida propagação e predomínio no ramo da meteorologia – tem como contrapartida uma relevante difusão numérica, que ocorre principalmente em simulações com elevados números de Reynolds. Tal característica, apesar de negativa, pode ser mitigada com o uso do elemento quadrático – ou, ainda, com a implementação e o uso de elementos de mais alta ordem – e com o refinamento das simulações tanto no espaço como no tempo, não sendo um empecilho para o acurado desempenho da metodologia observado ao longo dos demais casos de validação.

Em seguida, simulou-se o caso da bolha estática, cuja simplificação das equações governantes permite uma validação direta do acoplamento entre o campo de pressão e a tensão interfacial na metodologia proposta. A simulação da gota oscilante, por sua vez, possibilitou avaliar dinamicamente a interface em um movimento de oscilador harmônico, cuja componente elástica era proporcionada pela tensão interfacial e cujo amortecimento era causado pela viscosidade, novamente obtendo sucesso na comparação com resultados analíticos. Ademais, um estudo paramétrico realizado nesse caso levou à conclusão de que a escolha da espessura da região da interface

constitui um *trade-off* entre a acurácia – para pequenas espessuras – e a estabilidade – para grandes espessuras – da simulação.

Posteriormente, simularam-se o escoamento da bolha em ascensão, que envolvia mais movimentação e mais deformação da interface entre os fluidos, e a instabilidade de Rayleigh-Taylor, que compreendia deformações ainda superiores. Em ambos os casos, os resultados obtidos foram comparados com resultados de referência relatados na literatura e demonstraram elevada conformidade, corroborando a aplicabilidade da metodologia mesmo para representar escoamentos contendo interfaces com geometrias mais críticas.

Por fim, foram simuladas a coalescência de duas bolhas inicialmente circulares e a coalescência de duas bolhas de Taylor. No primeiro caso, a similaridade dos resultados obtidos com experimentos relatados na literatura consolida a aplicabilidade da metodologia para os escoamentos bifásicos e, em particular, para casos envolvendo mudanças topológicas. No segundo, verifica-se que a influência das paredes sobre a dinâmica das bolhas não é empecilho para a eficácia da metodologia. Novamente, um estudo paramétrico foi realizado e se avaliou a influência dos números adimensionais na coalescência conforme descrita, que demonstrou o forte impacto do número de Eötvös sobre o instante de ocorrência e, principalmente, sobre a geometria desse fenômeno.

Em resumo, a pluralidade dos escoamentos simulados permitiu confrontar a metodologia proposta sob diferentes aspectos, e a acurácia dos resultados para os diversos fenômenos analisados corroborou sua validade para descrevê-los. Portanto, resta demonstrado que o novo método proposto neste trabalho é acurado para a simulação de escoamentos monofásicos e bifásicos, com a presença de bolhas confinadas e mudanças de topologia.

5.1 Trabalhos Futuros

Ainda assim, algumas limitações da metodologia proposta foram observadas ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Para trabalhos futuros, portanto, sugerem-se os seguintes aprimoramentos:

- A extensão da metodologia para escoamentos tridimensionais, que conferiria uma maior aplicabilidade para a representação de escoamentos reais. Nesse sentido, a maior parte dos métodos e algoritmos compreendidos na metodologia pode ser prontamente generalizada para três dimensões, a exceção de dois principais pontos de atenção: a representação das malhas do domínio e da interface, cujo registro da conectividade entre os pontos não seria tão trivial

como no caso bidimensional; e o cálculo da tensão interfacial, que passaria a depender de uma composição da curvatura da interface em duas direções.

- O refinamento adaptativo da malha que discretiza o domínio, a fim de possibilhar, a cada iteração, uma melhor representação das regiões mais críticas do escoamento – melhorando a acurácia da simulação – e uma representação não tão refinada das regiões que não influenciam tanto o escoamento em determinado momento – reduzindo a quantidade de cálculos e, consequentemente, a duração da simulação. Tal implementação se mostra ainda mais importante no caso de generalização da metodologia para o caso tridimensional, que tornaria seu custo computacional substancialmente superior.
- A implementação e a validação de algoritmos de remalhamento da interface que considerem sua curvatura para a inserção e a remoção de pontos, de modo que essas operações – fundamentais para garantir um espaçamento homogêneo entre os pontos que definem a interface – não tenham como externalidade uma perda de qualidade na representação de sua geometria.
- A implementação e a validação de novos modelos de coalescência e de modelos de quebra das bolhas e gotas, com base nas teorias mais atuais para a modelagem desses fenômenos.
- A análise dos escoamentos estudados neste trabalho sob novas métricas além dos números adimensionais utilizados. Para os escoamentos com bolhas confinadas na presença da gravidade, por exemplo, apenas os números de Galileu e Eötvös não possibilitam uma interpretação direta do fenômeno de ascensão da bolha, visto que sua principal causa é a diferença de densidade entre os fluidos – ausente desses dois números. Portanto, a utilização das métricas $\frac{\rho_{in}}{\rho_{out}}$ e $\frac{\mu_{in}}{\mu_{out}}$, bem como de novas métricas a serem propostas, pode fornecer conclusões mais claras a respeito dos fenômenos bifásicos estudados.

Referências Bibliográficas

- [1] FENG, J., LI, X., BAO, Y., et al. “Coalescence and conjunction of two in-line bubbles at low Reynolds numbers”, *Chemical Engineering Science*, v. 141, pp. 261–270, 2016.
- [2] QIAO, S., MENA, D., KIM, S. “Inlet effects on vertical-downward air–water two-phase flow”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 312, pp. 375–388, 2017.
- [3] MANASSEH, R., YOSHIDA, S., RUDMAN, M. J. “Bubble formation processes and bubble acoustic signals”, *Third International Conference on Multiphase Flow (ICMF'98)*, 1998.
- [4] TRYGGVASON, G., SCARDOVELLI, R., ZALESKI, S. “Direct Numerical Simulations of Gas–Liquid Multiphase Flows”, *Cambridge University Press*, 2011.
- [5] YE, T., SHYY, W., TAI, C.-F., et al. “Assessment of sharp- and continuous-interface methods for drop in static equilibrium”, *Computers Fluids*, v. 33, n. 7, pp. 917–926, 2004.
- [6] RAJKOTWALA, A., PANDA, A., PETERS, E., et al. “A critical comparison of smooth and sharp interface methods for phase transition”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 120, 2019.
- [7] TRUJILLO, M. F. “Reexamining the one-fluid formulation for two-phase flows”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 141, 2021.
- [8] UNVERDI, S. O., TRYGGVASON, G. “A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 100, n. 1, pp. 25–37, 1992.
- [9] HIRT, C., NICHOLS, B. “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries”, *Journal of Computational Physics*, v. 39, n. 1, pp. 201–225, 1981.

- [10] SOH, G. Y., YEOH, G. H., TIMCHENKO, V. “Improved volume-of-fluid (VOF) model for predictions of velocity fields and droplet lengths in microchannels”, *Flow Measurement and Instrumentation*, v. 51, pp. 105–115, 2016.
- [11] KIM, D., IVEY, C. B., HAM, F. E., et al. “An efficient high-resolution Volume-of-Fluid method with low numerical diffusion on unstructured grids”, *Journal of Computational Physics*, v. 446, 2021.
- [12] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., OSHER, S. “A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow”, *Journal of Computational Physics*, v. 114, n. 1, pp. 146–159, 1994.
- [13] OLSSON, E., KREISS, G. “A conservative level set method for two phase flow”, *Journal of Computational Physics*, v. 210, n. 1, pp. 225–246, 2005.
- [14] AMANI, A., BALCÁZAR, N., NASERI, A., et al. “A numerical approach for non-Newtonian two-phase flows using a conservative level-set method”, *Chemical Engineering Journal*, v. 385, 2020.
- [15] NICHITA, B. A., ZUN, I., THOME, J. “A Level Set Method Coupled With a Volume of Fluid Method for Modeling of Gas-Liquid Interface in Bubbly Flow”, *Journal of Fluids Engineering*, v. 132, 2010.
- [16] DALY, B. J. “Numerical Study of the Effect of Surface Tension on Interface Instability”, *The Physics of Fluids*, v. 12, n. 7, pp. 1340–1354, 1969.
- [17] PAOLI, R., POINSOT, T., SHARIFF, K. “Testing semi-Lagrangian schemes for two-phase flow applications”. In: *Proceeding of the Summer Program*, pp. 213–222, 2006.
- [18] STARR, V. P. “A Quasi-Lagrangian System of Hydrodynamical Equations”, *Journal of Atmospheric Sciences*, v. 2, n. 4, pp. 227 – 237, 1945.
- [19] WIIN-NIELSEN, A. “On the Application of Trajectory Methods in Numerical Forecasting”, *Tellus*, v. 11, n. 2, pp. 180–196, 1959.
- [20] SAWYER, J. S. “A semi-Lagrangian method of solving the vorticity advection equation”, *Tellus*, v. 15, n. 4, pp. 336–342, 1963.
- [21] ROBERT, A. “A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations”, *Atmosphere-Ocean*, v. 19, n. 1, pp. 35–46, 1981.

- [22] ROBERT, A. “A Semi-Lagrangian and Semi-Implicit Numerical Integration Scheme for the Primitive Meteorological Equations”, *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II*, v. 60, n. 1, pp. 319–325, 1982.
- [23] PUDYKIEWICZ, J., STANIFORTH, A. “Some properties and comparative performance of the semi-Lagrangian method of Robert in the solution of the advection-diffusion equation”, *Atmosphere-Ocean*, v. 22, n. 3, pp. 283–308, 1984.
- [24] RITCHIE, H. “Eliminating the Interpolation Associated with the Semi-Lagrangian Scheme”, *Monthly Weather Review*, v. 114, n. 1, pp. 135 – 146, 1986.
- [25] MADAY, Y., PATERA, A. T., RØNQUIST, E. M. “An Operator-integration-factor splitting method for time-dependent problems: Application to incompressible fluid flow”, *Journal of Scientific Computing*, v. 5, pp. 263–292, 1990.
- [26] BOUKIR, K., MADAY, Y., MÉTIVET, B. “A high order characteristics method for the incompressible Navier—Stokes equations”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 116, n. 1, pp. 211–218, 1994.
- [27] PHILLIPS, R., PHILLIPS, T. “Flow past a cylinder using a semi-Lagrangian spectral element method”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 33, n. 1, pp. 251–257, 2000.
- [28] CELLEDONI, E., KOMETA, B. K., VERDIER, O. “High Order Semi-Lagrangian Methods for the Incompressible Navier—Stokes Equations”, *Journal of Scientific Computing*, v. 66, n. 1, pp. 91–115, 2015.
- [29] WILDE, D., KRÄMER, A., REITH, D., et al. “High-order semi-Lagrangian kinetic scheme for compressible turbulence”, *Phys. Rev. E*, v. 104, 2021.
- [30] ANJOS, G., OLIVEIRA, G., MANGIAVACCHI, N., et al. “One- and two-step semi-Lagrangian integrators for ALE-FE two-phase flow simulations”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 94, 2022.
- [31] DONEA, J., HUERTA, A. “Finite Element Methods for Flow Problems”. John Wiley & Sons, Ltd, 2003.
- [32] HEINRICH, J., VIONNET, C. “The penalty method for the Navier-Stokes equations”, *Archives of Computational Methods in Engineering*, v. 2, pp. 51–65, 1995.

- [33] DECARIA, V., ILIESCU, T., LAYTON, W., et al. “An Artificial Compression Reduced Order Model”, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 58, pp. 565–589, 2020.
- [34] BRACKBILL, J., KOTHE, D., ZEMACH, C. “A continuum method for modeling surface tension”, *Journal of Computational Physics*, v. 100, n. 2, pp. 335–354, 1992.
- [35] SUSSMAN, M., SMEREKA, P. “Axisymmetric free boundary problems”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 341, pp. 269–294, 1997.
- [36] GEUZAIN, CHRISTOPHE AND REMACLE, JEAN-FRANCOIS. “Gmsh”. Disponível em: <<http://gmsh.info/>>.
- [37] MARCHI, C., SUERO, R., ARAKI, L. “The Lid-Driven Square Cavity Flow: Numerical Solution with a 1024 x 1024 Grid”, *Journal of The Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 31, 2009.
- [38] STRUTT, J. W. “VI. On the capillary phenomena of jets”, *Proceedings of the Royal Society of London*, v. 29, n. 196-199, pp. 71–97, 1879.
- [39] FYFE, D., ORAN, E., FRITTS, M. “Surface tension and viscosity with lagrangian hydrodynamics on a triangular mesh”, *Journal of Computational Physics*, v. 76, n. 2, pp. 349–384, 1988.
- [40] HYSING, S., TUREK, S., KUZMIN, D., et al. “Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 60, pp. 1259 – 1288, 2009.
- [41] LÓPEZ, J., HERNÁNDEZ, J., GÓMEZ, P., et al. “An improved PLIC-VOF method for tracking thin fluid structures in incompressible two-phase flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 208, n. 1, pp. 51–74, 2005.
- [42] HASAN, N., ZAKARIA, Z. “Computational approach for a pair of bubble coalescence process”, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 32, pp. 755–761, 2011.